Umeå Universitet
Institutionen för Datavetenskap
Gunilla Wikström

Tentamen

i

Teknisk-Vetenskapliga Beräkningar

Tentamensdatum: 2004-06-03

Skrivtid: 9-15

Hjälpmedel: inga

Om problembeskrivningen i något fall är oklar, bestäm dig för en rimlig tolkning och anteckna den vid lösningen.

Börja varje uppgift på ett nytt blad. Skriv ditt namn och uppgiftens nummer uppe till höger på varje blad.

Uppgifterna är inte ordnade i svårighetsgrad.

Lycka Till!

Uppgift 1: (3+5 p)

a) Redogör noggrant för teoretisk och experimentell felkalkyl. Beskriv dessutom minst en central skillnad mellan dessa två olika typer av felkalkyl.

b) En $n \times n$-matris $\mathbf{A}$ har $\mathbf{LU}$-uppdelningen

$$\mathbf{LU} = \mathbf{PA}$$

där $\mathbf{L}$ har elementen

$$l_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0.5 & i = j+1 \\ 0.25 & i = j+2 \\ 0 & \text{annars} \end{cases} \quad \text{dvs} \quad L = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & & 0 \\ 0.5 & 1 & & & & & & \\ 0.25 & 0.5 & 1 & & & & & \\ & 0.25 & 0.5 & 1 & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & 0 & 0.25 & 0.5 & 1 & & \\ & & & & 0.25 & 0.5 & 1 \end{bmatrix}$$

medan $\mathbf{U}$ har elementen

$$u_{ij} = \begin{cases} 2 & i = j \\ 0.5 & i+1 = j \\ 0.5 & i+2 = j \\ 0 & \text{annars} \end{cases} \quad \text{dvs} \quad U = \begin{bmatrix} 2 & 0.5 & 0.5 & & & & & 0 \\ & 2 & 0.5 & 0.5 & & & & \\ & & 2 & 0.5 & 0.5 & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & 2 & 0.5 & 0.5 \\ & & 0 & & & 2 & 0.5 \\ & & & & & & 2 \end{bmatrix}$$

och $\mathbf{P} = \mathbf{I}$. Ange en algoritm för bestämning av $\mathbf{x}$ ur $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ baserad på den givna $\mathbf{LU}$-faktoriseringen (inga explicita sifferberäkningar nödvändiga). Redogör även för hur många flops (dvs flyttalsoperationer) som behövs genom att göra en komplexitetsanalys.

Tips: Algoritmen ska vara effektiv genom att ta hänsyn till glesheten i faktoriseringen. Antalet flops ska bero av n.

Uppgift 2: (2+6 p)

Denna översiktsuppgift behandlar lösning av icke-linjära ekvationer mha iterativa metoder och vilka faktorer som då kan vara av betydelse. Nedan finns algoritmen för en sådan typ av metod angiven:

1: Bestäm startvärde x_0. Initiera $maxiter, xtol, ftol$. Sätt $xerr = 1, ferr = 1$ och k=0.

2: **while** $xerr > xtol$ **and** $ferr > ftol$ **and** $k < maxiter$
Bestäm funktionsvärdet $f(x_k)$
Bestäm derivatan $f'(x_k)$
Lös $\Delta x_k = -f(x_k)/f'(x_k)$
$x_{k+1} = x_k + \Delta x_k$
$xerr = |\Delta x_k|; ferr = |f(x_k)|; k = k+1$

3: **end**

Med utgångspunkt från den givna algoritmen för lösning av icke-linjära ekvationer, dvs i fallet $f(x) = 0$ då $f : \mathbf{R}^1 \to \mathbf{R}^1$, nämn minst två svårigheter man generellt kan råka ut för vid användandet av denna metod.

b) Ekvation $f(x) = 0$ löses med fixpunktsiteration varvid följande successiva värden erhålls:

n	0	1	3	4	5	6	7	8
x_n	1.0000	2.1314	3.0365	3.7605	4.3398	4.8032	5.1739	5.4705

där x_0 är startvärdet för iterationen. Antag att iterationen konvergerar mot den sökta roten. Redogör noggrant för hur många ytterligare iterationer som då krävs för att få tre korrekta decimaler i svaret. Ni behöver inte göra några explicita beräkningar av matematiska uttryck (dvs själva beräkna siffervärden) utan det räcker med en detaljerad beskrivning i vilken det tydligt framgår hur man löser uppgiften i fråga.

Tips: För felet i skattningen x_{n+1}, dvs $x_{n+1} - a$, gäller enligt differentialkalkylens första medelvärdessats att

$$x_{n+1} - a = G(x_n) - G(a) = G'(\varepsilon) \cdot (x_n - a)$$

där a är den sökta roten och ε ligger mellan x_n och a. Denna relation anger hur mycket felet reduceras i en iteration. Dessutom gäller att $G'(\varepsilon) \approx (x_{n+1} - x_n)/(x_n - x_{n-1})$.

