DN/2D1212 Numeriska Metoder och Grundläggande Programmering
DN/2D1214 Numeriska Metoder för S
2D1210 Numeriska Metoder grundkurs I
Lördag 2008-01-19, kl 10-13

Skrivtid 3 tim. **Maximal poäng** 35 + bonuspoäng från årets laborationer (max 4p).

Betygsgänser: för betyg **D**: minst 20 poäng, för betyg **C**: över 26 poäng och för betyg **B**: över 29 poäng. Endast DN1214: för betyg **A**: över 32 poäng. Alla poäng är inklusive bonuspoäng.

Maxpoäng för uppgifterna anges inom parentes bredvid uppgiftsnumret

Tillåtna hjälpmedel: Nadas användarhandledning för MATLAB.
För icke-svenskspråkiga tillåts också lexikon.

Var god notera att miniräknare **ej** är tillåten på denna tentamen.

Svar skall motiveras och uträkningar redovisas. Korrekt svar utan motivering eller med felaktig motivering medför poängavdrag.

Då algoritmbeskrivning begärs, avses normalt beskrivning i MATLAB.

Eftersom miniräknare ej är tillåten är det tillåtet att lämna enkla beräkningsuttryck oförenklade, tex $c = 0.5 \cdot 0.2^3 \cdot \cos(\pi/3)$ i stället för det uträknade $c = 0.002$

( ) **P0.** Ange dina bonuspoäng och den kursomgång (linje och termin) där poängen erhållits. Endast poäng från 2007 är giltiga.

P1. Ekvationen nedan har en rot nära $x = 1$.

$$x^3 - x = \mathrm{e}^{(1-x)}$$

(3) **a)** Genomför en iteration med Newton-Raphsons metod för denna rot. (Handräkning)

(2) **b)** Har ekvationen fler rötter?

P2. Givet tabellen

x	21	24	25	27
y	1	3	8	12

(1) **a)** Skatta $y(26)$ med linjär interpolation.

(1) **b)** Skatta $y(26)$ med kvadratisk interpolation.

(1) **c)** Skatta trunkeringsfelet i värdet i deluppgift **b** ovan, dvs $y(26)$ erhållet med kvadratisk interpolation.

Tentamen fortsätter på nästa sida. Var god vänd!

P3.

(3) **a)** Bestäm parametrarna α, β då kurvan $y = \alpha + \beta(x - \gamma)^2$ anpassas till tabellen nedan med minstakvadratmetoden. Du får här anta att $\gamma = 1$.

x	0	1	2	3
y	1	2	3	5

(4) **b)** Skriv ett Matlab-program som beräknar samtliga parametrar α, β och γ då dessa anpassas till tabellen med minstakvadratmetoden.

P4. Integralen nedan skall skattas med trapetsregeln:

$$\int_{-1}^{1} \exp(x^2)\, dx$$

(3) **a)** Beräkna de två värden på integralen man får med trapetsregeln och steglängderna 2 respektive 1.

(1) **b)** Är trapetsregelvärdena en över- eller underskattning av det sanna integralvärdet?

(1) **c)** Använd de två integralvärden du fått i deluppgift **a** ovan för att skatta vad trapetsregelvärdet för steglängden 0.5 ungefär bör bli.

Tips: Som bekant är $e^1 \approx 2.72$ och du behöver ej ta med mer än 2 decimaler i räkningarna.

P5. Givet nedan är tre formler som är tänkta att numeriskt approximera förstaderivatan av $y(x)$. Härled formlernas respektive noggrannhetsordning.

(1) **a)** $y'(x) = \frac{y(x+h)-y(x-h)}{2h}$

(1) **b)** $y'(x) = \frac{y(x+h)-y(x-h)}{3h}$

(1) **c)** $y'(x) = \frac{y(x+2h)-y(x-h)}{3h}$

P6. Schrödingers vågekvation i en dimension ser ut

$$y'' + V(x)\, y(x) = E\, y(x)$$

För väteatomen ser potentialen ut som $V(x) = \frac{2Z}{x}$, där konstanten Z är kärnans laddning och konstanten E är bindningsenergin.

