Computational Physics 1
FSU Jena - WS 2007/2008
- Klausur -

Prof. Thomas Pertsch

Februar 28, 2008

Aufgabe 01 - Numerische Integrationsmethoden

Aus einem Experiment sei eine diskrete Zuordnung von Daten $[x_1, x_2, ..., x_N] \rightarrow [y_1, y_2, ..., y_N]$ gegeben.

a) Beschreiben Sie allgemein das Simpson-Integrationsverfahren sowie eine weitere Integrationsmethode Ihrer Wahl um das Integral

$$I = \int_a^b y(x)\ dx\ ,\ a = x_1, b = x_N$$

zu bestimmen.

b) Notieren Sie die Matlab-Syntax, welche bei einer Eingabe in die Matlab Kommandozeile das obige Integral mit Hilfe des Simpsonverfahrens löst.

c) Was ändert sich für den Fall, dass das Grundgebiet der x-Werte nicht mehr äquidistant diskretisiert ist für das Simpsonverfahren?

d) Was ist der Vorteil der Simpsonmethode bzgl. iterativer Verbesserung der Rechengenauigkeit? Ist dies in dem hier zu lösenden Problem anwendbar?

e) Gegeben seien folgende x Werte:

$$\left[\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}, \frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4}\right]$$

sowie die Abhängigkeit $y(x) = \sin(x)$. Integrieren Sie von Hand das Datenarray mit der Rechteckregel und mit der Trapezregel und erläutern Sie Ihre Schritte an einer Skizze.

Aufgabe 02 - Fourierfilterung

Stellen Sie sich vor, Sie haben experimentell ein Messsignal aufgezeichnet, welches stark verrauscht ist. Eine Möglichkeit zur Rauschminderung stellt die Fourierfilterung dar.

a) Erläutern Sie an einem eindimensionalen Beispiel, was man unter der Fourierfilterung versteht!

b) Angenommen Sie haben ein Datenarray der Länge N. Wie viele Frequenzen enthält das mittels FFT fouriertransformierte Signal? Geben Sie das Frequenzintervall explizit an!

c) Formulieren Sie was man unter einem Hoch - bzw. Tiefpassfilter versteht und erläutern Sie deren mögliche Implementierung.

d) Gegeben ist folgendes Stufensignal:

$$S(t) = \begin{cases} 1 & : |t| \leq \frac{a}{2} \\ 0 & : sonst \end{cases}$$

Die Fouriertransformierte dieses Signals ist die Sinc-Funktion, welche einen Definitionsbereich von $(-\infty, \infty)$ hat und somit kein bandbeschränktes Signal darstellt. Welche Probleme würden beim zeitdiskreten Samplen einem solchen Signals auftreten? Erläutern Sie eine Möglichkeit, dieses Signal trotzdem diskret zu samplen.

Aufgabe 03 - Lineare Gleichungssysteme

Viele physikalische Probleme lassen sich mathematisch auf die Lösung eines Systems gekoppelter linearer Gleichungen zurückführen.

a) Beschreiben Sie kurz das Verfahren der LU-Dekomposition (Faktorisierung) zur Lösung solcher Gleichungssysteme. Nennen Sie die Vor- und Nachteile, die sich in Abhängigkeit von der Aufgabenstellung durch diese Lösungsmethode ergeben können.

b) Berechnen Sie die inverse der Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2 & 3 & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}$$

mit Hilfe des Gauss-Jorden-Verfahrens.

c) Bedingt durch numerische Fehler ist die Lösung linearer Gleichungssysteme mittels direkter Verfahren nicht immer genau genug. In diesen Fällen kann die Lösung mit iterativen Verfahren verbessert werden. Beschreiben Sie ein iteratives Verfahren!

Aufgabe 04 - Matlab

a) Geben Sie an, wie Sie in Matlab mit Hilfe des Doppelpunkt-Operators Vektoren erzeugen können, die:

   i) alle Zahlen von 1 bis 100 enthalten

   ii) alle geraden Zahlen zwischen 1 und 21 enthalten

b) Gegeben Sei die Matlab Variable **A = [1 2 3; 4 5 6; 7 8 9]**. Geben Sie an, welchen Wert eine zweite Variable B hat, die erzeugt wird durch

   i) B = A(2,3)

   ii) B = A(:,1)

   iii) B = A(:)

c) Geben Sie an, welchen Wert die Variable A nach Ausführen des folgenden Programmcodes hat:

```
A = 0;
for counter = -4 : 3 : 33
 A = A + 1;
end;
```

Aufgabe 05 - Matlab Programmierung

Gegeben seien drei beliebige Matrizen gleicher Größe (z.B. 3 Sätze zweidimensionaler Messwerte X, Y, Z). Die nachstehende Matlab-Funktion zur Verarbeitung dieser Matrizen soll folgende Operationen durchführen:

- Berechnung der sinc-Funktion der Matrixelemente in X ($sinc(x) = \sin(x)/x$)
- Matrixprodukt der Datensätze X und Y
- Normierung der Werte in Z auf das Maximum der Werte in X

