

## 1. Implizites Euler Verfahren (4 Punkte)

- a) Schreiben Sie auf Papier die in der Vorlesung besprochenen Eigenschaften des impliziten Euler Verfahrens für die numerische Approximation der Lösung eines Anfangswertproblems.
- b) *Korrigieren* Sie die 2 Fehler in folgender Funktion.  
(Wird etwas korrektes fälschlicherweise “verbessert”, gibt es Punktabzug. Insgesamt können auf diese Aufgabe allerdings nicht weniger als 0 Punkte erreicht werden.)

```
1 | from numpy import *
   | from scipy.optimize import newton
3 |
   | def implicitEuler(f, Df, T, y0, N):
5 |     h = float(T) / N
   |     y = zeros(N+1)
7 |     y[0] = y0
   |
   |     for i in xrange(N):
9 |         F = lambda x: x - y[i] - h*f(x)
11 |         DF = lambda x: - h*Df(x)
   |         y[i+1] = newton(F, y[i+1], DF)
13 |
   |     return y
```

## 2. NMR Analyse (6 Punkte)

Sei der theoretische Output einer NMR-Analyse gegeben durch

$$f(x) := \exp\left(-\frac{x}{400}\right) \left( \cos\left(\frac{2\pi x}{4.9}\right) + \cos\left(\frac{2\pi x}{4.4}\right) \right)$$

für  $x = 0, \dots, N - 1$  mit  $N = 2^{12}$  Punkten.

- a) Plotten Sie die spektrale Leistungsdichte des Signals.
- b) Addieren Sie zu den Ergebnissen ein Rauschen, das aus Zufallszahlen uniform aus  $[-2, 2]$  besteht, um ein gemessenes Signal zu simulieren. Plotten Sie das theoretische und das gemessene Signal.
- c) Plotten Sie die spektrale Leistungsdichte des gemessenen Signals. Sind die relevanten Frequenzen leicht erkennbar?
- d) Dämpfen Sie die Messung mit einem Faktor  $\exp\left(-\frac{x}{200}\right)$  und plotten Sie wiederum die spektrale Leistungsdichte des erhaltenen neuen Signals. Sind die relevanten Frequenzen nun leicht erkennbar?
- e) Sei  $a$  der Betragsgrösste Fourier Koeffizient des gedämpften Signals. Filtern Sie das gedämpfte Signal, indem Sie nur die Frequenzen behalten, deren entsprechende Fourier-Koeffizienten im Betrag grösser als  $\frac{3}{4}a$  sind. Plotten Sie die spektrale Leistungsdichte des gefilterten gedämpften Signals. Plotten Sie das gefilterte gedämpfte Signal, so dass man dieses mit dem Original vergleichen kann.

### 3. Morse Potential aus Messwerten (12 Punkte)

Ein Experimentator modelliert ein Molekül mit dem Morse Potential

$$M(x) := D (\exp(-2\beta(x - r)) - 2 \exp(\beta(x - r))),$$

mit Parametern  $D > 0$ ,  $\beta > 0$  und  $r > 0$ . Die fehlerbehafteten Messungen  $(x_i, M_i)$  für Quecksilber liegen uns vor. Im Folgenden wollen wir daraus Werte für die Parameter mit Hilfe der nichtlinearen Ausgleichsrechnung

$$D, \beta, r = \operatorname{argmin}_{D', \beta', r'} \frac{1}{2} \|F(D', \beta', r')\|_2^2$$

mit

$$F(D, \beta, r) := \begin{bmatrix} M(x_0) - M_0 \\ \vdots \\ M(x_N) - M_N \end{bmatrix}$$

bestimmen.

- a) Implementieren Sie eine Funktion `lstsq` zur Lösung eines *linearen* Ausgleichsproblems  $\mathbf{A}\underline{x} = \underline{b}$ . Dabei soll die QR-Zerlegung von  $\mathbf{A}$  verwendet werden.
- b) Implementieren Sie nun den Gauss-Newton Algorithmus in der Funktion `gauss_newton`. Verwenden Sie `lstsq` aus obiger Teilaufgabe zur Lösung der linearen Teilprobleme.  
*Hinweis:* Falls Sie obige Aufgabe nicht gelöst haben, so verwenden Sie notfalls die Funktion `lstsq` aus `numpy.linalg`.
- c) Geben Sie die gefundenen Werte der Parameter aus und plotten Sie das Residuum  $|M(x_i) - M_i|$  gegen  $x_i$  für  $i = 0, \dots, N$ .

