Uppsala universitet
Institutionen för informationsteknologi
Beräkningsvetenskap

Tentamen i Numeriska metoder och simulering, 5.0 hp, 2022-10-24

Skrivtid: $8^{00} - 13^{00}$
Hjälpmedel: Bifogat formelblad och miniräknare.

För fullt uppfyllda mål och kriterier på uppgifterna krävs fullständiga räkningar och utförliga resonemang samt motivering till alla svar.

För betyg 3 krävs: att man klarar varje delmål för betyg 3 i del A. För att visa att du har nått delmålet behöver du klara minst en av de två uppgifterna för respektive delmål. Du kan också komplettera ett missat delmål genom att klara motsvarande mål på del B.
För betyg 4 krävs: att man klarar kraven för betyg 3 och uppgiften för betyg 4 eller del av uppgiften för betyg 5.
För betyg 5 krävs: att man klarar kraven för betyg 3, uppgiften för betyg 4 och uppgiften för betyg 5.

Del A (betyg 3)

Delmål 1: *kunna skriva ett (Matlab eller Python) program som gör en numerisk simulering av något fenomen, givet en matematisk modell av fenomenet.*

1. Skriv ett program som med hjälp av en lämplig inbyggd funktion (SciPy eller Matlab) löser differentialekvationerna

$$x'' = -k\frac{x}{(\sqrt{x^2+y^2+z^2})^3}$$
$$y'' = -k\frac{y}{(\sqrt{x^2+y^2+z^2})^3}$$
$$z'' = -k\frac{z}{(\sqrt{x^2+y^2+z^2})^3}$$

   med begynnelsedata $x(0) = 4$, $x'(0) = 0$, $y(0) = 0$, $y'(0) = 0.5$, $z(0) = 0$ och $z'(0) = -1.0$ för tidsintervallet från T=0 till T=100. Använd $k = 1$. Rena syntaxfel eller parameterfel påverkar inte bedömningen men du bör ha en klar uppfattning om vilka parametrar som behövs och på vilken form dessa ska ges.

2. Antag att vi vill beräkna integralen

$$\int_{-2}^{2}\int_{-2}^{2}\int_{-2}^{2} \sin(x \cdot y \cdot z) \cdot e^{-(x^2+y^2+z^3)}\, dx\, dy\, dz$$

   med Monte Carlo-metoden. Skriv ett program som utför beräkningen.

Delmål 2: *känna till viktiga begrepp i anslutning till numerisk simulering*

3. Olika numeriska metoder för lösning av ODEr har olika *stabilitetsområden.* Förklara vad det är och hur det definieras. Ge exempel och rita upp stabilitetsområdet för någon känd metod.

4. Förklara vad som menas med att en ekvation är *styv*, vad som kännetecknar en styv ODE och hur det påverkar valet av numerisk metod.

Delmål 3: *kunna formulera och använda de olika algoritmer och numeriska metoder som ingår i kursen*

5. Antag att vi har en sannolikhetsfördelning med följande täthetsfunktion $f(t) = \frac{\cos(t)}{2}$ i intervallet $t \in [-\pi/2, \pi/2]$ och 0 för övrigt. Nu vill vi generera slumptal ur denna fördelning givet ett ett slumptal ur en likformig fördelning på $[0, 1]$. Tag fram en matematisk formel för att generera ett slumptal ur fördelningen $f(t)$ givet ett slumptal $y \in [0, 1]$.

6. Antag att vi vill lösa följande problem:

$$y' + \frac{x}{(x+1)^2} y = \sin(x^2), \qquad x \geq 0, \quad y(0) = 1$$

   Ställ upp Trapetsmetoden för problemet och utför två steg med steglängden h=0.1.

Delmål 4: *känna till egenskaper hos numeriska metoder och matematiska modeller samt kunna genomföra analys för att undersöka dessa egenskaper*

7. Antag att vi istället för Trapetsmetoden vill använda Euler framåt (explicita Euler) för att lösa ODEn i uppgift 6 ovan. Hur ska vi välja steglängden för att Euler framåt ska vara stabil, dvs härled stabilitetsvillkoret för Euler framåt tillämpad på problemet i uppgift 6.

8. Vi antar att du har beräknat integralen i uppgift 2 ovan med Monte Carlo-metoden ett upprepat antal gånger med N=10 000 slumptal. Du får en spridning av resultaten med ett 95% konfidensintervall som är 0.01 brett. Vi kan anta att det korrekta värdet på integralen bör ligga inom detta intervall. Du tycker att osäkerheten är för stor och vill göra om beräkningarna med ett större N. Målet är att få ner spridningen till ett konfidensintervall med bredden 10^{-6}, hur stort ska du välja N?

Delmål 5: *kunna använda kunskap om egenskaper för att värdera och argumentera för olika metoders och modellers lämplighet i anslutning till en given problemställning*

9. Resonera kring när det är lämpligt att använda en *explicit metod* respektive en *implicit metod* för att lösa ODE'r numeriskt. Du ska alltså inte bara säga när det är lämpligt utan förklara varför den ena metoden är bättre än den andra metoden i respektive fall.