NB: Deluppgift **b**, **c** och **d** kan lösas även om inte deluppgift **a** lösts.

(4) **a)** De sanna randvärdena till problemet är $y(0) = 0$ och $\lim_{x\to\infty} y(x) = 0$, men det blir svårt numeriskt. Man approximerar då lösningen enbart på intervallet $0.1 \le x \le 20.1$ med randvillkoren $y(0.1) = 1$ och $y(20.1) = 0$. Härled formlerna för finita differensmetoden (bandmatrismetoden) som man får om man delar in intervallet i 5 delar.

(2) **b)** Antag att man i stället fått begynnelsevillkoren $y(0.1) = 1$ och $y'(0.1) = 0.5$ (och alltså inget villkor i $x = 20.1$). Skriv om Schrödinger-ekvationen till ett första ordningens system av differentialekvationer. Glöm inte ta med begynnelsevillkoren.

(3) **c)** Skatta med Eulers metod och steglängden 0.1 värdet av $y(0.3)$. (Handräkning). Använd kärnladdningen $Z = 1$ och bindningsnergin $E = 1$ och begynnelsevillkoren enligt deluppgift **b**.

(3) **d)** Skriv ett Matlab-program som plottar lösningen $y(x)$ (och inget annat) på intervallet $0.1 \le x \le 20.1$ om man använder begynnelsevillkoren enligt deluppgift **b**.

Lycka till och gott fortsatt "nummande" önskar Ninni!

Kort förslag till lösning

P1a Newton-Raphson: $x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n)$. Här är $x_0 = 1$ och
$f(x) = x^3 - x - \mathrm{e}^{(1-x)} \Rightarrow f(1) = 1^3 - 1 - \mathrm{e}^0 = -1$ och
$f'(x) = 3x^2 - 1 + \mathrm{e}^{(1-x)} \Rightarrow f'(1) = 3 - 1 + \mathrm{e}^0 = 3$ och därmed $x_1 = 1 - (-1)/3 = 4/3$

P1b Skriv ekvationen som $x^3 - x = \mathrm{e}^{(1-x)}$. Kalla $f(x) = x^3 - x$ och $g(x) = \mathrm{e}^{(1-x)}$.

- Alt 1: (mha matematik)
$g(x) > 0$ för alla x (och avtagande).
För $x < -1$ är $f(x) < 0$, alltså inga rötter för $x < -1$.
För $0 < x < 1$ är $f(x) < 0$ likaså, alltså inga rötter för $0 < x < 1$ heller.
För $x > 1$ är $f'(x) > 0$ och $g'(x) < 0$, alltså korsar kurvorna max en gång. Eftersom $f(1) = 0 < g(1) = 1$ så korsar dom varandra. En rot för $x > 1$.
Återstår intervallet $-1 < x < 0$: men där finns inga rötter heller ty $|f(x)| = |x^3 - x| \le |x^3| + |x| \le 2$ och $g(x) \ge \mathrm{e}^1 > 2.7$ dvs $f(x)$ och $g(x)$ skär inte varandra på intervallet $-1 < x < 0$.
Det finns bara en rot (den strax ovanför $x = 1$).

- Alt 2: (mha grafik (och lite matematik)) Plotta (dvs skissa för hand) kurvorna $y = f(x)$ och $y = g(x)$. Ur figuren inses raskt att det bara finns en rot för $x > 0$ och ingen för $x < -1$. Återstår intervallet $-1 < x < 0$; resonera som i alternativ 1: inga rötter. Alltså finns bara en rot, strax ovanför $x = 1$.

P2a Vi skall byta gradtal mellen upppgifterna - använd Newtons ansats. Grad1: $p(x) = c_1 + c_2(x - x_1)$. $p(x_1) = y_1$ och $p(x_2) = y_2$ med $x_1 = 25$ och $x_2 = 27$ ger $c_1 = 8$ och $c_2 = 2$ vilket ger $p(26) = 10$.

(Alternativ lösning: 26 är mittimellan 25 och 27, med linjär IP, dvs rätlinje blir p(26)=(y(25)+y(27))/2=10).

