

TENTAMEN, DEL 2
SF1544
NUMERISKA METODER, GRUNDKURS
Tisdag 11 mars 2025 kl 14.00-17.00

Rättas endast om Del 1 är godkänd.

Betygsgräns: 10p D, 20p C, 30p B, 40p A. Maximalt antal poäng 50.

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

Inga hjälpmedel är tillåtna.

- P1.** Michaelis-Menten-ekvationen beskriver enzymatiska reaktioner där ett enzym omvandlar ett substrat (S) till en produkt (P). Ekvationen ges av

$$v = \frac{V_{max}C}{K_m + C}, \quad (1)$$

där v är reaktionshastigheten, C är koncentrationen av substratet, V_{max} är maximala reaktionshastigheten och K_m är Michaelis-konstanten.

I tabellen nedan finns experimentella data uppmätta en gång i minuten.

t [min]	0	1	2	3	4	5
C [mM]	5.0	4.6	4.3	4.1	4.0	3.9
v [μ M/min]	4.55	4.51	4.48	4.46	4.44	4.43

- (4 p) a) Värdena på tiden t och koncentrationen C i tabellen ska anpassas med hjälp av minsta kvadratmetoden till ett andragradspolynom, $C(t) = P_2(t)$.

Ställ upp det överbestämda linjära ekvationssystem som erhålls när alla värden på C och t i tabellen används för att bestämma $P_2(t)$. Element i matriser och vektorer ska tydligt framgå och värdena från tabellen ska användas. Du behöver inte lösa systemet.

Lösning: Vi sätter in data från tabellen i modellen $P_2(t_i) = c_0 + c_1t_i + c_2t_i^2$ där $i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$. Detta ger ekvationerna

$$5.0 = c_0 + c_1 \cdot 0 + c_2 \cdot 0^2,$$

$$4.6 = c_0 + c_1 \cdot 1 + c_2 \cdot 1^2,$$

$$4.3 = c_0 + c_1 \cdot 2 + c_2 \cdot 2^2,$$

$$4.1 = c_0 + c_1 \cdot 3 + c_2 \cdot 3^2,$$

$$4.0 = c_0 + c_1 \cdot 4 + c_2 \cdot 4^2,$$

$$3.9 = c_0 + c_1 \cdot 5 + c_2 \cdot 5^2,$$

och det överbestämda ekvationssystemet blir

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \\ 1 & 4 & 16 \\ 1 & 5 & 25 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5.0 \\ 4.6 \\ 4.3 \\ 4.1 \\ 4.0 \\ 3.9 \end{bmatrix}$$

- (4 p) **b)** Antag att du har löst minsta kvadrat-problemet, dvs beräknat koefficienterna i $P_2(t)$. Ange ett uttryck för minsta kvadrat-felet för det överbestämda ekvationssystemet i a)-uppgiften.

Lösning: Minsta kvadrat-felet för ett linjärt ekvationssystem $A\vec{x} = \vec{b}$ ges av 2-normen av residualvektorn, dvs $\|\vec{r}\|_2 = \|\vec{b} - A\vec{x}\|_2$. För det överbestämda ekvationssystemet i a)-uppgiften får vi

$$\vec{r} = \begin{bmatrix} 5.0 \\ 4.6 \\ 4.3 \\ 4.1 \\ 4.0 \\ 3.9 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \\ 1 & 4 & 16 \\ 1 & 5 & 25 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{bmatrix},$$

och vi kan ställa upp uttrycket för kvadraten av minsta-kvadrat-felet enligt

$$\|\vec{r}\|_2^2 = ((5.0 - c_0)^2 + (4.6 - (c_0 + c_1 + c_2))^2 + (4.3 - (c_0 + 2c_1 + 4c_2))^2 + (4.1 - (c_0 + 3c_1 + 9c_2))^2 + ((4.0 - (c_0 + 4c_1 + 16c_2))^2 + (3.9 - (c_0 + 5c_1 + 25c_2))^2.$$

Både $\|\vec{r}\|_2$ och $\|\vec{r}\|_2^2$ minimeras av minsta kvadrat lösningen. Den senare kallas i Sauer "the squared error" (sektion 4.1). Viktigt att det framgår vilken kvantitet man har uttryckt, och var den kommer från, så att man inte bara skriver ner summan.

Nu ska du istället studera hur reaktionshastigheten v beror på koncentrationen C genom att bestämma konstanterna V_{max} och K_m i modellen (1) med hjälp av data i tabellen och minsta-kvadratmetoden.

