Institutionen för Matematik, KTH

Inga hjälpmedel är tillåtna (ej heller miniräknare).

Råd för att undvika poängavdrag: Skriv lösningar med fullständiga meningar och utförliga motiveringar.

Del 2 rättas om del 1 är godkänd.

Betygsgränser inklusive bonuspoäng: D 10, C 20, B 30 och A 40 poäng.

Det finns två alternativa uppgifter 3; bara en av dem får lämnas in.

1. I kvantkemi (också i senaste Nobelpriset) används fixpunktiterationer för att bestämma egenvärden (dvs energinivåer i kvantsystem). Snabba numeriska metoder för dessa bygger i grunden ofta på iterationerna

$$x_{n+1} = 3x_n^2 - 2x_n^3, \qquad \text{för } x_n \in \mathbb{R} \;\text{ och } n = 0, 1, 2, \dots \;.$$

1a. (3p) Vilka är fixpunkterna för dessa iterationer?

1b. (5p) Vilka fixpunkter är stabila? (Dvs, till vilka fixpunkter kan iterationerna konvergera?)

1c. (9p) Skriv ett matlabprogram för fixpunktiterationerna som startar med $x_0 = 0.9$.

1d. (3p) Låt $x_0 = 0.9$. Visa att $z = \lim_{n\to\infty} x_n$ existerar och ge en uppskattning av $x_n - z$ som funktion av n. Tips: studera kvoten $(x_{n+1} - z)/(x_n - z)$. I kvantkemi görs iterationerna för kvadratiska matriser istället för $x_n \in \mathbb{R}$.

1a. *Låt $g(x) = 3x^2 - 2x^3$. Fixpunkter z är lösningen till $z = g(z)$, dvs*

$$0 = z - 3z^2 + 2z^3 = z(1 - 3z - 2z^2) = 2z(z - \frac{1}{2})(z - 1).$$

Svar: Iterationerna har fixpunkterna $z = 0$, $z = 1$ och $z = 1/2$.

1b. *Om z är en fixpunkt ger Taylors formel $z - x_{n+1} = g(z) - x_n = g'(\xi)(z - x_n)$ för något ξ mellan z och x_n, så z är stabil om felet $|z - x_{n+1}|$ inte är större än $|z - x_n|$ vilket gäller om $|g'(z)| < 1$ och x_n är tillräckligt nära z. Vi har $g'(z) = 6z(1 - z)$ och $g'(0) = g'(1) = 0$ och $g'(1/2) = 3/2$, vilket ger två stabila fixpunkter $z = 0$ och $z = 1$ och en instabil fixpunkt $z = 1/2$.*

1d. *Om gränsvärdet z existerar måste det vara en stabil fixpunkt. Vi har $1 - x_{n+1} = g(1) - g(x_n) = g'(\xi)(1 - x_n)$ för något ξ mellan 1 och x_n. Vi ser att $g'(\xi)$ är positiv och mindre än $6\times 0.9\times(1-0.9) = 0.54$, så felet $1-x_{n+1}$ är positivt och mindre än $1-x_n$. I varje iteration minskar felet med en faktor som är mellan noll och 0.54, dvs $0 < 1-x_n < (0.54)^n \times 0.1, \quad n = 0, 1, 2, \dots$*
.

1c. Ett exempel på Matlabprogram är

```
%fixpunktiterationer
x=0.9;              %startgissning
tol=1e-7;           %tolerens for skillnad i iterat
r=1;                %startar med ett och ar sedan skillnad i iterat
```

```
while(r>tol)
    y=3*x^2-2*x^3;  %fixpunktiteration
    r=abs(y-x);
    x=y;
end
disp('x=')
dips(x)
```

2a. (7p) Formulera en finit differensmetod för randvärdesproblemet

$$
\begin{aligned}
-u''(x) + u(x) &= f(x), \quad 0 < x < 1,\\
u(0) &= 0,\\
u(1) &= 1,
\end{aligned}
$$

där $f(x) = \sin^2(x)$.

2b. (8p) Byt högerledet $f(x) = \sin^2(x)$ mot $f(x, u(x)) = \sin^2(x) - 10^{-2}\sin^2(u(x))$. Formulera en numerisk metod för detta ickelinjära randvärdesproblem och skriv ett matlabprogram för att lösa det.

