Klausur „Computational Physics 1“ im WS 2006/2007

1 Gekoppelte Oszillatoren und Diffusionsgleichung 16

Gegeben ist eine lineare Kette von 3 gekoppelten harmonischen Oszillatoren. Diese wird durch drei äquivalente, mit Federn verbundene, gleiche Massen verkörpert. Auf jede der Massen wirkt zusätzlich eine zeitabhängige Kraft $F_1(t)$ bis $F_3(t)$.

a) Stellen Sie die Bewegungsgleichungen für alle 3 Massen auf. 2

b) Notieren Sie den ersten Integrationsschritt der numerischen Lösung dieses Anfangswertproblems in Matrixform bei Anwendung des Euler-Vorwärts-Verfahrens. 3

c) Wie ändert sich die Matrix wenn die drei Oszillatoren statt in einer Reihe als gleichseitiges Dreieck angeordnet sind. 2

d) Für die Lösung der Diffusionsgleichung $\frac{\partial f}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$, $f(x,t=0) = f_0(x)$ nach dem Finite-Differenzen-Schema kann eine ähnliche Matrix für einen Integrationsschritt aufgestellt werden. Wie lautet diese 2

e) Wie ändert sich die Matrix aus b) oder d) bei Anwendung des Rückwärts-Euler und des Crank-Nicholson-Verfahren. 2

f) Zeigen Sie die Instabilität des Vorwärt-Euler für die Lösung der Diffusionsgleichung nach d) mittels der Courant-Friedrichs-Levy-Bedingung. 2

g) Welche Fehlerursachen begrenzen die Genauigkeit der numerischen Lösung von Differentialgleichungen gegenüber einer exakten analytischen Lösung. Wie können die verschiedenen Fehler individuell und in ihrer Gesamtheit minimiert werden. Diskutieren Sie in diesem Zusammenhang auch kurz die Begriffe „Schrittweitensteuerung“ und „Steifigkeit“. 3

2 Diskrete Fouriertransformation 10

Für die Datenanalyse und Signalverarbeitung müssen zeitkontinuierliche Signale $f(t)$ häufig mittels der Fouriertransformation in den Frequenzraum überführt werden.

a) Geben Sie eine mögliche Definition der diskreten Fouriertransformation für die Überführung in den diskreten Frequenzraum $\tilde{f}(\omega_n)$ und eine zugehörige Vorschrift für die Rücktransformation in den Zeitraum $f(t_n)$ an. 2 2

b) Welchen Kriterien muss die Zeitdiskretisierung t_n genügen, damit durch die Diskretisierung des Zeitraumes keine Informationen der Originalfunktion $f(t)$ verloren gehen? 2

c) Als Beispiel sei konkret die folgende Funktion gegeben:

$$f(t) = \begin{cases} 1 & \forall(|t| \le a) \\ 0 & sonst \end{cases}.$$

Lässt sich das Kriterium aus b) auf diese Funktion anwenden? Berechnen Sie für Ihre Argumentation die Fouriertransformierte $\tilde{f}(\omega)$ dieser Funktion und skizzieren Sie $\tilde{f}(\omega)$. 3

d) Wegen einer begrenzten Abtastrate bei der Digitalisierung von Daten kann häufig das Kriterium aus b) für manche Signale $f(t)$ nicht erreicht werden. Was müssen Sie mit dem Signal $f(t)$ tun, um dennoch die Fehler durch die Zeit-Diskretisierung von den korrekt abgebildeten Frequenzen zu separieren. 2 1

e) Welche Eigenschaft der Funktion $f(t)$ wird implizit angenommen, wenn die Fouriertransformation über eine endliche Zeitreihe berechnet wird? Periodische RB 1 1

3 Matlab

Die Programmiersprache Matlab wird häufig für das wissenschaftliche Rechnen eingesetzt.

a) Beschreiben Sie zwei Möglichkeiten, in MatLab eine Schleife für die Mehrfache Ausführung eines Programmteiles zu programmieren. Erklären Sie die Unterschiede zwischen den verschiedenen Implementierungen. 2 2

b) Beschreiben Sie die Wirkungsweise des Doppelpunkt-Operators „:“ in MatLab. 2 2

c) Gegeben sei eine Matrix T=[1 2 3;1 2 3;1 2 3;1 2 3]. Was ist der Wert einer zweiten Variable N, wenn: 1): N = T(:); 2) N = T(2,3); 3) N = T(1,2:3); 4) N = T(:,2); 5) N = T(:,:). 4 4

4 Interpolation

Für die Interpolation von zeitdiskreten Datenwerten gibt es verschiedene Möglichkeiten.

a) Nennen und erklären Sie drei verschiedene Verfahren zur Interpolation von Messwerten. 3 3

b) Welches Verfahren ist besonders geeignet, wenn die der Datenreihe zugrundeliegende Funktion Polstellen aufweist.