- (6 p) **c)** Formulera om ekvationen (1) på formen $y(x) = ax + b$, så att data i tabellen ovan kan användas för att ställa upp ett linjärt minsta kvadrat-problem och bestämma konstanterna V_{max} och K_m . Relationerna mellan y, x, a, b och v, V_{max}, K_m, C ska tydligt framgå.

Lösning: Om vi inverterar ekvation (1) får vi

$$\frac{1}{v} = \frac{K_m + C}{V_{max}C} = \frac{K_m}{V_{max}} \cdot \frac{1}{C} + \frac{1}{V_{max}},$$

dvs

$$y = \frac{1}{v}, \quad x = \frac{1}{C}, \quad a = \frac{K_m}{V_{max}}, \quad b = \frac{1}{V_{max}}.$$

När vi har bestämt a och b så ger detta K_m och V_{max} . Fler alternativ finns, tex omskrivningen $1/C = (V_{max}/K_m)(1/v) + K_n$ dvs då fås $y = 1/C$, $x = 1/v$, $a = V_{max}/K_m$, $b = K_m$.

- (4 p) **d)** Ställ upp det överbestämde ekvationssystemet som fås genom att använda modellen

i c)-uppgiften och all data i tabellen. Element i matriser och vektorer ska tydligt framgå. Du behöver inte lösa problemet.

Lösning: Vi sätter in data från tabellen i modellen $y_i(x_i) = ax_i + b$, $i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$. Detta ger ekvationerna

$$\frac{1}{4.55} = a \cdot \frac{1}{5.0} + b,$$

$$\frac{1}{4.51} = a \cdot \frac{1}{4.6} + b,$$

$$\frac{1}{4.48} = a \cdot \frac{1}{4.3} + b,$$

$$\frac{1}{4.46} = a \cdot \frac{1}{4.1} + b,$$

$$\frac{1}{4.44} = a \cdot \frac{1}{4.0} + b,$$

$$\frac{1}{4.43} = a \cdot \frac{1}{3.9} + b,$$

och det överbestämda ekvationssystemet blir

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{5.0} & 1 \\ \frac{1}{4.6} & 1 \\ \frac{1}{4.3} & 1 \\ \frac{1}{4.1} & 1 \\ \frac{1}{4.0} & 1 \\ \frac{1}{3.9} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{4.55} \\ \frac{1}{4.51} \\ \frac{1}{4.48} \\ \frac{1}{4.46} \\ \frac{1}{4.44} \\ \frac{1}{4.43} \end{bmatrix}.$$

P2. En seriekopplad RLC-krets beskrivs med differentialekvationen

$$L \frac{d^2 Q}{dt^2} + R \frac{dQ}{dt} + \frac{Q}{C} = V(t), \quad (2)$$

där $Q(t)$ är laddningen på kondensatorn, $V(t)$ är en pålagd växelspanning och L, R, C är induktansen, resistansen och kapacitansen. Strömmen $I(t)$ ges av $I(t) = \frac{dQ(t)}{dt}$. För att lösa ekvationen behövs initialvillkoren $Q(0) = Q_0$, $\frac{dQ(0)}{dt} = I_0$.

- (4 p) **a)** Formulera om ekvation (2) som ett system av första ordningens differentialekvationer. Glöm inte initialvillkoren.

Lösning: Med variabelsubstitutionen $u = Q$, $w = \frac{dQ}{dt}$ får vi ekvationerna

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} &= w, \\ L \frac{dw}{dt} + R w + \frac{u}{C} &= V(t), \end{aligned}$$

vilket ger systemet

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} u \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{R}{L} & -\frac{1}{LC} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ w \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{L}V(t) \end{bmatrix}.$$

Initialvillkoren för systemet ovan ges av $u(0) = Q(0) = Q_0$, $w(0) = \frac{dQ(0)}{dt} = I_0$.

(6 p)

- b)** Antag att L, R, C är kända konstanter och att $V(t)$ är en känd funktion. Formulera Euler bakåt för systemet i a)-uppgiften. Formulera ekvationssystemet som behöver lösas i varje tidssteg med Euler bakåt. Alla ingående storheter i ekvationssystemet ska vara definierade.