P2b Fortsätt med Newtons ansats; $p(x) = c_1 + c_2(x - x_1) + c_3(x - x_1)(x - x_2)$. Lägg till nya punkten $x_3 = 24$ och $y_3 = 3$ samt ekvationen $p(x_3) = y_3$ vilket ger $c_3 = -1$ vilket ger $p(26) = 11$.

P2c Trunkeringsfelet kan med Newtons ansats skattas med första försummade termen, dvs $E_{trunk-p2} = |p_2(26) - p_3(26)|$. Beräkna 3e-gradspolynomet:
$p_3(x) = c_1 + c_2(x - x_1) + c_3(x - x_1)(x - x_2) + c_4(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)$.
Lägg till nya punkten $x_4 = 21$ och $y_4 = 1$ samt ekvationen $p(x_4) = y_4$ vilket ger $c_4 = -25/72$ vilkget ger $p(26) = 11 - 50/72$. Trunkeringsfelet blir då $E = |11 - (11 - 50/72)| = 50/72 \approx 5/7 \approx 0.7$.

P3a Då $\gamma = 1$ är problemet ett linjärt MKV-problem i $\alpha = c_1$ och $\beta = c_2 . y = c_1 + c_2(x - 1)^2$ Ställ upp det linjära ekvationssystem $Ac = b$ och lös mha normalekvationerna, $A^T A\, c = A^T b$.

$$\begin{array}{cc} x & y \\ 0 & 1 \\ 1 & 2 \\ 2 & 3 \\ 3 & 5 \end{array} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & (-1)^2 \\ 1 & 0^2 \\ 1 & 1^2 \\ 1 & 2^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 5 \end{pmatrix} \Rightarrow A^T A = \begin{pmatrix} 4 & 6 \\ 6 & 18 \end{pmatrix}, \quad A^T b = \begin{pmatrix} 11 \\ 24 \end{pmatrix}$$

Lös 2x2-systemet så får man $c_1 = 3/2$ och $c_2 = 5/6$.

P3b Kan lösas med Gauss-Newton ELLER lineraisering.

Alt1 Gauss-Newton: Sätt $c_1 = \alpha$, $c_2 = \beta$ och $c_3 = \gamma$:

```
c=[ 3/2, 5/6, -1]; % Startvarden gissade fran varden i p3a.
t=1; iter=0;
while norm(t)<1e-6 & iter<15;
f=c(1)+c(2)*(x-c(3)).2̂ - y;
J=[x.0̂, (x-c(3)).2̂, -c(2)*2*(x-c(3))];
t=J\ f;
c=c-t;
iter=iter+1;
end;
```

```
if iter<15;
alfa=c(1), beta=c(2), gamma=c(3)
else
disp('Ej konvergens.')
end;
```

Alt2 Linearisering:
$y = \alpha + \beta(x-\gamma)^2 = \alpha + \beta(x^2 - 2x\gamma + \gamma^2) = (\alpha + \gamma^2) - (2\beta\gamma)x + \beta x^2$ Sätt alltså $c_1 = \alpha + \gamma^2$, $c_2 = 2\beta\gamma$ och $c_3 = \beta$ och MKV-anpassa ett andragradspolynom $p(x) = c_1 + c_2 x + c_3 x^2$ till mätdata.

```
x=[0 1 2 3]';
y=[1 2 3 5]';
A=[x.^0 x x.^2];
c=A\y
beta=c(3)
gamma=-c(2)/(2*beta)
alfa=c(1)-beta*gamma^2
```

Fördelar med detta alternativ är att man inte behöver någon startgissning och att man får svaret direkt, utan iteration.

P4a

$$T(2) = 2\left\{\frac{1}{2}f(-1) + \frac{1}{2}f(1)\right\} = 2\left\{\frac{1}{2}\mathrm{e}^1 + \frac{1}{2}\mathrm{e}^1\right\} = 2\mathrm{e}^1 = 5.44$$

$$T(1) = 1\left\{\frac{1}{2}f(-1) + f(0) + \frac{1}{2}f(1)\right\} = 2\left\{\frac{1}{2}\mathrm{e}^1 + \mathrm{e}^0 + \frac{1}{2}\mathrm{e}^1\right\} = \mathrm{e}^1 + \mathrm{e}^0 = 3.72$$

P4b En överskattning ty e^x är en kurva som böjer sig uppåt (2a-derivatan är positiv), så de räta linjerna i trapetsregeln ligger alltid ovanför kurvan.