5 Downhill-Simplex 5 5

Skizzieren Sie das Downhill-Simplex-Verfahren zur Suche von Minima mehrdimensionaler Funktionen entweder in Form eines Blockdiagramms oder als strukturierten Text.

6 Matlab Programmbeispiel 2 2

Notieren Sie möglichst exakten Matlab-Quellcode unter Verwendung der sin-Funktion, der den Wert von sin(*a*) für *a* von 0° bis 90° in Schritten von 10° berechnet und grafisch ausgibt.

7 Zahlenformate

Für einige Maschinen besteht ein Computer-Wort aus 36 Binärinformationen (Bits).

a) Geben Sie den Zahlenbereich von Integer-Werten an, der in einem solchen Wort gespeichert werden kann.

b) Entwerfen Sie eine Vorschrift zum Speichern von Gleitkommazahlen und geben Sie an, welcher Zahlenbereich dargestellt werden kann.

8 Lineare Gleichungssysteme

Gegeben ist ein System von drei Linearen Gleichungen mit

$$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}, \quad b=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}, \qquad Ax=b$$

a) Beschreiben Sie das Gauss-Jordan-Verfahren zur Lösung dieses Gleichungssystems. 3 2

b) Was ist Pivotisierung und welchen Nutzen hat sie? 1 1

b) Zeigen Sie, das die Lösung durch Verwendung der invertierten Matrix A^{-1}, mit $A^{-1}Ax=A^{-1}b;\ x=A^{-1}b$, identisch ist zur Lösung des Systems mittels der Gauss-Jordan-Eliminierung. 2 1

9 Randwertaufgaben und Anfangswertaufgaben

Sie wollen von einem vorgegebenen Standort auf der Straße einen kleinen Stein an das Fenster in der 2. Etage der gegenüberliegenden Hauswand werfen.

a) Stellen Sie die Gleichungen auf, die diese Randwertaufgabe definieren. 2 0

b) Beschreiben Sie eine Methode wie Sie diese Randwertaufgabe mittels eines vorhandenen Algorithmus für Anfangswertaufgaben lösen können. 2 1

10 Numerische Integration und Differentiation

Bei numerischen Verfahren in der Physik spielen Integrationsverfahren sowie Differentiationsverfahren eine wesentliche Rolle zur Beschreibung komplexer Systeme in Form von Differential- oder Integralgleichungen.

a) Beschreiben Sie das numerische Vorgehen, um die Ableitung und das Integral einer vorgegebenen Datenreihe zu realisieren. Führen Sie dabei den Übergang ausgehend von der Definition der Ableitung

$$\left.\frac{df(x)}{dx}\right|_{x=x_0}=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{y(x_0+\varepsilon)-y(x_0)}{(x_0+\varepsilon)-x_0}, \qquad 4\ 2$$

sowie dem Riemann Integral

$$\int_a^b f(x)dx=\lim_{\Delta x\to 0}\left(\sum_{m=1}^{N} f(\xi_m)\cdot\Delta x_m\right)$$

durch. Dabei ist ξ_m ein Wert im Intervall Δx_m und es gilt: $\Delta x_1=[a,a+\delta]$ und $\Delta x_m=[b-\delta,b]$.

b) Nennen, beschreiben und vergleichen Sie drei in der Vorlesung behandelte Verfahren zur numerischen Berechnung von Integralen. Gehen Sie dabei besonders auf die Genauigkeiten und Geschwindigkeiten der unterschiedlichen Verfahren ein. 3 2

Bitte auf der abgegebenen Klausur gut lesbar den Namen, das Geburtsdatum und die Matrikelnummer angeben!