Lösning: Euler bakåt applicerat på ett generellt system $\frac{d}{dt}\vec{u} = \vec{f}(t, \vec{u})$ ges av

$$\vec{U}^{n+1} = \vec{U}^n + h \cdot \vec{f}(t_{n+1}, \vec{U}^{n+1}), \quad n = 0, 1, \dots$$

där h är steglängd, $t_n = n \cdot h$, och $\vec{U}^n \approx \vec{u}(t_n)$. För det linjära första ordningens systemet i a)-uppgiften får vi

$$\begin{bmatrix} U^{n+1} \\ W^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U^n \\ W^n \end{bmatrix} + h \cdot \left(\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{1}{LC} & -\frac{R}{L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U^{n+1} \\ W^{n+1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{L}V(t_{n+1}) \end{bmatrix} \right),$$

där $U^n \approx u(t_n)$, $W^n \approx w(t_n)$. Genom att flytta över alla termer som innehåller U^{n+1} och W^{n+1} i vänsterledet får vi att det linjära ekvationssystem som behöver lösas i varje tidssteg är

$$\begin{bmatrix} U^{n+1} \\ W^{n+1} \end{bmatrix} - h \cdot \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{1}{LC} & -\frac{R}{L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U^{n+1} \\ W^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U^n \\ W^n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{h}{L}V(t_{n+1}) \end{bmatrix},$$

dvs

$$\begin{bmatrix} 1 & -h \\ \frac{h}{LC} & 1 + \frac{hR}{L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U^{n+1} \\ W^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U^n \\ W^n + \frac{h}{L}V(t_{n+1}) \end{bmatrix}.$$

(6 p)

- c)** Antag nu att vi vill undersöka beteendet hos ett magnetiskt material där induktansen L är en funktion av strömmen I och beskrivs av sambandet

$$L(I) = \frac{L_0}{1 + \beta I^2},$$

där L_0 och β är kända konstanter. R, C antas fortsatt vara kända konstanter och $V(t)$ antas vara en känd funktion. Formulera ekvationssystemet som behöver lösas i varje tidssteg med Euler bakåt. Alla ingående storheter i ekvationssystemet ska vara definierade.

Lösning: När induktansen är en funktion av strömmen,

$$L(I) = \frac{L_0}{1 + \beta I^2},$$

blir det första ordningens system från a)-uppgiften ickelinjärt då $I = \frac{dQ}{dt}$ är en av variablerna i systemet. Euler bakåt applicerat på det ickelinjära systemet blir

$$\begin{bmatrix} U^{n+1} \\ W^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U^n \\ W^n \end{bmatrix} + h \cdot \begin{bmatrix} W^{n+1} \\ -\frac{R}{L(W^{n+1})} W^{n+1} - \frac{1}{L(W^{n+1})C} U^{n+1} + \frac{1}{L(W^{n+1})} V(t_{n+1}) \end{bmatrix},$$

där alltså $L(W^{n+1}) = \frac{L_0}{1 + \beta(W^{n+1})^2}$.

Ekvationerna går inte att lösa på formen ovan utan ytterligare steg behövs för att få ut en lösning. Låt $U = u_{n+1}$ och $W = w_{n+1}$. I varje tidsteg kommer vi behöva lösa ett ickelinjärt ekvationssystem enligt $\vec{F}(U, W) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$, där vi söker U, W så att

$$\vec{F}(U, W) = \begin{bmatrix} U \\ W \end{bmatrix} - \left(\begin{bmatrix} U^n \\ W^n \end{bmatrix} + h \cdot \begin{bmatrix} W \\ -\frac{R}{L(W)} W - \frac{1}{L(W)C} U + \frac{1}{L(W)} V(t_{n+1}) \end{bmatrix} \right).$$

Notera att U^n, W^n, h, R, C och $V(t_{n+1})$ i yttrycket ovan är kända.

P3. En funktion f har mätts upp i $N+1$ punkter (N jämnt tal) på intervallet $[0, 1]$,

$$\begin{aligned}x_\ell &= \ell h, & \ell &= 0, 2, \dots, N-2, N, \\x_\ell &= (\ell-1)h + 2h/3, & \ell &= 1, 3, \dots, N-3, N-1,\end{aligned}$$

med $h = 1/N$. Dvs vi känner $f(x_\ell)$, $\ell = 0, \dots, N$ där de första punkterna är $x_0 = 0$, $x_1 = 2h/3$, $x_2 = 2h$, osv.

Konstruera en kvadraturregel (dvs sätt upp en formel) för att approximera integralen av f på intervallet mellan 0 och 1. Gör detta genom att approximera f med ett styckvis linjärt polynom. Dvs på varje intervall x_ℓ till $x_{\ell+1}$ så approximeras f med det linjära polynom som går genom punkterna $(x_\ell, f(x_\ell))$ och $(x_{\ell+1}, f(x_{\ell+1}))$ och detta polynom integreras sedan exakt.

