

Klausur zur Modellierung und Simulation

6. Februar 2018, WS 2017/2018

Es sind keine Hilfsmittel zugelassen. Bearbeitungszeit: 60 Minuten (Master Hochschule, Aufgaben 1 - 4) bzw. 90 Minuten (KIT, alle Aufgaben)

Aufgabe 1: (Interpolationspolynome, Nullstellen, Splines)

- a) Gegeben sind folgende Messdaten eines Prozessablaufs:

x_k	0	1	3
y_k	1	3	2

Bestimmen Sie mit Hilfe des Newton-Algorithmus das Interpolationspolynom $p(x)$, das die Messdaten verbindet.

- b) Um eine Lösung der Gleichung $p(x) = 0$ zu bestimmen, berechnen Sie nun mit dem Startwert $x_0 = 1$ den ersten Iterationsschritt des Newton-Verfahrens zur Nullstellenbestimmung (Hinweis: Verwenden Sie $p(x) = 1 + \frac{17}{6}x - \frac{5}{6}x^2$)
- c) Skizzieren Sie in einem $x - g(x)$ Diagramm das Vorgehen zur Bestimmung der Spline-Funktion $g(x)$ in den Teilintervallen $[0, 1]$ und $[1, 3]$.
- d) Bestimmen Sie außerdem mit der Zusatzbedingung $g'_1(0) = 1$ für die gegebenen Stützpunkte eine quadratische Spline-Funktion:

$$g(x) = \begin{cases} g_1(x) = a_{12}x^2 + a_{11}x + a_{10} & \text{für } 0 \leq x \leq 1 \\ g_2(x) = a_{22}x^2 + a_{21}x + a_{20} & \text{für } 1 \leq x \leq 3 \end{cases}$$

Aufgabe 2: (Numerische Integration)

Gegeben ist die Funktion

$$f(x) = \frac{2x^2}{1+x}$$

Gesucht ist ein Näherungswert des Integrals über die Funktion $f(x)$ im Intervall $[1, 3]$, d.h. für $\int_1^3 f(x)dx$. Teilen Sie das Intervall I in zwei gleiche Teilintervalle I_1 und I_2 . Berechnen Sie den numerischen Wert des Integrals

- a) mit der Trapezformel und
- b) mit der Simpsonformel.

Aufgabe 3: (Lineares Ausgleichsproblem)

Zu folgenden Messdaten soll die Ausgleichsgerade bestimmt werden.

x_i	-1	1	3	5	7
y_i	6	2	0	0	-3

- Formulieren Sie das Fehlergleichungssystem $\mathbf{A}\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{y}$.
- Stellen Sie das Normalengleichungssystem $\mathbf{A}^T \mathbf{A}\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{A}^T \mathbf{y}$ auf.
- Lösen Sie das Gleichungssystem und bestimmen Sie die Ausgleichsfunktion $f(x) = ax + b$.
- Tragen Sie die (x_i, y_i) in ein Koordinatensystem ein und skizzieren Sie die in c) gefundene Lösung der Ausgleichsgerade.
- In welchen Fällen besitzt das Fehlergleichungssystem eine Lösung? Ist es im gegebenen Fall lösbar?

Aufgabe 4: (Taylorreihe)

- Geben Sie die Taylorreihe von $\sin(2x)$ mit Entwicklungspunkt $x_0 = 0$ bis zur 5. Ordnung an (Hinweis: $\sin(0) = 0$, $\cos(0) = 1$)
- Leiten Sie die Taylorreihe von $\sin(2x)$ aus a) gliedweise ab und zeigen Sie dadurch, dass für die Ableitung gilt $(\sin(2x))' = 2\cos(2x)$.

Aufgabe 5: (Horner-Schema, numerisches Differenzieren und Nullstellen)

Gegeben ist die Funktion $f(x) = \frac{1}{3}x^4 - 2x^2 + \frac{1}{2}x$

- Berechnen Sie an der Stelle $x_0 = 2$ den Funktionswert $f(2)$ unter Verwendung des Horner-Schemas.
- Bestimmen Sie die numerischen Werte der ersten und zweiten Ableitung an der Stelle $x_0 = 0$ unter Verwendung der zentralen Differenzenformeln $Df(x)$ und $D^2f(x)$ mit einer Schrittweite von $h = 1$.
- Zur Bestimmung der Nullstelle $f(x) = 0$, verwenden Sie das Sekantenverfahren mit Startwerten $x_0 = 1$ und $x_1 = 1$ und berechnen Sie den Wert des ersten Iterationsschritts.
- Vervollständigen Sie die Implementierung des Newtonverfahrens zur Nullstellensuche:

```
1  double newton(double (*f)(double), double ←  
    (*df)(double), double x0) {  
2      ...  
3  }
```

