PVK Probeprüfung FS 2017

Lucas Böttcher
Numerische Methoden
ETH Zürich

June 23, 2017

1. Radioaktiver Zerfall

Gegeben sind zwei radioaktive Substanzen, welche mit den Raten $\lambda_1 = 0.5$ und $\lambda_2 = 0.1$ zerfallen:

$$A \xrightarrow{\lambda_1} B \xrightarrow{\lambda_2} C.$$

Die Ratengleichungen für die Mengen Φ_A, Φ_B an A und B sind die Folgenden:

$$\begin{pmatrix} \dot{\Phi}_A(t) \\ \dot{\Phi}_B(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\lambda_1 \Phi_A(t) \\ \lambda_1 \Phi_A(t) - \lambda_2 \Phi_B(t) \end{pmatrix}. \tag{1}$$

(a) Löse das Ratengleichungssystem (1) mit der Variation der Konstanten. Die Anfangswerte seien $\Phi_A(0)$ und $\Phi_B(0)$.

(b) Implementiere eine Pythonfunktion $g(\mathbf{z})$, welche die rechte Seite von Gleichung (1) berechnet. Dabei bezeichnet $\mathbf{z}$ den Vektor der aktuellen Φ-Werte.

(c) Nutze die **ode45** Funktion, um die Ratengleichungen (1) für $t \in [0, 15]$, $\Phi_A(0) = 1$ und $\Phi_B(0) = 0.5$ zu lösen. Plotte die berechneten Lösungen.

(d) Nun berechnen wir die Lösungen numerisch mit der expliziten und impliziten Eulermethode sowie der impliziten Mittelpunktsregel. Die Funktionen geben den Zeitvektor **t** und die numerisch berechneten Funktionswerte **y** in einem Tupel (**t**, **y**) zurück. Die Funktionsargumente sind: die rechte Seite **g**, Anfangs- und Endzeiten **t0**, **tend**, der Anfangswert **y0** und die Anzahl der Intervalle **N**.

Name	Funktion
explizites Eulerverfahren	**expleuler(g,t0,tend,y0,N)**
implizites Eulerverfahren	**impleuler(g,t0,tend,y0,N)**
Mittelpunktsregel	**mittelpkt(g,t0,tend,y0,N)**

(e) Plotte die Lösungen für die verschiedenen numerischen Verfahren mit $t \in [0, 15]$, $N = 50$, $\Phi_A(0) = 1$ und $\Phi_B(0) = 0.5$ und vergleiche diese mit der **ode45** und der analytischen Lösung.

2. Approximation einer Ellipse

Gegeben seien $N = 6$ Punkte, die näherungsweise auf einer Ellipse liegen:

x_i	-0.1	6.7	6.7	-0.2	-7.3	-6.5
y_i	3.1	1.4	-1.0	-2.6	-1.1	1.3

Die Ellipsengleichung mit den Parametern a und b ist:

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1. \tag{2}$$

Als Abweichungsmass d_i der Punkte (x_i, y_i) von der Ellipsengleichung (2) nutzen wir die Abweichung des Wertes $\frac{x_i^2}{a^2} + \frac{y_i^2}{b^2}$ von 1.

Wir wollen die Parameter a und b finden, welche die Summe der quadratischen Abweichungen $\sum_i d_i^2$ minimiert.

(a) Gebe die Gleichung für die Abweichung d_i sowie die der Funktion $\mathbf{F}\colon \mathbb{R}^{n_1} \to \mathbb{R}^{n_2}$ für das nichtlineare Ausgleichsproblem an. Was sind die Werte von n_1 und n_2?

(b) Definiere das Funktional

$$\Phi(\mathbf{z}) := \frac{1}{2}\|\mathbf{F}(\mathbf{z})\|^2.$$

Berechne die Jacobimatrix $\mathbf{DF}$ von $\mathbf{F}$ sowie den Gradient und die Hessematrix von Φ.

(c) Implementiere ein Gauss-Newton Verfahren in Python, welches das Funktional Φ minimiert.

(d) Löse dasselbe Problem mit einem Newtonverfahren.

(e) Vergleiche die Konvergenz der Gauss-Newton und Newtonmethoden.

3. Monte Carlo Integration

Wir möchten die Rungefunktion

$$f(t) = \frac{1}{1 + 25t^2}, \ t \in [-1, 1], \tag{3}$$

mit einem Monte Carlo Verfahren integrieren.

(a) Gebe die analytische Lösung der Stammfunktion von Gleichung (3) an. Man kann die Integrationskonstante vernachlässigen.

(b) Implementiere eine Funktion **int_uniform(F, N, a, b)** in Python, welche das Integral **I** mit **N** zufälligen Stützstellen $t_i \sim U(a, b)$ approximiert und die Varianz **var** berechnet. Die Funktion soll das Tupel (**I**, **var**) zurückgeben.

(c) Approximiere das Integral für $N = 10^k,\ k = 2, \dots, 5$ und berechne jeweils den Fehler. Wie verhält sich die Varianz.

(d) Wir möchten die Varianz reduzieren und bemerken, dass die Rungefunktion ein ähnliches Verhalten zeigt wie eine Normalverteilung. Wir verwenden also ein *Importance Sampling* mit $x_i \sim g(x)$, wobei

$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right). \tag{4}$$

Bevor wir das Importance Sampling implementieren, wählen wir angemessene Parameter μ und σ. Die Rungefunktion ist symmetrisch um den Ursprung. Wir wählen also $\mu = 0$. Variiere nun σ und plotte verschiedene Normalverteilungen zusammen mit $f(t)$ und finde ein geeignetes σ für welches die Normalverteilung ähnlich aussieht wie $f(t)$.

(e) Implementiere eine Funktion **int_normal(F, N, a, b)**, welche das Integral mittels Importance Sampling an **N** zufälligen, normalverteilten Punkten approximiert. Verwende $\mu = 0$ und das σ aus Aufgabe **(d)**.

(f) Führe das Importance Sampling aus für $N = 10^k,\ k = 2, \dots, 5$ und berechne den Fehler von **I** sowie die Varianz der N Messwerte. Vergleiche die Varianzen von **int_uniform(F, N, a, b)** und **int_normal(F, N, a, b)**.

4. Runge Kutta

Das Butcher Tableau der *England Formel* ist gegeben durch:

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

.

(a) Implementiere ein Runge Kutta Verfahren mit dem Butcher Tableau der *England Formel*.

(b) Finde die Konvergenzordnung des Verfahrens empirisch durch die Anwendung der Methode auf die Differentialgleichung $\ddot{y}(t) + y(t) = 0$ für $t \in [0, 10]$.

(c) Verwende diese Methode, um die Differentialgleichung $\ddot{y}(t) + 10\dot{y}(t) + 10025y(t) - 10025 = 0$ mit $y(0) = 2,\ \dot{y}(0) = 95$ und $t \in [0, 1]$ mit 2^{12} Zeitschritten zu lösen. Stelle die

Lösung graphisch dar.

(d) Kann man mit dieser Methode in 5 Zeitschritten eine sinnvolle Annäherung der Lösung der letzten Gleichung zur Zeit $T = 1$ erhalten? Warum?

(e) Implementiere die Stabilitätsfunktion $S\colon \mathbb{C} \to \mathbb{C}$. Plotte diese Funktion und bestimme durch Ablesen aus diesem Bild eine maximale Zeitschrittweite h, die eine stabile Lösung für die letztgennante Differentialgleichung garantiert. Notieren Sie die Herleitung und den Wert.