Uppsala universitet
Institutionen för informationsteknologi
Teknisk databehandling

Tentamen i Beräkningsvetenskap II, 5.0 hp, 2011-03-15

Skrivtid: $14^{00} - 17^{00}$ (OBS! *Tre* timmars skrivtid!)
Hjälpmedel: Bifogat formelblad, miniräknare. Det är också tillåtet att använda Mathematics Handbook eller Physics Handbook, men uppgifterna är konstruerade så att de inte förutsätter tillgång till handbok.

En komplett lösning ska innehålla fullständiga räkningar och utförliga resonemang samt motivering till alla svar.

Del A

1. För att visa att du kan använda Heuns metod ska du tillämpa den på differentialekvationen

$$y'(t) - (y(t) + 1)\cos y(t) = 0, \quad y(0) = 0.$$

   Genomför ett steg med steglängd 0.1.

2. Genomför stabilitetsanalys för att visa att implicita Eulers metod för numerisk lösning av ODE är ovillkorligt stabil.

3. (a) Medeltemperaturen (celsiusgrader) i Uppsala för perioden 1885–1970 framgår av nedanstående tabell, där dock värdena för maj och september saknas:

Månad nr	1	2	3	4	6	7	8	10	11	12
Temperatur	-4.3	-4.5	-1.9	3.4	14.2	16.7	15.1	5.5	0.6	-2.7

   Beräkna ett närmevärde till medeltemperaturen i maj genom att interpolera med ett förstagradspolynom genom de två närmast kringliggande mätpunkterna. För att du ska ha anses löst uppgiften korrekt måste du använda Newtons interpolationsansats.

   (b) Förklara varför det i allmänhet är olämpligt att interpolera genom samtliga givna punkter när man har mer än ett fåtal mätpunkter.

4. (a) Vad kännetecknar en Monte Carlo-metod jämfört med stokastiska metoder i allmänhet?

(b) Ett av användningsområdena för Monte Carlo-metoder är numerisk integrering. I Beräkningsvetenskap I lärde du dig några deterministiska metoder för numerisk integrering. Ge minst ett skäl för varför Monte Carlo-metoder ibland kan vara att föredra framför de deterministiska metoderna.

5. (a) Förklara innebörden i begreppet *konsistens* hos en numerisk metod för lösning av ODE.

   (b) Genomför en analys för att undersöka om differensmetoden $y_{k+1} = y_k + h * (y_k + 1) \cos y_k$ är konsistent med differentialekvationen i uppgift 1 ovan. OBS! Även om du råkar känna igen denna differensmetod, så får du inte bara hänvisa till kända fakta om den, utan du måste visa hur analysen av metoden går till.

Del B

6. I ett experiment studeras förloppet i en kemisk process, där kväve bildas. Under experimentets gång mäts koncentrationen c av kväve vid olika tidpunkter t. I tabellen nedan visas några mätvärden (i lämpliga enheter, som vi här bortser ifrån):

t	0	0.5	1.0	1.5	2.0
c	0	0.19	0.26	0.29	0.31

   På teoretiska grunder antar man att c kan uttryckas som ett andragradspolynom i t. Gör en experimentell bestämning av detta polynom genom anpassning till ovan givna mätdata. Det resulterande polynomet ska uppfylla bivillkoret att dess värde för $t = 0$ måste vara 0 (eftersom vi vet att koncentrationen var 0 när experimentet inleddes). Du ska ge argument för att det angreppssätt du använder för att lösa uppgiften är det lämpligaste bland de alternativ som ingått i kursen.

7. I en utredning om sjön Tämnaren i nordvästra Uppland behöver du göra en beräkning av sjöns ytstorlek, som vi betecknar med s. För att åstadkomma detta inför vi ett koordinatsystem med x- och y-axel, där $x = 0$ motsvarar sjöns västra ändpunkt, $x = a$ dess östra ändpunkt, $y = 0$ dess södra ändpunkt och $y = b$ sjöns norra ändpunkt. (Vi går inte in på vilken längdenhet som är lämplig för dessa koordinater.) Rektangeln R, som består av alla punkter (x, y) så att $0 \leq x \leq a$ och $0 \leq y \leq b$, kommer då att innesluta sjön. Rektanglens area är produkten av a och b. Låt c beteckna förhållandet mellan sjöns ytstorlek s och arean av R, det vill säga att $s/(ab) = c$. Värdena a och b är kända (vi kan läsa av dem från en karta i lämplig skala). Om värdet på c vore känt, så skulle vi alltså kunna beräkna s som $s = abc$.

   Vår beräkning av s kommer att bygga på att vi använder en Monte Carlo-metod för att beräkna ett närmevärde $\tilde{c}$ till c. Som värde på s använder vi sedan $s \approx ab\tilde{c}$. Monte Carlo-metoden ifråga bygger på idén att vi på lämpligt sätt slumpar ut punkter i rektangeln R. Vi beräknar sedan hur stor andel av dessa punkter som hamnade inom det område som täcks av sjön. Denna andel blir vårt värde på $\tilde{c}$.

   Din uppgift är att utveckla ovanstående idé till en algoritm för beräkning av sjöns ytstorlek. Du ska ge argument för de val du gör när du utformar algoritmen. Dessa argument ska ge skäl för att din lösning verkligen kommer att ge ett närmevärde till s. Algoritmen ska beskrivas i Matlab. (Vi har överseende med rena syntaxfel i Matlab om det framgår att algoritmen är korrekt i princip.) Du får anta att du har tillgång till en färdig matlabfunktion `sjopunkt(x,y)`, som returnerar värdet 'sant' om punkten (x, y) ligger inom sjöns område, annars värdet 'falskt'.

8. Tidsförloppet hos en lineär kemisk process som inbegriper m stycken ämnen kan beskrivas med ODE-systemet $U'(t) = AU(t)$, där $U(t)$ är en vektor med m stycken komponenter och A är en konstant $m \times m$-matris. Komponent nummer k i $U(t)$ är koncentrationen av ämne nummer k vid tidpunkten t. Vid begynnelsetiden $t = 0$ är koncentrationerna $U(0)$ kända.

   Följande formel beskriver en hel familj av numeriska metoder för att simulera den kemiska processen utgående från den beskrivning som ODE-systemet ger:

   $$\left(U_{i+1} - U_i\right)/h = (1 - \theta)AU_i + \theta AU_{i+1},$$

   där θ är ett reellt tal mellan 0 och 1. För varje fixt värde på θ ger formeln ovan en specifik algoritm för att genomföra simuleringen.

   Din uppgift är att diskutera vilka konsekvenser valet av θ får för metodens egenskaper (såväl matematiska som datorrelaterade egenskaper). Diskussionen ska vara konkret och reda ut vilka val som är "bäst" ur olika synvinklar. Genomför så långt möjligt analys för att visa hur värdet på θ påverkar egenskaperna. Du får för enkelhets skull begränsa analysen till det skalära fallet, alltså att A inte är en matris, utan en skalär konstant. Din diskussion ska även beakta hur de olika egenskaperna samverkar och vad som därför skulle vara det bästa valet av θ under olika förutsättningar.