ETHZ, D-MATH

Prüfung

Numerische Methoden D-PHYS, FS 2020

Dr. V. Gradinaru

06.08.2020

Prüfungsdauer : 180 Minuten.

1. Ausgleichsrechnung mit linearen Nebenbedingungen (8 Punkte)

Die Messungen (x, y) einer unbekannten Funtkion $y = f(x)$ sind im Template `1_Ausgleichsrechnung_template.py` gegeben.

a) Schreiben Sie auf Papier ein lineares Ausgleichsproblem um f mit einem Polynom $P_n(x)$ vom Grad n via gegebener Messungen zu approximieren.

b) Plotten Sie P_6, das f im Sinne der kleinsten Quadrate approximiert.

c) Die Messungen mit den Indizes $[0, 2, 4]$ werden als besonders wichtig gesehen; darum werden diese als Nebenbedingungen betrachtet. Schreiben Sie ein Ausgleichsproblem mit diesen Nebenbedingungen um f mit einem Polynom Q_n vom Grad n zu approximieren.

d) Plotten Sie Q_4, das f im Sinne dieses Ausgleichsproblems mit Nebenbedingungen approximiert, zusammen mit P_6 aus b).

Bitte wenden!

2. Potenzmethoden (8 Punkte)

Im Template `2_Potenzmethoden_template.py` ist eine Matrix $\mathbf{A}$ definiert. Die Eigenwerte von $\mathbf{A}$ sind im Folgenden so geordnet:

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \ldots < \lambda_{n-1} < \lambda_n.$$

a) Geben Sie die Eigenwerte und entsprechenden Eigenvektoren von $\mathbf{A}$ aus.

b) Verwenden Sie die Potenzmethoden, um die folgenden Eigenwerte mit maximal 10000 Iterationen und einer absoluten Toleranz $|\rho - \rho_{\text{old}}|/|\rho|$ von 10^{-8} zu berechnen. Ihre Funktionen sollten jeweils den Eigenwert, den entsprechenden Eigenvektor und die benötigte Anzahl Iterationen ausgeben.

(i) λ_n, den grössten Eigenwert von $\mathbf{A}$;

(ii) λ_1, den kleinsten Eigenwert von $\mathbf{A}$, wobei Sie **keine** Gleichungsysteme lösen dürfen;
Hinweis: Verwenden Sie eine geeignet verschobene (Englisch:shifted) Matrix und Ihre Funktion von (i).

(iii) λ_1, den kleinsten Eigenwert von $\mathbf{A}$, wobei Sie lineare Gleichungsysteme mit einer **einzigen** LU-Zerlegung lösen sollen;

(iv) Den Eigenwert von $\mathbf{A}$, welcher am nächsten an 42 liegt.

c) Erklären Sie die beobachteten/erwarteten Unterschiede in der Anzahl der Iterationen und in der Laufzeit bei den Aufgaben in b) für diese Matrix.

Siehe nächstes Blatt!

3. Nichtlineare Algebraische Gleichung (8 Punkte)

a) Berechnen Sie numerisch den Schnittpunkt der Ellipsoide

$$\begin{aligned} \frac{x^2}{4} + \frac{y^2}{9} + \frac{z^2}{25} &= 1 \\ (x-2)^2 + \frac{(y-1)^2}{2} + \frac{(z-1)^2}{2} &= 1 \\ \frac{(x+3)^2}{75} + \frac{(y+1)^2}{3} + \frac{(z+1)^2}{3} &= 1 \end{aligned}$$

mit einer Funktion aus `scipy.optimize` und mit einer eigenen Implementierung des Newton-Verfahrens im Template `3_Newton_template.py`.

b) Finden Sie die vier Fehler im folgenden Newton-Code (schreiben Sie direkt auf dieses Papier):

```
def newton(f, x0, df, tol=1e-8, N=1000):
    error = np.linalg.norm(f(x0))
    i=0
    x=x0
    while error > tol and i > N:
        fprime = df(x)
        fx = f(x)
        x = x + np.linalg.solve(fprime, fx)
        error = np.linalg.norm(f(x))
        i = 1
        return x
```

c) Wahr oder Falsch? (Schreiben Sie Ihre Antwort und Ihre Begründung direkt auf dieses Papier.)

(c.1) Die Newton-Iteration konvergiert immer quadratisch.

(c.2) Das Newton-Verfahren funktioniert nicht in der Raumfahrt, da es dort die Relativitätstheorie gilt.

Bitte wenden!

4. Splitting separabler Hamiltonsysyteme (8 Punkte)

a) Leiten Sie die Teilschritte des Splitting-Verfahrens für Hamiltonsche Differentialgleichungen mit separabler Hamilton-Funktion $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q})$ im Detail her.

b) Schreiben Sie die oberen Schritte für $V(\mathbf{q}) = M(\|\mathbf{q}\|)$ mit dem Morse-Potential

$$M(x) = V_0 + V_0 \left(e^{-2\beta(x-s)} - 2e^{-\beta(x-s)} \right)$$

und $T(\mathbf{p}) = \frac{1}{2}\mathbf{p}^T\mathbf{p}$ auf Papier.

(Das ist ein Model in der Molekulardynamik mit Zentralkraft aus dem Morse-Potential.)

c) Wir nehmen $\mathbf{p}, \mathbf{q} \in \mathbb{R}^2$; die Modelparameter V_0, β, s, die Startwerte, die Endzeiten (früh und spät) und die jeweils nötige Anzahl an Schritten für die folgenden Simulationen sind im Templatefile `4_HamiltonSplitting_template.py` angegeben. Das Templatefile generiert automatisch numerische Ergebnisse und Bilder passend zu den folgenden Aufgaben.

