Becs-114.1100 Laskennallinen tiede / Computational Science

Opputentti / Final Exam 08.12.2015

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

Tehtävä 1. (6p.) Kuvaa/johda Newtonin menetelmä. Johda, kuinka numeerinen virhe pienenee iteraatioiden lukumäärän funktiona? Kuvaa tyypillisiä virhetilanteita, joissa Newtonin menetelmä ei konvergoidu kohti oikeita ratkaisuja.

Tehtävä 2. **(a)** (3p.) Miten voidaan laskea mahdollisimman tarkasti funktio $f(x) = e^x - e^{-2x}$ pisteen $x = 0$ läheisyydessä? Perustele hyvin.
(b) (3p.) Kuvaa ainakin kaksi tapaa tuottaa satunnaislukuja x mielivaltaisesta todennäköisyystiheysjakaumasta $p(x)$.

Tehtävä 3. (6p.)
Muodosta interpoloiva polynomi seuraavalle datajoukolle:

x	0	2	3	4
y	8	14	47	116

(a) Lagrangen muodossa, **(b)** Newtonin muodossa.

Tehtävä 4. (6p) Mitä ovat gaussiset kvadratuurikaavat (Gaussian quadrature formulas). Mihin niitä käytetään ja miten ne voidaan määritellä? Voit käyttää esimerkkinä yleistä 3. asteen polynomia, $q(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3$.

Tehtävä 5.
(a) (3p.) Selitä ns. importance samplingin periaate ja toiminta laskettaessa Monte Carlo -menetelmää käyttäen integraalin

$$I = \int_a^b f(x)dx$$

arvoa, missä $f(x)$ on mielivaltainen ainakin välillä $[a, b]$ määritelty funktio. Kuvaa niin tarkasti, että kuvauksesi perusteella voisi kirjoittaa algoritmin. Voit halutessasi käyttää jotain esimerkkifunktiota $f(x)$.
(b) (3p.) Metropolis Monte Carlo -simulaatiomenetelmässä lämpötilafluktuaatioiden aiheuttama stokastisuus tuodaan simulaatiomalliin Boltzmannin painojen avulla. Kuvaa Metropolis Monte Carlo -menetelmä, ts. algoritmi pääpiirteittäin. Voit käyttää kaksiulotteista Ising-mallia esimerkkinä, mutta riittää myös viitata mielivaltaisen mallin tiloihin i, missä satunnaisuus on seurausta äärellisestä lämpötilasta $T > 0$.

FOR THE QUESTIONS IN ENGLISH, PLEASE SEE OVERLEAF.

Problem 1. (6p.) Describe/derive Newton's method. Derive how the numerical error diminishes as a function of number of iterations. Describe typical error situations, where Newton's method will not converge towards the correct solutions.

Problem 2. (a) (3p.) How can accurate values of the function

$$f(x) = e^x - e^{-2x}$$

be computed in the vicinity of $x = 0$? Provide clear and accurate reasoning.
(b) (3p.) Describe at least two ways of generating random numbers that give an arbitrary probability density distribution $p(x)$?

Problem 3. Find the interpolating polynomial for the the following table of values:

x	0	2	3	4
y	8	14	47	116

(a) in the Lagrange form, **(b)** in the Newton form.

Problem 4. (6p) What are Gaussian quadrature formulas? What are they used for and how can they be defined? You can use a general polynomial of degree 3 as an example, $q(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3$.

Problem 5.
(a) (3p.) Explain the principle of importance sampling in the Monte Carlo integration and show how it is applied to computing the value of the integral

$$I = \int_a^b f(x)dx,$$

where $f(x)$ is an arbitrary function defined at least on the interval $[a,b]$. Describe in sufficient detail, so that an algorithm could be written based on your description. You may use an example function to illustrate the method.
(b) (3p.) In the Metropolis Monte Carlo simulation method stochasticity due to thermal fluctuations is introduced in the algorithm via the Boltzmann weights. Describe the Metropolis Monte Carlo method, that is, the main steps of the algorithm. You may use the two-dimensional Ising model as an example, but it is also sufficient just to refer to states i in an arbitrary model, where randomness results from the non-zero temperature $T > 0$.

KYSYMYKSET SUOMEKSI KÄÄNTÖPUOLELLA.