2a. *Gör indelningen* $x_n = n\Delta x,\ n = 0, 1, 2, \dots, N+1$ *med steglängden* $\Delta x = 1/(N+1)$ *och approximationen* $u_n \simeq u(x_n)$*, där* u_n *uppfyller systemet av finita differensekvationer*

$$
\begin{aligned}
-\frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n+1}}{\Delta x} + u_n &= f(x_n), \quad n = 1, \dots, N\\
u_0 &= 0,\\
u_{N+1} &= 1,
\end{aligned}
$$

med $f(x) = \sin^2 x$. *Vi har de obekanta* $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_N)^T$ *och ekvationerna kan skrivas* $A\mathbf{u} = \mathbf{b}$ *med* $N \times N$ *matrisen* A,

$$
A_{mn} = \begin{cases} 2 + \Delta x^2 & \text{om } n = m,\\ -1 & \text{om } |n-m| = 1,\\ 0 & \text{annars,} \end{cases} \qquad n = 1, \dots N, \quad m = 1, \dots, N,
$$

och högerledet $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^N$*, där* $b_n = \Delta x^2 \sin^2(x_n),\ n = 1, \dots, N-1$*, och* $b_N = \Delta x^2 \sin^2(x_N) + 1$.

2b. *Högerledet i uppgift a byts nu mot* $\mathbf{b} - \mathbf{g}(\mathbf{u})$ *där* $\mathbf{g} : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ *med* $g_n = 0.01\Delta x^2 \sin^2(u_n),\ n = 1, \dots, N$. *De ickelinjära ekvationerna kan skrivas* $\mathbf{F}(\mathbf{u}) = 0$*, där* $\mathbf{F}(\mathbf{u}) = A\mathbf{u} - \mathbf{b} + \mathbf{g}(\mathbf{u})$. *Newtons metod blir*

$$
\mathbf{u}(k+1) = \mathbf{u}(k) - (\mathbf{F}'(\mathbf{u}(k)))^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{u}(k)), \quad k = 0, 1, 2, \dots,
$$

och ett alternativ med fixpunktiterationer (där Jacobianen i Newtonmetoden approximeras av A*) är*

$$
A\mathbf{u}(k+1) = \mathbf{b} - \mathbf{g}(\mathbf{u}(k)), \quad k = 0, 1, 2, \dots
$$

```
%Newtons metod for randvardesproblem
tol=1e-6; %feltolerans for Newtoniterationer
r=1;      %norm av iteratandringen
d=0.01;    %parameter i hogerledet
a=1.0;    %parameter i hogerledet
N=100;    %antal frihetsgrader
dx=1/(N+1);    %steglangd
b=zeros(N,1);  % linjar del i hogerled
u=zeros(N,1);  % obekanta
f=zeros(N,1);  % ickelinjar del i hogerled
y=zeros(N,1);  % nasta iterat
F=zeros(N,1);  % ekvationssystemte lyder F(u)=0
A=zeros(N,N);  % matris i F
Fp=zeros(N,1); % Jacobian till F
i=0;           % antal iterat

while r>tol
    i=i+1;
    for n=1:N    % bilda A,b,Fp, f
        b(n) = a*dx^2*sin(n*dx)^2;
        if n==N
            b(N)=b(N)+1;
        end
        f(n) = sin(u(n))^2;
        A(n,n)=2+dx^2;
        Fp(n,n)=A(n,n)+d*2*dx^2*sin(u(n))*cos(u(n));
        if n>1
            A(n,n-1)=-1;
            Fp(n,n-1)=-1;
        end
        if n<N
            A(n,n+1)= -1;
            Fp(n,n+1)=-1;
        end
    end

    F=A*u-b+d*dx^2*f;
    y=Fp\F;              % Newtoniteration
    r=norm(y);
    u=u-y;
end
x=dx:dx:1-dx;
```

```
plot(x,u)
disp('antal iterationer=')
disp(i)
```

3a. (5p) Formulera en numerisk metod för att beräkna de generaliserade integralerna $\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x}}$ och $\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x+10^{-2}\sin^2 x}}$. Integranderna är singulära men integralerna är definierade (och lika med 2 i det ena fallet eftersom $2\sqrt{x}$ är en primitiv funktion). En numerisk metod för $\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x}}$ är bakåt-Euler metoden för $y'(x) = x^{-1/2}$. Varför fungerar ej framåt-Eulermetoden?