#### 4. Runge Kutta (15 Punkte)

- a) Implementieren Sie ein Runge-Kutta-Verfahren mit dem Butcher Tableau der so genannten *England Formel*:

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \\ 1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline & \frac{1}{6} & 0 & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$

- b) Finden Sie empirisch die Konvergenzordnung dieses Verfahrens indem Sie es für die Lösung der Gleichung  $\ddot{y} = -y(t)$  auf  $[0, 10]$  verwenden.
- c) Verwenden Sie diese Methode, um die Gleichung

$$\begin{cases} \ddot{y} = 10025 - 10025y - 10\dot{y} \\ y(0) = 2 \\ \dot{y}(0) = 95 \end{cases} \quad (1)$$

auf  $[0, 1]$  mit  $2^{12}$  Zeitschritten zu lösen. Plotten Sie die numerische Lösung.

- d) Kann man mit dieser Methode in 5 Zeitschritten eine glaubwürdige Annäherung der Lösung der letzten Gleichung zur Zeit  $T = 1$  erhalten? Warum?
- e) Implementieren Sie die Stabilitätsfunktion  $S : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ . Das Template verwendet dieses  $S(z)$  um den Stabilitätsbereich der Runge-Kutta-Methode zu plotten. Bestimmen Sie durch Ablesen aus diesem Bild eine maximale Zeitschrittweite  $h$ , die eine stabile Lösung für letztgennante Differentialgleichung garantiert. Notieren Sie die Herleitung und den Wert auf Papier.

## 5. Monte-Carlo-Quadratur (15 Punkte)

Wir betrachten das Integral

$$I = \int_0^1 \int_0^1 f(x, y) \, dx dy \quad \text{mit} \quad f(x, y) := \exp(x^2 \sin(2\pi y)).$$

- a) Berechnen Sie mit `dblquad` aus `scipy.integrate` eine Näherung an  $I$ , die Sie im Folgenden als *exakten* Wert verwenden können. Im weiterem dürfen Sie den *exakten* Wert aus dem Template verwenden.
- b) Implementieren Sie in `mcquad(f, N)` eine Monte-Carlo-Methode mit  $N$  Zufallspunkten aus  $[0, 1]^2$  für die Approximation  $I_N$  von  $I$  und für den Radius  $\tilde{\sigma}_N$  des Vertrauensintervalls. Für  $N = 1000$  geben Sie  $I_N$ ,  $\tilde{\sigma}_N$ , den relativen und den absoluten Fehler aus. Schreiben Sie die mathematische Bedeutung des von Ihnen hier berechneten Intervalls  $[I_N - \tilde{\sigma}_N, I_N + \tilde{\sigma}_N]$  auf Papier.
- c) Implementieren Sie `mcexperiments(f, N, M)`, die  $M$  solche Monte-Carlo-Experimente durchführt und entsprechende  $I_{N,M}$  und  $\tilde{\sigma}_{N,M}$  berechnet; geben Sie  $I_{N,M}$ ,  $\tilde{\sigma}_{N,M}$  und den relativen und den absoluten Fehler für  $M = 100$  und  $N = 1000$  aus. Schreiben Sie die mathematische Bedeutung der  $M = 100$  berechneten Vertrauensintervalle auf Papier.
- d) Wenden Sie die Technik “Control Variates” zur Reduktion der Varianz an. Hierzu sollten Sie eine Approximation 2er Ordnung verwenden. Geben Sie die entsprechenden  $I_{N,M}$ ,  $\tilde{\sigma}_{N,M}$  den relativen und den absoluten Fehler für  $M = 100$  und  $N = 1000$  aus.
- e) Verallgemeinern Sie (nur auf Papier) diese Technik für den Fall

$$f(x_1, \dots, x_d) = \exp(f_1(x_1)f_2(x_2) \dots f_d(x_d))$$

so, dass neben der Monte-Carlo Methode für den Rest nur die analytische oder numerische Berechnung von Integralen auf  $[0, 1]$  nötig ist.