ETHZ, D-MATH
Prüfung
Numerische Methoden D-PHYS, FS 2017

Dr. V. Gradinaru

31.01.2018

1. *(6 Punkte) Pendelgleichung*

Die Bewegungsgleichungen für ein mathematisches Pendel lauten

$$\ddot{\alpha} = -\sin\alpha. \tag{1}$$

Die Anfangsbedingungen sind

$$\alpha(0) = 0.5\pi \quad \dot{\alpha}(0) = 0. \tag{2}$$

a) Schreiben Sie (1) als autonome Differenzialgleichung erster Ordnung.

b) Implementieren Sie das implizite Mittelpunktsverfahren.

c) Berechnen Sie die numerische Lösung von (1) mit Ihrer Implementierung von b) und plotten Sie die Evolution des Pendels im Phasenraum bis zur Zeit $t = 10$.

Hinweis: Falls Sie a) oder b) nicht gelöst haben, können Sie hier auch eine andere Methode ausser `ode45` verwenden.

d) Berechnen Sie numerisch die Konvergenzordnung der von Ihnen implementieren Methode zur Zeit $t = 10$ und plotten Sie den Fehler gegen die Anzahl Zeitschritte. *Hinweis:* Verwenden Sie `ode45` um eine Referenzlösung zu berechnen.

Bitte wenden!

2. *(6 Punkte) Eigenwerte*

Im Template `2_power_method.py` ist eine Matix `A` definiert. Implementieren Sie die Potenzmethoden um

- den grössten Eigenwert von `A`,
- den kleinsten Eigenwert von `A`,
- und jener Eigenwert, welcher am nächsten bei 35 liegt

zu berechnen.

Siehe nächstes Blatt!

3. *(6 Punkte) Monte-Carlo-Quadratur in mehreren Dimensionen*

Wir betrachten das Integral

$$I = \int_{[0,1]^d} \log(1 + |x_1 + \cdots + x_d|^2) d\mathbf{x}$$

a) Implementieren Sie eine `Python`-Funktion `mcquad(f, d, N)`, die das obige Integral mit der Monte-Carlo-Methode mit $N = 10^k$ Zufallsvektoren numerisch berechnet.

b) Verwenden Sie `mcquad` mit $k = 6$ und $d = 10$ um $M = 100$ verschiedene Approximationen (z_i, σ_i) des Integrals I zuberechenen. Bestimmen Sie den Mittelwert und die Standardabweichung σ_M von z_i.

Welche der folgenden Aussagen sind korrekt?

(i) Der exakte Wert I liegt immer in mindestens 68% der Vertrauensintervallen $[z_i - \sigma_i, z_i + \sigma_i]$.

(ii) Die Wahrscheinlichkeit, dass $I \in [z_i - \sigma_i, z_i + \sigma_i]$ ist (ca.) 0.68.

(iii) I liegt mit Wahrscheinlichkeit 0.68 in $[23.932, 26.339]$.

(iv) Je nach dem welche Zufallsvektoren gezogen wurden, kann z_i auch negativ sein.

(v) Die MC-Methode ist exakt für lineare Integranden.

(vi) Wir erwarten dass die Länge des Vertrauensintervals proportional zu $\frac{1}{\sqrt{N}}$ ist.

	(i)	(ii)	(iii)	(iv)	(v)	(vi)
wahr						
falsch						

Hinweis: Kreuzen Sie die jeweils korrekte Antwort an. Für jede richtige Antwort gibt es +0.25 Punkte, für jede falsche Antwort −0.25. Insgesamt gibt es für die Multiple-Choice Aufgabe nicht weniger als 0 Punkte.

c) Bestimmen Sie das 99%-Vertrauensintervall für $d = 10$ und $k = 6$.

Bitte wenden!

4. *(6 Punkte) Polynomfit*

Wir wollen die Funktion

$$f(x) := \frac{1}{1+x^2} \tag{3}$$

auf dem Interval $[-5, 5]$ mit einem Polynom $P_n(x)$ von Grad n approximieren. Dazu schreiben wir ein lineares Ausgleichsproblem mit m gleichmässig in $[-5, 5]$ verteilten Punkten $\{(x_i, f(x_i))\}_{i=1}^m$ wie folgt:

$$\mathbf{A}\mathbf{c} = \mathbf{b} \tag{4}$$

wobei $\mathbf{c}$ die $n+1$ Koeffizienten des Polynoms P_n sind.

a) Leiten Sie für beliebiges $n > 1$ und $m > 1$, auf Papier, die Matrix $\mathbf{A}$ und die rechte Seite $\mathbf{b}$ her. Implementieren Sie sie anschliessend beide in Python.

b) Implementieren Sie die Methode der kleinsten Quadrate für beliebiges $\mathbf{A}$ und $\mathbf{b}$. Verwenden Sie die QR-Zerlegung.

c) Lösen Sie das lineare Ausgleichsproblem für Polynome mit Grad $n = 14$ und $m = 20$ durch einen geeigneten Aufruf Ihrer Implementation der Methode der kleinsten Quadrate.

5. *(8 Punkte) Chemisches Reaktionsnetzwerk*

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

$$\frac{d}{dt}A = -k_1 A + k_2 BC \tag{5}$$
$$\frac{d}{dt}B = k_1 A - k_2 BC - k_3 B^2 \tag{6}$$
$$\frac{d}{dt}C = k_3 B^2 \tag{7}$$

Wobei die Buchstaben A, B und C die Stoffmenge des jeweiligen Elements bezeichnen und $k_1 = 0.1$, $k_2 = 10^1$ und $k_3 = 10^3$ die Reaktionsrate.

Die Anfangsbedingungen sind

$$A(0) = 1, \quad B(0) = 0, \quad C(0) = 0. \tag{8}$$

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

b) Implementieren Sie `ode23s`.

c) 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.

d) Verwenden Sie Ihre Implementation von `ode23s` um die Evolution von $A(t)$, $B(t)$ and $C(t)$ bis zur Zeit $t = 5000$ zu approximieren und plotten Sie den Verlauf von A, B, C. Wie lange dauert es bis sich A, B und C bis auf 10^{-2} an die exakten Gleichgewichtsstoffmengen angeglichen hat?

Hinweis: Falls Sie b) nicht gelöst haben, dann verwenden Sie bitte hier eine andere für dieses Problem geeignete Methode.