Wetenschappelijk Rekenen

Examen - Derde bachelor informatica

Oefeningen - Oplossingen – 17 juni 2010

1. Stel dat je een stelsel van de vorm $A\,x = b$ moet oplossen, waarbij de $n \times n$ matrix

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & & \\ 1 & -2 & 1 & & & \\ & 1 & -2 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

gegeven is. Deze matrix is niet singulier en ze is negatief definiet, d.w.z. alle eigenwaarden zijn strikt negatief.

In de cursus hebben we verschillende technieken besproken om stelsels op te lossen. Probeer minstens 3 verschillende directe (d.w.z. niet iteratieve) methoden toe te passen.

De matrix staat, samen met 3 vectoren b_1, b_2 en b_3 voorgeprogrammeerd in `oef1_start.m`. In het bijzonder zijn de vectoren b_1, b_2 en b_3 zo gekozen dat x respectievelijk gelijk is aan $(1, 1, 1, \ldots, 1)^T$, $(-1, 1, -1, 1, \ldots, (-1)^n)^T$ en $(1, 2, 3, \ldots, n)^T$.

Vul dit bestand aan (en noem het resultaat `oef1.m`) met uw verschillende oplossingsmethoden en vergelijk op basis van de 3 voorbeelden voor verschillende waarden van n welke de beste methode is inzake nauwkeurigheid voor stelsels van deze vorm. Beschrijf (op papier) kort welke methoden u hebt gebruikt en wat uw conclusie is.

Oplossing : De meest voor de hand liggende methode is natuurlijk de LU-factorisatie, maar er kan ook een QR-factorisatie uitgevoerd worden. Voor de derde methode maken we gebruik van het feit dat $-A$ positief definiet is en dus een Cholesky-factorisatie bezit. We lossen dus eigenlijk het stelsel $(-A)\,x = -b$ op. In `Matlab` betekent dit bvb. dat we voor $A\,x_1 = b_1$ de volgende instructies uitvoeren:

```
[lA,uA]=lu(A);  % lu-factorisatie
chA=chol(-A);   % (-A)*x=(-b) en -A is pos. definiet -> cholesky
[q,r]=qr(A);    % qr-factorisatie
...
lue=norm(uA\(lA\(b1))-x1,2);           % 2-norm v. fout bij lu-algoritme
qre=norm(r\(q'*(b1))-x1,2);            % 2-norm v. fout bij qr-algoritme
chole=norm(chA\(chA'\(-b1))-x1,2);     % 2-norm v. fout bij Chol.-ontbinding
```

Voeren we dan `oef1.m` uit met verschillende waarden van n, dan vinden we dat het QR-algoritme voor elk van de 3 voorbeelden steeds het minst nauwkeurige resultaat levert. De nauwkeurigheid van de twee andere algoritmen is vergelijkbaar en soms is de ene methode beter, soms de andere.

2. Bepaal in de onderstaande formule de coefficiënten A, B, C en D evenals waarden voor α en p.

$$f'''(x) = \frac{A\,f(x) + B\,f(x+h) + C\,f(x+2\,h) + D\,f(x+3\,h)}{h^3} + \alpha\,h^p\,f^{(p+3)}(\xi)\,.$$

Oplossing : de volgende Maple-commando's (zie `oef2_opl.mws`) klaren de klus :

```
with(CurveFitting):
punten :=[[x,f(x)],[x+h,f(x+h)],[x+2*h,f(x+2*h)],[x+3*h,f(x+3*h)]]:
p:=unapply(PolynomialInterpolation(punten, t),t):
simplify((D@@3)(p)(x));
series(%-(D@@3)(f)(x),h,5);
```

Hierbij wordt eerst een interpolatieveelterm $p(t)$ geconstrueerd door de gevraagde punten. Deze veelterm wordt vervolgens 3 maal afgeleid en geëvalueerd voor $t = x$. De reeksontwikkeling tenslotte toont aan dat de foutterm begint met een term in h^1 en dat de bijhorende constante $\alpha = \frac{3}{2}$ is. M.a.w. we bekomen

$$f'''(x) = \frac{-f(x) + 3\,f(x+h) - 3\,f(x+2\,h) + f(x+3\,h)}{h^3} + \frac{3}{2}\,h\,f^{(4)}(\xi)\,.$$

3. Voor de numerieke oplossing van de hyperbolische advectie-vergelijking

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\,\frac{\partial u}{\partial x} = 0\,, \tag{1}$$

waarbij a constant wordt verondersteld en waarvan de oplossing wordt gegeven door $u(x,t) = u^0(x - a\,t)$, wordt het numerieke schema

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a\,\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\,\Delta x} = 0\,. \tag{2}$$

voorgesteld. Gevraagd :

(i) Leg uit hoe de overstap van (1) naar (2) wordt gemaakt.

(ii) Teken het stencil dat duidelijk maakt welke punten in dit schema betrokken zijn.