P4c ΔT skall avta ungefär en faktor 4. $\Delta T = T(2) - T(1) = 5.44 - 3.72 = 1.72$. $(\Delta T)/4 = 0.43 \Rightarrow T(0.5) \approx 3.72 - 0.43 = 3.29$.

P5 Härleds mha Taylor-utveckling.

$$y(x+h) \sim y + hy' + \frac{h^2}{2!}y'' + \frac{h^3}{3!}y'' + \mathcal{O}\left(h^4\right)$$

$$y(x-h) \sim y - hy' + \frac{h^2}{2!}y'' - \frac{h^3}{3!}y'' + \mathcal{O}\left(h^4\right)$$

$$\begin{aligned} y(x+2h) &\sim y + 2hy' + \frac{(2h)^2}{2!}y'' + \frac{(2h)^3}{3!}y'' + \mathcal{O}\left(h^4\right) \\ &= y + 2\,hy' + 4\,\frac{h^2}{2!}y'' + 8\,\frac{h^3}{3!}y'' + \mathcal{O}\left(h^4\right) \end{aligned}$$

P5a

$$\frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} = \frac{1}{2h}\left\{y + hy' + \frac{h^2}{2!}y'' + \frac{h^3}{3!}y'' + \mathcal{O}\left(h^4\right)\right\} - \frac{1}{2h}\left\{y - hy' + \frac{h^2}{2!}y'' - \frac{h^3}{3!}y'' + \mathcal{O}\left(h^4\right)\right\} =$$

$$\frac{2}{2h}\left\{hy' + \frac{h^3}{3!}y'' + \mathcal{O}\left(h^4\right)\right\} = y' + \frac{h^2}{3!}y'' + \mathcal{O}\left(h^3\right)$$

Uttrycket går mot y' när $h \to 0$ som sig bör. Felet är $E_{\text{trunk}} = \frac{h^2}{3!}y'' + \mathcal{O}\left(h^3\right) = c_1 h^2 + \mathcal{O}\left(h^3\right)$, dvs metoden är av ordning 2 (ty första feltermen är h^2).

P5b

$$\frac{y(x+h)-y(x-h)}{3h} = \frac{1}{3h}\left\{y + hy' + \frac{h^2}{2!}y'' + \frac{h^3}{3!}y'' + \mathcal{O}\left(h^4\right)\right\} - \frac{1}{3h}\left\{y - hy' + \frac{h^2}{2!}y'' - \frac{h^3}{3!}y'' + \mathcal{O}\left(h^4\right)\right\} =$$

$$\frac{2}{3h}\left\{hy' + \frac{h^3}{3!}y'' + \mathcal{O}\left(h^4\right)\right\} = \frac{2}{3}y' + \frac{2}{3}\frac{h^2}{3!}y'' + \mathcal{O}\left(h^3\right)$$

Uttrycket går INTE mot y' när $h \to 0$. Formeln skattar ej y'. Metoden är av ordning 0 (ty fungerar inte).

P5c

$$\frac{y(x+2h)-y(x-h)}{3h} = \frac{1}{3h}\left\{y + 2\,hy' + 4\,\frac{h^2}{2!}y'' + 8\,\frac{h^3}{3!}y'' + \mathcal{O}\left(h^4\right)\right\} - \frac{1}{3h}\left\{y - hy' + \frac{h^2}{2!}y'' - \frac{h^3}{3!}y'' + \mathcal{O}\left(h^4\right)\right\} =$$

$$\frac{1}{3h}\left\{3hy' + 3\,\frac{h^2}{2!}y'' + 9\,\frac{h^3}{3!}y'' + \mathcal{O}\left(h^4\right)\right\} = y' + \frac{h}{2!}y' + 3\,\frac{h^2}{3!}y'' + \mathcal{O}\left(h^3\right)$$

Uttrycket går mot y' när $h \to 0$ som sig bör. Felet är $E_{\text{trunk}} = \frac{h}{2!}y' + 3\,\frac{h^2}{3!}y'' + \mathcal{O}\left(h^3\right) = c_1 h + c_2 h^2 + \mathcal{O}\left(h^3\right)$, dvs metoden är av ordning 1 (ty första feltermen är h^1).

