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

Klausur zur Modellierung und Simulation
31. Januar 2011, WS 2010/11

Es sind keine Hilfsmittel zugelassen. Bearbeitungszeit: 40 Minuten (Master, Aufgaben 1 - 4) bzw. 90 Minuten (KIT bzw. Wahlfach/Hochschule, Aufgaben 1 - 7)

Aufgabe 1: (Numerisches Differenzieren)
a) Bestimmen Sie für eine allgemeine Funktion $f(x)$ mit Hilfe der Taylorformel den Diskretisierungsfehler der linksseitigen Differenzenformel

$$D^{-}f(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}.$$

(Hinweis: Entwickeln Sie hierzu den Ausdruck $f(x_0 - h)$ in eine Taylorreihe)

b) Bestimmen Sie für die Funktion $f_1(x) = 3x - \frac{2}{x}$ den Wert der linksseitigen Ableitung $D^{-}f(x_0)$ an der Stelle $x_0 = 1$ und für eine Schrittweite von $h = 1/2$.

c) Leiten Sie aus der zentralen Differenzenformel für die 2. Ableitung $D^2 f(x_0)$ und über den Ansatz $D^{3+}f(x_0) = D^{+}(D^2 f(x_0))$ eine rechtsseitige Differenzenformel für die 3. Ableitung her.

d) Bestimmen Sie für die Funktion $f_1(x)$ unter b) den Wert der rechtsseitigen 3. Ableitung $D^{3+}f(x_0)$ an der Stelle $x_0 = 1$ und für eine Schrittweite von $h = 1/2$.

Aufgabe 2: (Raum-Zeit-Probleme)
Gegeben ist die partielle Differenzialgleichung

$$u_t(t,x) = u_{xx}(t,x) - 2u_x(t,x) + (u(t,x)) \quad \text{für} \quad x \in [0,3] \quad \text{und} \quad t \geq 0$$

mit Randbedingungen $u(t,0) = -1$, $u(t,3) = 8$ und der Anfangsbedingung $u(0,x) = 2$ für $0 < x < 3$. Das Gitter ist so gewählt, dass $\Delta x = 1$ und $\Delta t = 1/2$ ist.

a) Diskretisieren Sie die partielle Differenzialgleichung mit Vorwärtsdifferenzen in der Zeit t und zentralen Differenzen in der Ortskoordinate x. Stellen Sie die Formel für das explizite Differenzenverfahren auf. Geben Sie hierbei auch die Randbedingungen und die Anfangsbedingung in diskreter Form an.
b) Berechnen Sie im Raum-Zeit-Gitter unter Verwendung des expliziten Differenzenverfahrens die vier Werte $u_i^1, i = 0,1,2,3$ der ersten Zeititeration.

Aufgabe 3: (Parallelisierung)
Für die Parallelisierung mit MPI wählen Sie aus den folgenden Antwortmöglichkeiten die richtige Lösung aus und schreiben Sie diese in Ihren Klausurbogen:
Zur Simulation der Wärmeleitungsgleichung soll eine Simulationsserie mit 10 verschiedenen Randbedingungen möglichst effizient (d.h. ohne Zeitverlust) durchgeführt werden. Sie haben einen Rechnerverbund mit 10 Knoten zur Verfügung.

(i) Sie starten alle Rechnungen auf einem Rechner.
(ii) Sie starten alle Rechnungen parallelisiert auf 10 Knoten nacheinander.
(iii) Sie starten alle 10 Rechnungen gleichzeitig auf jeweils einem Knoten.

Die Verwendung von kollektiven Aufrufen, wie dem globalen Kommunikationsoperator MPI_Reduce, ermöglichen es

(i) mit allen Knoten gleichzeitig zu kommunizieren
(ii) unnötige Wartezeiten der Algorithmen zu vermeiden
(iii) Ringübertragungen leicht zu implementieren

Bei der Parallelisierung von numerischen Algorithmen ist zu beachten, dass

(i) alle Abschnitte des Algorithmus sequentiell sind
(ii) alle Abschnitte des Algorithmus parallel sind
(iii) ein MPI-Compiler verwendet wird
(iv) der Algorithmus die Daten an den richtigen Stellen synchronisiert

Aufgabe 4: Ausgleichsgerade
Zu folgenden Messdaten soll die Ausgleichsgerade bestimmt werden.

x_i	-2	0	1	2	4
y_i	-2	1/5	-1	1	2

a) Formulieren Sie das Fehlergleichungssystem $\boldsymbol{A\lambda} = \boldsymbol{y}$.

b) Stellen Sie das Normalengleichungssystem $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A\lambda} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}$ auf.

c) Lösen Sie das Gleichungssystem und bestimmen Sie die Ausgleichsgerade $f(x) = ax + b$.

d) Tragen Sie die (x_i, y_i) Wertepaare in ein Koordinatensystem ein und skizzieren Sie die in c) gefundene Lösung der Ausgleichsgerade.

Aufgabe 5: (Interpolationspolynom und Splines)
a) Gegeben sind die Stützpunkte $(-1, 5)$, $(0, -2), (1, 9)$ und $(2, -4)$. Bestimmen Sie z.B. durch Anwendung des Newton-Algorithmus (Schema der „Dividierten Differenzen") das Interpolationspolynom, das die Stützpunkte verbindet.

b) Gegeben sind die Stützpunkte $(-1, 5)$, $(0, -2)$ und $(1, 9)$. Bestimmen Sie mit der Zusatzbedingung $g_1'(-1) = -1$ für die gegebenen Stützpunkte eine quadratische Spline-Funktion der Form

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

Aufgabe 6: (Numerische Integration)
Berechnen Sie für das Integral

$$\int_0^1 \frac{1}{1+x}\, dx$$

einen Näherungswert. Zerlegen Sie hierfür das Intervall $[0, 1]$ in vier Teilintervalle und verwenden Sie:
a) die Trapezformel und
b) die Simpsonformel.
c) Berechnen Sie das Integral und vergleichen Sie die Näherungswerte mit dem exakten Wert $\ln 2 = 0,693$.

Aufgabe 7: (Anfangswertproblem)
Gegeben ist die gewöhnliche Differenzialgleichung

$$y'(x) = x^2 + \frac{1}{2}y(x) \qquad \text{mit} \quad y(0) = 1,\ x \geq 0$$

a) Geben Sie die Euler'sche Iterationsformel für diese Differenzialgleichung an.
b) Bestimmen Sie für eine Schrittweite $h = 1/2$ die ersten beiden Iterationsschritte des Eulerverfahrens.
c) Geben Sie das Runge-Kutta Verfahren 2. Ordnung für diese Differenzialgleichung an.
d) Bestimmen Sie für $h = 1/2$ den ersten Iterationsschritt des Runge-Kutta Verfahrens 2. Ordnung.

Viel Erfolg!

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

Formelsammlung zur Vorlesung „Modellierung und Simulation"

Taylorformel

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

Newton-Algorithmus

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

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

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

Trapezformel

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

Simpsonformel

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

Runge-Kutta Verfahren 2. Ordnung

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

Runge-Kutta Verfahren 4. Ordnung

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

mit

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

Fehlerfunktional des Ausgleichsproblems

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

Jacobi-Matrix

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

Gauß-Newton-Verfahren (für nichtlineare Ausgleichsprobleme):

Für $k = 0, 1, \ldots$

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