

**Becs-114.1100 Laskennallinen tiede / Computational Science**

Loppuentti / Final Exam 19.12.2013

Laskin sallittu, ei muuta materiaalia. / Calculator is allowed, no other material.

Kaikki paperit on palautettava. / All exam papers must be returned.

---

**Tehtävä 1.**

(a) (3 p.) Määrittele moninkertainen juuri. Miten Newtonin menetelmää voidaan muokata moninkertaisten juurten löytämisen nopeuttamiseksi?

(b) (3 p.) Esitä Richardsonin ekstrapolaation idea. Voit ottaa lähtökohdaksi Taylorin sarjaesityksen  $f'(x) \approx \frac{1}{2h}[f(x+h) - f(x-h)] + a_2h^2 + a_4h^4 + a_6h^6 + \dots$

**Tehtävä 2.**

(a) (3 p.) Esitä Gaussin kvadratuurin idea (motivaatio) ja käyttö.

(b) (3 p.) Onko seuraava funktio splinifunktio? Perustele hyvin.

$$Q(x) = \begin{cases} x^2 & x \leq 0 \\ -x^2 & 0 \leq x \leq 1 \\ 1 - 2x & x \geq 1 \end{cases}$$

**Tehtävä 3.** (6 p.) Esitä pienimmän neliösumman periaate ja miten sitä käytetään tapauksessa, jossa pistepareina  $(x_k, y_k)$ ,  $k = 0, 1, \dots, m$ , annettu data on esitettävissä tunnettujen kantafunktioiden  $g_j(x)$ ,  $j = 0, 1, \dots, n$ , lineaarikombinaationa  $y_k = \sum_{j=0}^n c_j g_j(x_k)$ ?

**Tehtävä 4.**

(a) (3 p.) Esitä kaksi tapaa tuottaa satunnaislukuja, jotka noudattavat todennäköisyysjakaumaa  $p(x)$ .

(b) (3 p.) Kuvaa control variate-menetelmä. Miten ja mihin sitä käytetään ja mitä etua sillä saavutetaan?

**Tehtävä 5.** (6 p.) Kuvaa Metropolis-näytteistys (Metropolis importance sampling). Riittää kuvata algoritmi systeemin energiaerojen  $\Delta E$  avulla - konkreettista systeemiä ei ole välttämätöntä määritellä. Millaisen näytteistyksen konstruoisit ajasta riippuvien suureiden estimoimiseksi vahvasti (termisessä) epätasapainossa olevasta systeemistä (kuvaa periaate)?

Kirjoita vastauspaperisi loppuun, monelleko luennolle ja/tai laskuharjoituskerralle (atkluokassa) osallistuit? (Rehellinen lausahdus, kiitos. 0 on ok, tämä ei vaikuta arvosteluun.)  
Tähän tyyliin: Osallistuin \_\_\_/11 luennolle ja \_\_\_/10 laskuharjoituskerralle.

FOR THE QUESTIONS IN ENGLISH, PLEASE SEE OVERLEAF.

**Problem 1.**

(a) (3 p.) Define a multiple root. How can Newton's method be modified to speed up location of multiple roots?

(b) (3 p.) Present the idea of Richardson extrapolation. You can take the Taylor expansion  $f'(x) \approx \frac{1}{2h}[f(x+h) - f(x-h)] + a_2h^2 + a_4h^4 + a_6h^6 + \dots$  as your starting point.

**Problem 2.**

(a) (3 p.) Present the idea (motivation) of the Gaussian quadrature and its usage.

(b) (3 p.) Is the function given below a spline function? Give proper justifications.

$$Q(x) = \begin{cases} x^2 & x \leq 0 \\ -x^2 & 0 \leq x \leq 1 \\ 1 - 2x & x \geq 1 \end{cases}$$

**Problem 3.** (6 p.) Describe the method of least squares and how it is used in the case, where the data that is given as point pairs  $(x_k, y_k)$ ,  $k = 0, 1, \dots, m$ , is presentable as a linear combination  $y_k = \sum_{j=0}^n c_j g_j(x_k)$  of the basis functions  $g_j(x)$ ,  $j = 0, 1, \dots, n$ ?

**Problem 4.**

(a) (3 p.) Describe two ways of generating random numbers that are distributed according to the probability density  $p(x)$ .

(b) (3 p.) Describe the control variate method. How and for what purpose is it used, and what can be gained by using it?

**Problem 5.** (6 p.) Describe Metropolis importance sampling. It suffices to describe the algorithm using energy differences  $\Delta E$  in the system - a concrete system need not be necessarily described. What kind of sampling would you construct for estimating time-dependent quantities in a system that is strongly out of (thermal) equilibrium (describe the principle)?

Please state at the end of your paper, how many lectures and/or exercise sessions you attended? (An honest statement, please. 0 is ok, this will not affect your grading.) This way: I attended \_\_\_/11 lectures and \_\_\_/10 exercise sessions.

KYSYMYKSET SUOMEKSI KÄÄNTÖPUOLELLA.