Umeå Universitet
Institutionen för Datavetenskap
Gunilla Wikström

OmTentamen

i

Teknisk-Vetenskapliga Beräkningar

Tentamenssdatum: 2004-08-26

Skrivtid: 9-15

Hjälpmedel: inga (föutom penna, sudd och linjal)

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

Skriv ditt namn, personnummer och uppgiftens nummer uppe till höger på varje blad.

Uppgifterna är inte ordnade i svårighetsgrad.

Lycka Till!

Uppgift 1: (3+6 p)

a) Denna översiktsuppgift innebär att du ska jämföra de linjära ekvationssystemen $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, A \in \mathbf{R}^{n\times n}$ och $\mathbf{Ax} \approx \mathbf{b}, \mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m\times n}$ $(m > n)$ med varandra samt redogöra för vissa centrala begrepp och egenskaper. Matriserna $\mathbf{A}$ antas ha full kolumnrang.
Beskriv i ord och bild skillnaden mellan de två typerna av ekvationssystem i fallet $n = 2$ och $m = 3$. Figuren ska tydligt visa hur $\mathbf{A}$'s värderum, residualen samt vektorn $\mathbf{b}$ förhåller sig till varandra.

b) Denna uppgift behandlar teoretisk kvalitativ felanalys baserad på kondition för ett specifikt problem. Problemet som ska analyseras är bestämning av skärningspunkten för linjerna

$$\begin{cases} y(x) = 1 - x \\ y(x) = \frac{1-x}{1+a} \end{cases}$$

där $a \in \mathbf{R}^{1\times 1}$.

Börja med att beteckna den sökta skärningspunkten med (x_s, y_s). Formulera sedan problemet med att hitta skärningspunkten som ett linjärt ekvationssystem enligt

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \;\; \mathbf{A} \in \mathbf{R}^{2\times 2}, \mathbf{b} \in \mathbf{R}^{2\times 1}, \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

där nu $x_1 = x_s$ och $x_2 = y_s$. Bestäm därefter den exakta lösningen som $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$.
Tips: $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{I}_2$.

I praktiken fås inte den exakta lösningen $\mathbf{x}$ utan, pga indatafel, en approximation $\tilde{\mathbf{x}}$. Antag att man har felet ε i indata enligt

$$\tilde{\mathbf{b}} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1+\varepsilon \end{bmatrix}$$

och att detta ger som resultat den approximativa lösningen $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^{-1}\tilde{\mathbf{b}}$.

Bestäm relativa felen för utdata och indata. Relatera detta sedan till problemets kondition enligt

$$\frac{\|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{x}\|_2} \leq \kappa \, \frac{\|\tilde{\mathbf{b}} - \mathbf{b}\|_2}{\|\mathbf{b}\|_2}$$

Tips: κ är beteckningen för konditionstal.
$\|c\mathbf{v}\|_2 = |c|\|\mathbf{v}\|_2$ där $c \in \mathbf{R}^{1\times 1}$ samt $\|\mathbf{v}\|_2 = \sqrt{v_1^2 + \ldots + v_N^2}$ då $\mathbf{v} \in \mathbf{R}^{N\times 1}$.

Vilka kvalitativa slutsatser drar du utifrån resultatet av din teoretiska konditionsanalys?

Uppgift 2: (4+4 p)

a) Denna uppgift behandlar lösning av icke-linjära ekvationer mha iterativa metoder. Nedan finns algoritmen för en sådan 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 $f : \mathbf{R}^1 \rightarrow \mathbf{R}^1$, nämn minst två svårigheter man generellt kan råka ut för vid användandet av denna metod samt lämpliga åtgärder för att undvika/minska effekten av dessa svårgheter.

b) Du står inför problemet att lösa $f(x) = 0, f : \mathbf{R}^1 \rightarrow \mathbf{R}^1$ då $f(x) = x - tan(x)$. Två fixpunktsiterationsalgoritmer är föreslagna enligt

Algoritm 1:

$x_{k+1} = tan(x_k)$

Algoritm 2:

$x_{k+1} = arctan(x_k) + \pi$

Vilken algoritm väljer du för att lösa problemet? Basera ditt val på teoretiska konvergensvillkor och motivera noggrant ditt val.

Tips: $\frac{d}{dx}tan(x) = 1 + tan(x)^2$, $\frac{d}{dx}(arctan(x) + \pi) = \frac{1}{1+x^2}$

Uppgift 3: (3+5 p)

a) Jämför de två interpolationsmodellerna

$$\begin{cases} \text{Vandermonde:} & P_V(t) = c_1 + c_2 t + c_3 t^2 + \dots \\ \text{Newton:} & P_N(t) = c_1 + c_2(t - t_1) + c_3(t - t_1)(t - t_2) + \dots \end{cases}$$

där $t_i, i = 1, 2, \dots$ är givna. Redogör utförligt för skillnaderna vad avseer kondition och effektivitet. Redogör även hur du gör för att inkludera ytterligare datapunkter, dvs antag att P_V och P_N beräknas för N datapunkter men att dessa interpolationsmodeller sedan ska uppdateras för ytterligare en datapunkt.

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

$$y(t) = c_1 + c_2 t + c_3 t^2 + c_4 sin^3(kt^2) + c_5 cos^3(kt^2)$$

där $c_i, i = 1, \dots, 7$ 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 samt 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 huruvida det är frågan om interpolation eller approximation samt 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

$$F_1(h) = F_1(0) + c_1 h^{p_1} + c_2 h^{p_2} + c_3 h^{p_3} + \dots$$

där $F_1(h)$ kan beräknas, $p_1 < p_2 < \dots$ samt $c_1, c_2, \dots$ är okända konstanter oberoende av h. Formeln för Richardsonextrapolation kan utifrån detta härledas till

$$F_2(h) = F_1(h) + \frac{F_1(h) - F_1(qh)}{q^{p_1} - 1} = F_1(0) + d_2 h^{p_2} + d_3 h^{p_3} + \dots (1)$$

där $d_2, d_3, \dots$ är okända konstanter oberoende av h.

Varför är $F_2(h)$ en bättre skattning än $F_1(h)$? Beskriv även detaljerat hur användningen av (1) kan systematiseras i ett sk Richardssonschema.

Uppgift 5: (3+5 p)

a) a) Utgå från

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

för att på ett tydligt sätt beskriva vad som skiljer explicita och implicita ODE-metoder (Ordinära Differential Ekvationer). Redogör även för vilken typ av metod som är att föredra för sk styva ODE:er och varför.

b) Givet är följande system av ODE

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

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

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:

$$\begin{cases} x(0) = 0 \\ \dot{x}(0) = -1 \\ y(0) = 4 \\ \dot{y}(0) = -3 \end{cases}$$

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.