Implementieren Sie die Teilschritte des Splitting-Verfahrens und berechnen Sie die Lösungen mit der Runge–Kutta–Nystrom-Methode der Ordnung 4 und 6 (d.h. `BM42` und `BM63`).

d) Lösen Sie diese Differentialgleichung mit dem standard adaptiven Integrator aus `scipy.integrate`, der die Runge–Kutta-Methode nach Dormand–Prince verwendet; setzen Sie hier die Toleranzen `rtol = atol =` 10^{-6}.

e) Wenden Sie die drei Methoden auch für die Langzeitpropagation an. Bechreiben Sie die Vor- und Nachteile jeder dieser drei Ansätze für Kurzzeit- und für Langzeitintegration.

Siehe nächstes Blatt!

5. Runge–Kutta-Verfahren (8 Punkte)

Das Butcher-Schema der Runge–Kutta-3/8-Regel ist

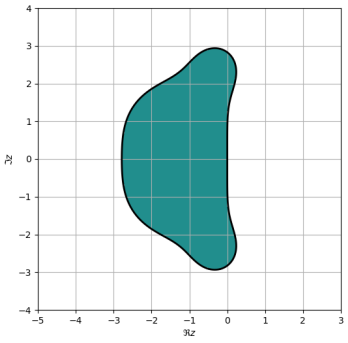
$$\begin{array}{c|cccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 0 \\ \hline & \frac{1}{8} & \frac{3}{8} & \frac{3}{8} & \frac{1}{8} \end{array} .$$

Verwenden Sie für diese Aufgabe das Template `5_RK38_template.py`.

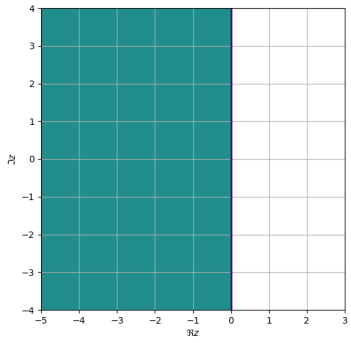
a) Ist die Runge–Kutta-3/8-Regel eine explizite oder eine implizite Methode? Finden Sie die Stabilitätsfunktion dieser Regel.
Hinweis: Sie dürfen die Funktionen `symbols, Matrix, pprint` *aus* `sympy` *verwenden. Die Inverse einer* `Matrix U` *kann mit* `U.inv()` *berechnet werden;* `*` *multipliziert zwei* `Matrix`*-Objekte im mathematischen Sinn.*

b) Finden Sie die Konvergenzordnung dieses Verfahrens, indem Sie entsprechene numerische Experimente für die logistische Differentialgleichung mit $\alpha = \beta = 10$, Startwert $y(0) = 0.01$ und Endzeit $T = 1$ durchführen.

c) Eines der folgenden Bilder entspricht dem Stabilitätsgebiet der Runge–Kutta-3/8-Regel. Geben Sie an welches und begründen Sie Ihre Antwort.



a) Der grüne Bereich



b) Die ganze linke Halbebene

d) Für jedes der Stabilitätsgebiete aus c) wählen Sie eine Zeitschrittweite h, so dass die Methode für das Testproblem $\dot{y} = \lambda y$ mit $\lambda = -3-3i$ (wobei $i^2 = -1$) konvergiert.

Bitte wenden!

6. Quadraturformeln (8 Punkte)

Sei die Quadraturformel auf $[-1, 1]$ gegeben durch die Knoten und Gewichte im File `6_Quadrature_template.py`.

a) Welche Ordnung hat diese Quadraturformel? Schreiben Sie ein Programm, mit dem Sie Ihre Antwort begründen.

b) Zu welcher Klasse von Quadraturformeln gehört diese Quadraturformel? Begründen Sie Ihre Aussage.

c) Schreiben Sie ein Programm, das eine auf diesen Knoten und Gewichten basierte zusammengestetzte Quadraturformel berechnet. Wenden Sie dies für die Funktionen

$$f_1(x) = \frac{1}{1 + 5x^2}, \qquad f_2(x) = \sqrt{x}$$

auf dem Intervall $[0, 1]$ an. Plotten Sie die Fehler in doppellogarithmischer Skala. Die exakten Werte der zwei Integrale sind:

$$\int_0^1 f_1(x)\,dx = \frac{\arctan(\sqrt{5})}{\sqrt{5}}, \qquad \int_0^1 f_2(x)\,dx = \frac{2}{3}.$$

Welche Ordnungen beobachten Sie für die zwei Fehler? Plotten Sie auf dem Bild mit den Fehlern die Graphen der Polynome, die diesen Ordnungen entsprechen.

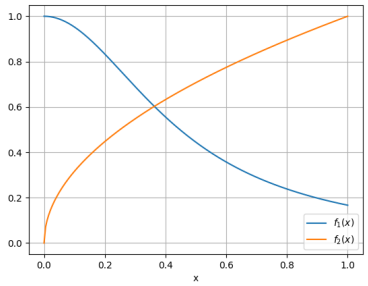


Abbildung 1 – Funktionen f_1 und f_2.

d) Begründen Sie auf Papier das beobachtete oder erwartete Verhalten der Fehler in den zwei Fällen.