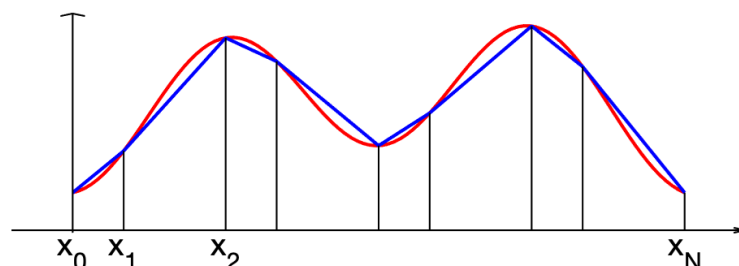


Figure 1: Sketch som visar en funktion $f(x)$ (röd kurva) och det styckvis linjära polynom som används för approximation.

- (6 p) **a)** Formulera först kvadraturregeln på intervallet $[0, 2h]$, dvs bestäm a_0 , a_1 och a_2 i formeln

$$\int_0^{2h} f(x) dx \approx a_0 f(x_0) + a_1 f(x_1) + a_2 f(x_2).$$

Lösning: Integralen av en rät linje kan beräknas som "arean" av dess trapets (kan ha negativt värde). Trapetsen mellan $x_0 = 0$ och $x_1 = 2h/3$ har arean $\frac{2h}{3} \cdot \frac{1}{2}(f(0) + f(\frac{2h}{3}))$. Mellan $x_1 = 2h/3$ och $x_2 = 2h$ har vi $(2h - \frac{2h}{3}) \cdot \frac{1}{2}(f(\frac{2h}{3}) + f(2h))$. Om vi adderar dessa två får vi

$$\begin{aligned}\int_0^{2h} f(x) dx &\approx \frac{2h}{3} \cdot \frac{1}{2} f(0) + \frac{1}{2} \left(\frac{2h}{3} + 2h - \frac{2h}{3} \right) f\left(\frac{2h}{3}\right) + \frac{1}{2} \left(2h - \frac{2h}{3} \right) f(2h) \\&= \frac{h}{3} f(0) + h f\left(\frac{2h}{3}\right) + \frac{2h}{3} f(2h)\end{aligned}$$

dvs $a_0 = h/3$, $a_1 = h$ och $a_2 = 2h/3$.

- (6 p) **b)** Formulera kvadraturregeln på hela intervallet, dvs ange $w_0, \dots, w_N$ i uttrycket

$$\int_0^1 f(x) dx \approx \sum_{\ell=0}^N w_\ell f(x_\ell).$$

Lösning: Kvadraturvikterna från (a) blir de samma för varje intervall av längd $2h$. Dvs vi får

$$\int_0^1 f(x)dx \approx (a_0f(x_0) + a_1f(x_1) + a_2f(x_2)) + (a_0f(x_2) + a_1f(x_3) + a_2f(x_4)) + \dots \\ \dots + (a_0f(x_{N-4}) + a_1f(x_{N-3}) + a_2f(x_{N-2})) + (a_0f(x_{N-2}) + a_1f(x_{N-1}) + a_2f(x_N))$$

Från detta ser vi att $w_0 = a_0 = h/3$, $w_N = a_2 = 2h/3$, $w_\ell = a_1 = h$, $\ell = 1, 3, \dots, N-1$, $w_\ell = a_2 + a_0 = h$, $\ell = 2, 4, \dots, N-2$. Dvs vikterna för udda och jämna punkter blir de samma, och vi får: $w_0 = h/3$, $w_\ell = h$, $\ell = 1, 2, \dots, N-1$, $w_N = 2h/3$.

- (4 p) c) Vilken noggrannhetsordning förväntar du dig att kvadraturregeln i (b) har? Skulle du kunna konstruera en högre ordningens kvadraturregel med de data du har tillgängligt? Beskriv hur.

Lösning: Då vi integrerar ett linjärt polynom exakt på varje delintervall så förväntar vi oss andra ordningens noggrannhet. Det går att konstruera en kvadratur metod med högre noggrannhet. Bestäm då istället a_0 , a_1 och a_2 i (a) genom att ta fram det kvadratiske polynomet som interpolerar de tre punkterna, och integrera det exakt. Konstruera den sammansatta regeln som i (b). Här förväntar vi oss att den metod vi får fram har noggrannhetsordning 3 då den integrerar ett kvadratiskt polynom exakt på varje delintervall.