Aufgabe 6: (Partielle Differenzialgleichung)

Gegeben ist das Raum-Zeit-Problem $u_t(t, x) = u_{xx}(t, x) - u(t, x) + x^2$, $x \in [0, 3]$, $t \geq 0$ mit Randbedingungen $u(t, 0) = 0$, $u(t, 3) = 2$ und Anfangsbedingung $u(0, x) = 1/2$ für $0 < x < 3$.

- Diskretisieren Sie die partielle Differenzialgleichung mit Vorwärtsdifferenzen in der Zeit t und zentralen Differenzen im Ort x . Wählen Sie $\Delta x = 1$. Formulieren Sie das explizite finite Differenzenverfahren und geben Sie die Randbedingungen und die Anfangsbedingung in diskreter Form an.
- Wählen Sie für die gegebene Diskretisierung $\Delta x = 1$ die größt mögliche Zeitschrittweite, so dass das explizite Differenzverfahren stabil bleibt.
- Skizzieren Sie für die gegebene Raum-Zeit-Ebene das diskrete Raum-Zeit-Gitter und markieren Sie mit unterschiedlichen Symbolen die Positionen u_i^n der Anfangs- und Randbedingungen.
- Berechnen Sie unter Verwendung des expliziten Differenzenverfahrens die Werte u_1^1, u_2^1 der ersten Zeititeration.

Viel Erfolg!

Britta Nestler, André Lust
Fakultät IWI, Hochschule Karlsruhe und Fakultät Maschinenbau, KIT

Formelsammlung zur Vorlesung „Modellierung und Simulation“

Taylorformel

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \dots + \frac{1}{n!}f^{(n)}(x_0)(x - x_0)^n + R_n(x)$$

Newton-Algorithmus

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Regula-Falsi Verfahren

$$x_{n+1} = x_{n-1} - f(x_{n-1}) \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})}$$

Rechteckformel

$$I = h \sum_{i=0}^{n-1} f(\xi_i), \quad \text{mit} \quad \xi_i = x_i \quad \text{oder} \quad \xi_i = \frac{1}{2}(x_i + x_{i+1}) \quad \text{oder} \quad \xi_i = x_{i+1}$$

Trapezformel

$$I_T = \frac{h}{2} (f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \dots + 2f_{n-1} + f_n)$$

Simpsonformel

$$I_S = \frac{4}{3}h(f_1 + f_3 + \dots + f_{2m-1}) + \frac{2}{3}h(f_2 + f_4 + \dots + f_{2m-2}) + \frac{1}{3}h(f_0 + f_{2m})$$

Runge-Kutta Verfahren 2. Ordnung

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2} \{ f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_k + hf(x_k, y_k)) \}$$

Runge-Kutta Verfahren 4. Ordnung

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{6} (F_1 + 2F_2 + 2F_3 + F_4)$$

mit

$$\begin{aligned} F_1 &= f(x_k, y_k) \\ F_2 &= f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}F_1\right) \\ F_3 &= f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}F_2\right) \\ F_4 &= f(x_{k+1}, y_k + hF_3) \end{aligned}$$

Fehlerfunktional des Ausgleichsproblems

$$E(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) := \sum_{i=1}^n \left(y_i - f(x_i) \right)^2 = \sum_{i=1}^n \left(y_i - \sum_{j=1}^m \lambda_j f_j(x_i) \right)^2$$

Jacobi-Matrix

$$Df(\mathbf{x}_0) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(\mathbf{x}_0) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(\mathbf{x}_0) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(\mathbf{x}_0) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(\mathbf{x}_0) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(\mathbf{x}_0) & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n}(\mathbf{x}_0) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}(\mathbf{x}_0) & \frac{\partial f_n}{\partial x_2}(\mathbf{x}_0) & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n}(\mathbf{x}_0) \end{pmatrix}$$

Gauß-Newton-Verfahren (für nichtlineare Ausgleichsprobleme):

Für $k = 0, 1, \dots$

- Berechne $\boldsymbol{\delta}^{(k)}$ als Lösung des linearen Ausgleichsproblems:
Minimiere $\|\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(k)}) + D\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(k)})\boldsymbol{\delta}^{(k)}\|_2^2$
- Setze $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \boldsymbol{\delta}^{(k)}$.