3b. (7p) Skriv ett matlabprogram för att approximera $\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x+10^{-2}\sin^2 x}}$ med bakåt-Eulermetoden.

3c. (3p) Bakåt-Eulermetodens noggrannhet kan uppskattas med hjälp av de över och undersummor som används i definitionen av integralen. Visa först att bakåt-Eulermetodens integralskattning $S(\Delta x)$ av integralen $\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x}}$ uppfyller $S(\Delta x) \le \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x}}$ för alla konstanta steglängder $\Delta x > 0$, dvs S är en undersumma. Visa sedan att S också uppfyller $S(\Delta x) \ge \int_{\Delta x}^{1+\Delta x} \frac{dx}{\sqrt{x}}$, dvs S är en översumma till $\int_{\Delta x}^{1+\Delta x} \frac{dx}{\sqrt{x}}$. Använd slutligen den undre och övre begränsningen av S för att bestämma konvergensordningen, dvs ge en uppskattning av felet $|\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x}} - S(\Delta x)|$ som funktion av Δx.

3a. *Låt $f(x) = x^{-1/2}$ eller $f(x) = (x + 0.01\sin^2 x)^{-1/2}$. Ekvationen $y'(x) = f(x),\ y(0) = 0$ ger $y(s) = \int_0^s f(x)dx,\ s > 0$. Bakåt Eulermetoden med indelningen $x_n = n\Delta x,\ n = 0,1,2,\ldots,N$, där $\Delta x = 1/N$, och approximationen $y_n \simeq y(x_n)$ ger*

$$\begin{aligned} y_{n+1} - y_n &= \Delta x f(x_{n+1}), \quad n = 0,1,2,\ldots,N-1, \\ y_0 &= 0\,. \end{aligned}$$

Framåt Eulermetoden fungerar ej eftersom $f(0) = \infty$ och $y_1 = y_0 + \Delta x f(0)$ för framåt Eulermetoden.

3b. *Ett exempel på Matlabprogram för bakåt Eulermetoden är*

```
%Bakat Eulermetoden
N=100;
dx=1/N;
a=0.01; %parameter
y=0;

for n=1:N
    x=n*dx;
    y=y+dx*(x+a*sin(x)^2)^(-1/2);
end
```

```
disp('integralen=')
disp(y)
```

3c *Låt* $f(x) = 1/\sqrt{x}$. *Vi har* $S(\Delta x) = (f(x_1) + f(x_2) + \ldots + f(x_N))\Delta x$ *och* $f(x) > f(x_n)$ *för* $x < x_n$. *Därför är*

$$\int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)dx > f(x_n)\Delta x$$

och genom att summera över alla intervall

$$\int_0^1 f(x)dx > \big(f(x_1) + f(x_2) + \ldots + f(x_N)\big)\Delta x = S(\Delta x)\,.$$

Vi har också $f(x) < f(x_{n-1})$ *för* $x_{n-1} < x$, *så*

$$\int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)dx < f(x_{n-1})\Delta x$$

och

$$\int_{\Delta x}^{1+\Delta x} f(x)dx < \big(f(x_1) + f(x_2) + \ldots + f(x_N)\big)\Delta x = S(\Delta x)\,,$$

vilket ger

$$\int_{\Delta x}^{1+\Delta x} f(x)dx < S(\Delta x) < \int_0^1 f(x)dx$$

och

$$\begin{aligned}
\int_{\Delta x}^{1+\Delta x} f(x)dx &= \int_0^1 f(x)dx + \int_1^{1+\Delta x} f(x)dx - \int_0^{\Delta x} f(x)dx \\
&= \int_0^1 f(x)dx + [2\sqrt{x}]_1^{1+\Delta x} - [2\sqrt{x}]_0^{\Delta x} \\
&= \int_0^1 f(x)dx + 2(\sqrt{1+\Delta x} - 1) - 2\sqrt{\Delta x} \\
&= \int_0^1 f(x)dx + \mathcal{O}(\sqrt{\Delta x})\,.
\end{aligned}$$

Bakåt Eulermetoden har därför feluppskattningen

$$0 < \int_0^1 f(x)dx - y_N < \mathcal{O}(N^{-1/2})$$

vilket ger konvergensordningen 1/2.

Alternativ uppgift 3. (15p) Formulera och bevisa en sats som relaterar det globala och lokala felet för approximation av ordinära differentialekvationer med Eulers metod.

Se boken Sats 6.4.