- Elementweise Quadrierung der Produkte aus den Datensätzen Y und Z

a) Finden Sie die Syntaxfehler in der Matlab-Funktion, so dass diese in Matlab ohne Fehlermeldung lauffähig ist.

b) Korrigieren Sie die inhaltlichen Fehler in der Matlab-Funktion, so dass oben beschriebene Operationen korrekt ausgeführt werden.

```
funktion (A,B,C,D) == matrix(X,Y,Z)

Eingabeparameter
% X,Y,Z : Eingabematrizen gleicher Dimension
% Ausgabe
% A : sinc-Funktion der Matrixelemente in X (sinc(x) = sin(x)/x)
% B : Matrixprodukt von X und Y
% C : Normierung der Werte in Z auf das Maximum der Werte in X
% D : Quadrieren der Produkte der Elemente von Y und Z

A = sin[X]/X;
B = X * Y;
C = Z/max(X);
D = Y.*Z^2;
```

Hinweis: Die Matlab-Funktion "max" gibt beim Aufruf mit einer Matrix einen Vektor zurück, der die Maxima aller Spalten enthält. Beim Aufruf mit einem Vektor als Eingabe wird das größte Element ausgegeben.

Aufgabe 06 - Zahlendarstellung

a) Ein Computer arbeite mit einer IEEE-konformen 64-bit (=DOUBLE) Fließkommadarstellung rationaler Zahlen. Gleichwertige Operationen werden von links nach rechts ausgewertet. Bestimmen Sie das Ergebnis folgender Operationen:

   i) 1,000 000 001 - 1,000 000 000
   ii) 1,000 000 000 000 000 001 - 1,000 000 000 000 000 000
   iii) $\underbrace{((((1+10^{-17})+\ldots)+10^{-17})}_{10000 \text{ Summanden}}$
   iv) $1 + 10000 * 10^{-17}$

   Wie viele Bits Speicherplatz werden benötigt, damit für die nachfolgenden Aufgaben alle möglichen Ergebnisse in (c) dargestellt werden können?

   i) Addition $c = a + b$ mit $a, b \in \{0, 1, 2, ..., 255\}$
   ii) Multiplikation $c = a \cdot b$ mit $a, b \in \{-128, -127, ..., 0, ..., 126, 127\}$

b) Herr G. spaziert täglich durch seinen Heimatort R., und entscheidet sich immer Mo-Fr 12.00 Uhr spontan zum Kauf eines Hamburgers, mit Pommes und Cola. Dazu hebt er täglich 10 \$ von seinem Konto ab. Sein Vermögen belaufe sich auf genau 100 Mrd. \$. Die Bank von Herrn G. benutzt ein Computersystem mit 32-bit Fließkommadarstellung. Nach einem Jahr ohne weitere Ausgaben und Einnahmen holt der Steuerberater von Herrn G. Kontoauszüge von der besagten Bank ab. Welchen Kontostand wird der Steuerberater zum Jahresende vorfinden?

Aufgabe 07 - Gewöhnliche Differentialgleichungen

Gegeben ist ein kleines Teilchen der Masse m, das an einer Feder mit der Federkonstante k angehängt ist. Ds Teilchen schwingt in einer Dimension, wobei die Rückstellkraft der Feder proportional zur Auslenkung sein soll. Außerdem wird es durch Reibung mit der Dämpfungskonstante α gedämpft.

a) Schreiben Sie die Differentialgleichung auf, die die Bewegung des Teilchens beschreibt.

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

c) Welche Fehlerursachen begrenzen die Genauigkeit der numerischen Lösung gegenüber einer exakten analytischen Lösung? Wie kann den Fehlern begegnet werden? Diskutieren Sie in diesem Zusammenhang auch kurz die Begriffe "Schrittweitensteuerung" und "Steifigkeit".

d) Geben Sie Stabilitätskriterien und Stabilitätsbereiche für das Problem an, wenn statt des Crank-Nicholson-Verfahrens das Rückwärts-Euler-Verfahren benutzt wird.

Aufgabe 08 - Minima von Funktionen mehrerer Veränderlicher

a) Zur Minimierung einer Funktion mehrerer Variablen existieren verschieden Algorithmen. Einige davon basieren auf der Suche des Minimums in konjugierten Richtungen. Erklären Sie den Begriff der "Konjugierten Richtungen".

b) Beschreiben Sie schrittweise Powell's Methode zur Minimumsuche einer Funktion $f(x),\ i = \{1, ..., n\}$. Schreiben Sie die Richtungsmatrix beim ersten Schritt der Minimierung der Funktion

$$f(x, y) = x^2 + 2 \cdot y^2$$

mit dem Startvektor

$$\vec{p} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

und dem Startpunkt

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

auf. Skizzieren Sie graphisch die folgenden Iterationsschritte bei der Suche nach dem Minimum der quadratischen Funktion

$$f(x, y) = x^2 + 2 \cdot y^2$$

mit der Powell's Methode.

c) Nennen Sie die Nachteile der Powell's Methode und Möglichkeiten, wie diese verbessert werden kann.