P6a

$$y'' + V(x)y = Ey$$

Diskretisera intervallet. Dela upp det i N delar: $x_i = 0.1 + ih$ där $h = (20.1 - 0.1)/N$. $y_i \approx y(x_i)$ med kända randvärden $y_0 = 1$ och $y_N = 0$.
Ersätt alla derivator med differenser: $y''(x_i) \approx \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2}$ ger

$$\frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2} + V(x_i) \cdot y_i = E \cdot y_i, \qquad i = 1..N-1$$

$$\Rightarrow \; \frac{1}{h^2}y_{i-1} + \left(V(x_i) - 1 - \frac{2}{h^2}\right)y_i + \frac{1}{h^2}y_{i+1} = 0, \qquad i = 1..N-1$$

Med $V(x_i) = 2/x_i$ och flytta över kända y-värden till högerledet fås

$$\begin{pmatrix} f(x_1) & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \frac{1}{h^2} & f(x_2) & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{1}{h^2} & f(x_3) & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{1}{h^2} & f(x_4) & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & & & & & & & \\ \vdots & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \frac{1}{h^2} & f(x_{N-2}) & \frac{1}{h^2} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & & 0 & \frac{1}{h^2} & f(x_{N-1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ \vdots \\ \vdots \\ y_{N-2} \\ y_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{h^2}y_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \\ -\frac{1}{h^2}y_N \end{pmatrix}$$

där $f(x_i) = V(x_i) - 1 - \frac{2}{h^2} = \frac{2}{x_i} - 1 - \frac{2}{h^2}$. För $N = 5$ blir det

$$\begin{pmatrix} f(x_1) & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 \\ \frac{1}{h^2} & f(x_2) & \frac{1}{h^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{h^2} & f(x_3) & \frac{1}{h^2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{h^2} & f(x_4) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{h^2}y_0 \\ 0 \\ 0 \\ -\frac{1}{h^2}y_5 \end{pmatrix}$$

P6b $y'' + V(x)y = Ey$, 1 styck 2a ordningens differentialekvation. Inför $1 \cdot 2 = 2$ stycken hjälpfunktioner.

$$\Rightarrow \begin{array}{l} u_1 = y \\ u_2 = y' \end{array} \;\Rightarrow\; \begin{array}{l} u_1' = u_2 \\ u_2' = (E - V(x)) \cdot u_1 \end{array} \quad \text{med} \quad \begin{array}{l} u_1(0.1) = 1 \\ u_2(0.1) = 0.5 \end{array}$$

P6c Eulers metod ger $\bar{u}^{(n+1)} = \bar{u}^{(n)} + h \cdot \bar{u}'^{(n)}$ vilket här blir

$$\begin{aligned} u_1^{(n+1)} &= u_1^{(n)} + h \cdot u_2^{(n)} \\ u_2^{(n+1)} &= u_2^{(n)} + h \cdot (E - V(x_n))\, u_1^{(n)} \\ x_{n+1} &= x_n + h \end{aligned}$$

Med $h = 0.1$ och $x_0 = 0.1$ behövs 2 steg för att komma till $x = x_2 = 0.3$:

n	x	u_1	$u_2 = u_1'$	$u_2' = (1-2/x)u_1$	$h\,u_1'$	$h\,u_2'$
0	0.1	1	0.5	$(1-2/0.1)\cdot 1 = -19$	0.05	-1.9
1	0.2	1.05	-1.4	$(1-2/0.2)\cdot 1.05 = -9.45$	-0.14	-0.945
2	0.3	0.91	-2.345			

så $y(0.3) = 0.91$.

P6d
```
function uprim=dudx(x,u);
uprim=[u(2); (1-2/x)*u(1)];

[xut,uut]=ode45('dudx'[0.1, 20.1],[1, 0.5]);
yut=uut(:,1);
plot(xut,yut);
```

/NC