10. Du har fått till uppgift att simulera ett fysikaliskt fenom och du väljer då mellan att göra det med en deterministisk ODE-lösare eller stokastiskt med Gillespies algoritm. Argumentera för när respektive metod ska väljas, ange minst två olika argument för ditt val.

Del B

11. **(Betyg 4)**
    Antag att vi vill lösa differentialekvationen

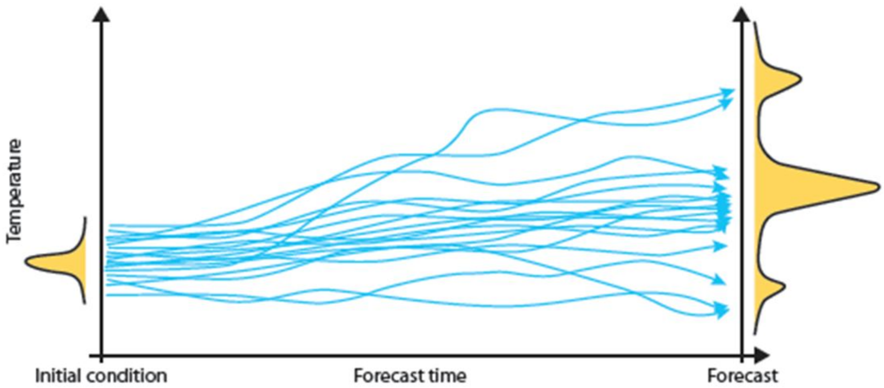
    $$y' = e^{t \cdot \sin(y)}, \quad y(0) = 0, \quad t \geq 0$$

    (a) Vilken typ av ODE-lösare ska vi välja och varför?

    (b) Konstruera ett program (Matlab eller Python) som löser ODEn med Trapetsmetoden. För ekvationslösning kan du använda en inbyggd funktion (SciPy's `fsolve` eller Matlabs `fzero`). Rena syntaxfel eller parameterfel påverkar inte bedömningen men du bör ha en klar uppfattning om vilka parametrar som behövs och på vilken form dessa ska ges.

12. **(Betyg 5)**
    Inom t ex meteorologi används något som kallas för ensemble-metoder. Ide'n är att man beräknar många väderleksprognoser och stör begynnelsevärden slumpmässigt, där störningen hämtas ur en normalfördelning. Själva prognosen beräknas genom att man löser ett system av differentialekvationer. Eftersom begynnelsevärdena är uppmätta data (lufttryck, temperatur, densitet, etc) och innehåller fel, kan man genom dessa störningar få en uppfattning hur säker prognosen är; om lösningarna hamnar väl samlat är den säker, medan den är osäker om lösningarna blir väldigt spridda. Man kan alltså här se differentialekvationen som en stokastisk process. Figuren nedan visar principen.

    Differentialekvationerna vid väderleksprognoser innehåller kraftigt varierande skalor, och är därför kraftigt styva. Det handlar egentligen om partiella differentialekvationer eftersom de beräknas i tre rumsdimensioner, men genom att anta att vinden är känd



Figur 1: Ide'n bakom ensemblemetoder

kan vi reducera ekvationerna till ett system av ODE'r. Kvar blir termodynamikens 2:a huvudsats

$$\frac{c_p}{T}\frac{dT}{dt} - \frac{R}{p}\frac{dp}{dt} = Q$$

allmänna gaslagen

$$p = \rho RT$$

och kontinuitetsekvationen

$$\frac{1}{\rho}\frac{d\rho}{dt} + f_{vind}(t) = 0.$$

Här har vi antagit att vinden är en känd funktion. I ekvationerna är T luftens temperatur, p luftens tryck och ρ luftens densitet, övriga parametrar kan betraktas som konstanter. En omskrivning av ekvationerna ger följande system av ODEr':

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \cdot f_{vind}(t)$$
$$\frac{dT}{dt} = T \cdot (Q - R \cdot f_{vind}(t))/(c_p - R)$$

(a) Skriv en algoritm i Matlabkod som utför ensemblemetoden med lösning av de givna differentialekvationerna enligt beskrivningen ovan, och som dessutom hittar "medelprognosen", dvs medelvärdet av alla prognoser. Du kan förutsätta att du har samma typ av funktioner tillgängliga som finns inbyggt i Matlab/Python, dvs olika typer av ODE-lösare och slumptalsgeneratorer, och som du alltså kan använda. I initialdata behöver du bara göra störningar av temperaturen.

(b) Antag att vi väljer att använda klassiska 4:e ordningens Runge-Kutta för att lösa systemet av ODEr ovan, redgör i detalj hur vi kan få fram stabilitetsvillkoret för problemet. Notera, du behöver inte härleda stabilitetsvillkoret för Runge-Kutta tillämpad på testekvationen utan kan se det som känd fakta och skissa upp stabilitetsområdet på fri hand.