Uppgift 3: (3+6 p)

a) Interpolation innebär att modellen $g(t)$ anpassas till given diskret data med resultatet att modellen tex går genom de givna datapunkterna. I fallet att modellen är ett polynom brukar modellen betecknas $P(t)$ istället för $g(t)$. Beskriv, utgående från villkor på $P(t)$, Hermiteinterpolation samt interpolation med kubiska splines. Vilken är den mest centrala skillnaden mellan dessa två typer av interpolation?

b:) Enzymer är speciella proteiner som katalyserar kemiska reaktioner i levande organismer. Det ämne som reagerar i en enzymkatalyserad reaktion kallas substrat och under vissa förutsättningar kan halten av detta ämne $y(t)$ beskrivas med följande modell

$$y(t) = c_1 + c_2 t + c_3 t^2 + c_4 sin(kt) + c_5 cos(kt) + c_6 sin(2kt) + c_7 cos(2kt)$$

där $c_i, i = 1, \ldots, 7$ är obekanta modellparametrar som man önskar bestämma för att få en komplett modell. Vidare är värdet på k känt och lika med 0.3. Följande diskreta data för substrathalten är given:

t	0.0	3.5	7.25	11.5	20.0	32.75	43.0	53.5	64.0	75.0
y	0.1	3.2	7.5	9.3	11.8	15.0	21.5	28.0	31.3	37.6

Ställ upp det linjära ekvationssystem som ska lösas för att bestämma de okända modellparametrarna från de givna mätvärdena. Du ska alltså ange det $\mathbf{A}, \mathbf{x}$ och $\mathbf{b}$ du då får, och avgöra huruvida det i denna deluppgift är frågan om interpolation eller approximation. Motivera utförligt ditt val. Du ska inte explicit räkna ut vektorn $\mathbf{x}$ utan bara ange det aktuella ekvationssystemets koefficientmatris $\mathbf{A}$, lösningsvektorn $\mathbf{x}$ samt högerledsvektorn $\mathbf{b}$. Vidare förväntas ni inte explicit räkna ut komplicerade matematiska uttryck i matrisen $\mathbf{A}$, däremot ska dessa uttryck skrivas ut så att det tydligt framgår vilka $\mathbf{A}$'s element är.

I uppgiften ingår även att redogöra för hur matrisen $\mathbf{A}$'s struktur kan påverka lösningskvaliteten samt ange åtgärder för att i detta fall reducera dålig kondition.

Uppgift 4: (2+5 p)

a) Beskriv Trapetsmetoden för numerisk lösning av integraler samt redogör för hur adaptiva metoder i detta fall fungerar.

b) För en numerisk metod gäller

$$F_1(h) = F_1(0) + c_1 h^{p_1} + c_2 h^{p_2} + \dots$$

där $F_1(h)$ kan beräknas och $c_1, c_2, \dots$ är okända konstanter oberoende av h. Antag att vi beräknat $F_1(h)$ och $F_1(qh), q > 1$. Visa hur termen $c_1 h^{p_1}$ kan elimineras, dvs härled formeln för Richardsonextrapolation.

Uppgift 5: (3+5 p)

a) Utgå från

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)), \;\; y(t_0) = y_0 \\ \\ y_{i+1} = y_i + hf(t_i, y_i), \;\; t_{i+1} = t_i + h \end{cases}$$

för att på ett tydligt sätt beskriva vad som skiljer explicita och implicita ODE-metoder. Redogör även för sk adaptiva lösningsmetoder i samband med numerisk lösning av ODE (Ordinära Differential Ekvationer).

b) Givet är följande system av ODE

$$\ddot{x} = (3 - sin(t))\dot{x} + \frac{x}{1 + y^2}$$

$$\dot{y} = -cos(t)y - \frac{\dot{x}}{1 + t^2}$$

där x och y är kontinuerliga funktioner som beror av tiden t, dvs $x(t)$ och $y(t)$, samt att $\ddot{x} = \frac{d^2x}{dt^2}$ och $\dot{x} = \frac{dx}{dt}$. Vid starten gäller vidare följande:

$$\begin{cases} x(0) = 0 \\ \dot{x}(0) = -1 \\ y(0) = 4 \end{cases}$$

Du ska inte lösa differentialekvationssystemet utan bara ställa upp det på standardformen $\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{y}, t)$, $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$ där det klart och tydligt ska framgå vilka element vektorerna $\frac{d\mathbf{y}}{dt}, \mathbf{f}, \mathbf{y}$ och $\mathbf{y}_0$ har.