ETHZ, D-MATH
Probeprüfung
Numerische Methoden D-PHYS, FS 2017
Dr. V. Gradinaru
03.05.2017 / 05.05.2017

Prüfungsdauer: 90 Minuten

Maximal erreichbare Punktzahl: 40 Punkte

1 (15 Punkte) Ausgleichsrechnung

Die Parameter $\underline{a} \in \mathbb{R}^n$ und $c \in \mathbb{R}$ der Funktion

$$f(\underline{t}) = c \exp(\underline{a} \cdot \underline{t}) \tag{1.1}$$

sollen bestimmt werden. Die Anzahl Parameter ist $n = 5$. Dazu wurde f in $m = 20$ Punkten $\underline{t}_i \in \mathbb{R}^n$ gemessen, die Messwerte werden mit f_i bezeichnet, Sie finden die numerischen Werte von $\underline{t}_i$ und f_i im Python Template.

(i) Formulieren Sie das Problem als eine lineare Ausgleichsrechnung

$$\min_{c,\underline{a}} \|\mathbf{A}\underline{x} - \underline{b}\|_2 \tag{1.2}$$

und bestimmen Sie die Matrix $\mathbf{A}$ und die Vektoren $\underline{x}$ und $\underline{b}$.

(ii) Lösen Sie (1.2) mit einer geeigneten `numpy` oder `scipy` Funktion.

(iii) Lösen Sie (1.2) mit der QR-Zerlegung.

(iv) Lösen Sie (1.2) mit der SVD-Zerlegung.

2 (10 Punkte) Satellitenbahnen

Die Bahn eines Satelliten um die Erde ist geben durch die Gleichung

$$R = C(1 + e\sin(\theta + \alpha))^{-1}$$

wobei $(R(t), \theta(t))$ die Polarkoordinaten des Satelliten sind. Die Parameter C, e und α sind Konstanten.

Die Koordinaten des Satelliten wurden in drei verschiedene Punkte seiner Umlaufbahn gemessen. In $\theta = -30°$, $0°$ und $30°$ war der Satellit $R = 6870\,\text{km}$, $6728\,\text{km}$ und $6615\,\text{km}$ vom Zentrum der Erde entfernt.

(i) Bestimmen Sie die Parameter C, e und α und den kürzesten Abstand des Satelliten vom Erdmittelpunkt.

3 (15 Punkte) Chemisches Reaktionsnetzwerk

Die folgende Differenzialgleichung ist eine Modelgleichung für ein kleines chemisches Reaktionsnetzwerk:

$$\frac{d}{dt}A = -k_1 A + k_2 BC \tag{3.1}$$

$$\frac{d}{dt}B = k_1 A - k_2 BC - k_3 B^2 \tag{3.2}$$

$$\frac{d}{dt}C = k_3 B^2 \tag{3.3}$$

Wobei die Buchstaben A, B und C die Stoffmenge des jeweiligen Elements bezeichnen und $k_1 = 0.1$, $k_2 = 10^2$ und $k_3 = 10^4$ die Reaktionsrate.

Die Anfangsbedingungen sind

$$A(0) = 1, \quad B(0) = 0, \quad C(0) = 0. \tag{3.4}$$

(i) Bringen Sie die Gleichung auf die Form $\dot{y} = f(y)$.

(ii) Bestimmen Sie (numerisch) die Eigenwerte der Jacobimatrix df, für drei verschiedene Stoffmengen

A	B	C
1	0	0
0.999	0.001	0.01
0.1	0.00001	0.98

Hinweis: Die Werte befinden sich bereits im Template.

(iii) Wählen Sie ein geeignetes Runge-Kutta Verfahren und implementieren Sie dieses in Python. Das Verfahren soll mindestens dritter Ordnung sein. Begründen Sie Ihre Wahl.

(iv) Berechnen Sie die Gleichgewichtsstoffmengen

$$A_\infty = \lim_{t\to\infty} A(t), \quad B_\infty = \lim_{t\to\infty} B(t), \quad C_\infty = \lim_{t\to\infty} C(t)$$

analytisch.

(v) Wie lange dauert es bis sich A, B und C bis auf 10^{-2} an die Gleichgewichtsstoffmengen angeglichen hat?

Hinweis: Nehmen Sie an, dass ab $t = 500$ die Lösung monoton gegen A_∞, B_∞, C_∞ konvergiert.

Hinweis: Die Simulation sollte bis $t \in [10^3, 10^5]$ laufen. Die Anzahl Zeitschritte sollte zwischen 500 und 10^4 liegen.

Hinweis: Um A_∞, B_∞ und C_∞ numerisch berechnen zu können müssen Sie sich $B(t)$ für kleine Zeiten genau anschauen und eventuell die Integration in verschiedene Phasen unterteilen.

Hinweis: Diese Teilaufgabe ist nicht trivial und gibt 4 Punkte.