(iii) Welke voorwaarde legt de CFL-conditie in dit geval op om stabiliteit te garanderen?

(iv) Wat levert de Fourier analyse op indien een oplossing van de vorm $u_j^n = (\lambda)^n e^{i\,k\,j\,\Delta x}$ wordt vooropgesteld?

Oplossing :

(i) Hierbij wordt gebruik gemaakt van de formules

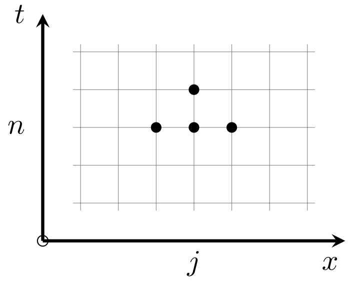
$$f'(t) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{f(t+\Delta t) - f(t)}{\Delta t}$$

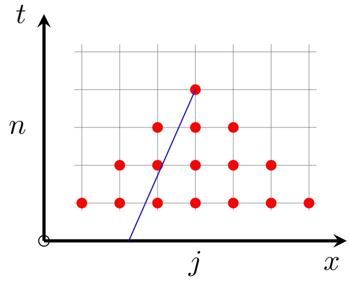
en

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x-\Delta x)}{2\,\Delta x}\,.$$

(ii) De betrokken punten liggen zoals in het linkerdeel van de onderstaande figuur.

(iii) Uit het stencil leren we dat het domain of dependence van de differentievergelijking een gelijkbenige driehoek zal zijn, terwijl dat van de differentiaalvergelijking een rechte is ($x - a\,t$ constant) met richtingscoëfficiënt $1/a$. Dit vinden we in het rechterdeel van de figuur. Opdat deze rechte binnen het domain of dependence van de differentievergelijking zou liggen, moet $\Delta t / \Delta x \leq |1/a|$.





(iv) Fourier-analyse leert dat

$$\frac{\lambda - 1}{\Delta t} + a\,\frac{e^{i\,k\,\Delta x} - e^{-i\,k\,\Delta x}}{2\,\Delta x} = 0$$

of

$$\lambda = 1 - \frac{a\,\Delta t}{\Delta x}\,i\,\sin k\,\Delta x\,.$$

Dit betekent dat het voorgestelde schema nooit stabiel is, vermits $|\lambda| > 1$ voor alle stapverhoudingen en bijna alle waarden van k.

4. Stel dat we, voor het oplossen van de gewone differentiaalvergelijking $y' = f(t, y(t))$ met $y(a) = \eta$, gebruik maken van extrapolatie op basis van de voorwaartse Euler-methode.

Noem $T_{0,0}$ het resultaat dat bekomen wordt bij overgang van t_n naar $t_{n+1} := t_n + h$ met staplengte h, en zij $T_{1,0}$ het resultaat dat bekomen wordt bij overgang van t_n naar t_{n+1} met staplengte $h/2$. Bereken $T_{1,1}$ en schrijf de numerieke methode op die overeenstemt met $T_{1,1}$.

Oplossing : er geldt

$$T_{0,0} = y_n + h\,f(x_n,\,y_n) = a_0 + a_1\,h + \mathcal{O}(h^2)$$

en

$$T_{0,1} = \left(y_n + \frac{h}{2}\,f(x_n,\,y_n)\right) + \frac{h}{2}\,f\left(x_n + \frac{h}{2},\,y_n + \frac{h}{2}\,f(x_n,\,y_n)\right) = a_0 + a_1\,\frac{h}{2} + \mathcal{O}(h^2)\,,$$

zodat

$$T_{1,1} = 2\,T_{0,1} - T_{0,0} = y_n + \frac{h}{2}\,f\left(x_n + \frac{h}{2},\,y_n + \frac{h}{2}\,f(x_n,\,y_n)\right) = a_0 + \mathcal{O}(h^2)\,.$$

De methode die hierachter zit, is

$$y_{n+1} = y_n + h\,f\left(x_n + \frac{h}{2},\,y_n + \frac{h}{2}\,f(x_n,\,y_n)\right)\,.$$

Deze methode wordt ook wel de expliciete middelpuntmethode genoemd.

Schrijf uw oplossingen neer op papier. Plaats de bestanden die u eventueel gemaakt hebt om de vragen op te lossen op Minerva. Dit doet u door

- te surfen naar http://indianio/
- in te loggen met uw Minerva-username en -password
- uw bestanden te zippen tot 1 enkel bestand en up te loaden.

Zorg ervoor dat ik uit de naamgeving kan afleiden bij welke vraag elk bestand hoort.

Nog enkele tips :

- schrijf proper : het is de beste manier om te slijmen.
- probeer uw antwoorden bondig en correct te formuleren.
- heb je bij Maple en/of Matlab moeite met (de syntax van) bepaalde commando's, aarzel dan niet dit te vragen.