

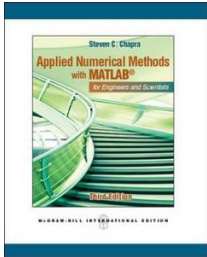
# Beräkningsvetenskap Introduktion – om kursen

Beräkningsvetenskap I/KF



## Kursbok

- Chapra: Applied Numerical Methods with Matlab for Engineers and Scientists, 3rd ed  
McGraw-Hill (International edition)



Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

## Kursens mål

För godkänt betyg ska studenten kunna

- redogöra för och utföra uppgifter som kräver kännedom om de *nyckelbegrepp* som ingår i kursen\*
- Beskriva och använda de *algoritmer* som ingår i kursen
- Undersöka egenskaper hos beräkningsalgoritmer och matematiska modeller med hjälp av de *analysförfaranden* som ingår i kursen
- Formulera *program* som använder inbyggda Matlab-kommandon samt förklara vad ett program utför och resulterar i efter exekvering

\* Nyckelbegrepp: algoritm, numerisk metod, diskretisering, maskinepsilon, noggrannhet, noggrannhetsordning, stabil- resp icke stabil algoritm, diskretiseringsfel (trunkeringsfel), iteration, kondition och konditionstal,...

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

## Kursens mål, forts

- I grupp formulera ett program som använder programmeringsstrukturer (if, while, for)
- I grupp strukturera och dela upp ett mindre beräkningsproblem i underproblem, formulera algoritm för lösning av problemet, samt implementera i Matlab
- förklara och sammanfatta lösningsmetoder och resultat på ett överskådligt sätt i en mindre rapport

Examinationen består av miniprojekt/workout och tentamen.

De fyra första punkterna i målen (gult) examineras på tentan, övriga (grönt) + delar av punkt 4 examineras genom miniprojekten

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

## Mål och betygskriterier

- Förkortade och förenklade mål för tentan:

**Mål 1:** Visa förtrogenhet med nyckelbegrepp

**Mål 2:** Visa förtrogenhet med de algoritmer. Inkluderar även att kunna formulera algoritmer i Matlab eller pseudokod eller att använda inbyggda Matlabkommandon för att uttrycka hur beräkningar ska utföras

**Mål 3:** Visa förtrogenhet med de analysförfaranden

**Mål 4:** Visa elementär förtrogenhet med programmering, framför allt förklara vad program utför (mer avancerad programmering görs i grupp och framför dator)

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

## Betygskriterier

- För de fyra första målen har vi betygskriterier som används när vi konstruerar och bedömer tentan

Mål nr	Kriterier för betyg 3
1	Kunna återupprepa eller känna igen standardförklaringar av begrepp samt kunna utföra standarduppgifter som kräver kännedom om begrepp
2	Kunna visa hur algoritmer kan användas för lösning av tillämpningsproblem, när det explicit framgår vilka algoritmer som ska användas
3	Kunna utföra standardförfaranden för analys av algoritmer när det explicit framgår vilken analys som avses
4	Givet ett kortare program i Matlab kunna förklara vad resultatet av programmet skulle bli om det kördes, samt kunna skriva enklare kod som är nödvändig för att kunna använda inbyggda matlabfunktioner

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Betygskriterier**

Mål nr	Kriterier för betyg 4	Mål nr	Kriterier för betyg 5
1-4	Kunna behandla beräkningsproblem som innehåller minst två av de aspekter som återspeglas i målen och där kunskaper från kursen är direkt tillämpliga men det inte framgår explicit vilka algoritmer etc som avses.	1-4	Kunna behandla beräkningsproblem som innehåller minst två av de aspekter som återspeglas i målen och där det krävs att man kombinerar eller generaliserar kunskaper från kursen utan att det framgår explicit vilka sådana kombinationer eller generaliseringar som avses. Det innebär att man ska kunna utföra något nytt som inte direkt ingår i kursen, genom att generalisera kunskaperna.

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Betygskriterier**

- Tentan kommer att konstrueras och bedömas utgående från betygskriterierna
- Bedömning sker "poänglöst" – man uppfyller eller inte uppfyller målen upp till något betygskriterium
- Underkänt på ett mål ger U på kursen
- Varje mål testas i flera frågor – mer om tentan senare

Exempel:  
Så här kan det se ut (siffrorna i tabellen är betyg)

Uppg nr	Mål 1	Mål 2	Mål 3	Mål 4
1	3	X	3	X
2	X	3	X	X
3	3	X	X	X
4	X	3	3	X
5	X	X	X	3
6			4, 5	
7			4, 5	

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Kursens upplägg/struktur**

- Fem olika block
  - Introduktion till datorberäkningar och Matlab
  - Linjära ekvationssystem
  - Programmering
  - Integraler
  - Ickelinjära ekvationer

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Kursens upplägg/struktur**

- Varje block, utom inledning- och programmeringsblocken, har strukturen

```

    graph TD
      Datorlab --> Återkoppling
      Återkoppling --> Problemlösning_miniprojekt[Problemlösning miniprojekt]
      Problemlösning_miniprojekt --> Workout
      Workout --> Föreläsningar
      Föreläsningar --> Datorlab
  
```

- Alla delar hänger ihop – om man t ex missat labben förstår man föreläsningen sämre
- Alla delar tillsammans ger "fullständig" förståelse av blocket

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Kursens upplägg/struktur**

Citat från tidigare kursvärderingar:

"Det är framförallt sampelet mellan de olika formerna som varit bra. Att först ha laboration, sen föreläsning, workout och sist problemlösning gav förståelse och väl behövlig repetition. När man var klar med ett block kunde man det väl."

"Jag tycker det hänger ihop bra. Först får man testa praktiskt utan att förstå och sen får man förklarat för sig och till sist så faller teorin på plats när man gör workouten."

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Tips från studenter**

Citat från tidigare kursvärderingar (fr ht14):

"Häng med från början, ha en positiv attityd och fånga det intressanta i kursen. Kursupplägget är till för dig så se till att hänga med på alla moment så blir kursen intressant och rolig med lättsam arbetsbelastning."

"Gör workoutsen och lägg tid på miniprojekten.."

"1. Få in grundläggande programmeringsstruktur så snabbt som möjligt.  
2. Se till att ni förstår alla nyckelbegrepp som används under föreläsningarna och i materialet, kursen blir så mycket lättare då."

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Informationsteknologi**

**Inställning till lärande**

*"Tell me and I forget  
Teach me and I remember  
Involve me and I learn"*  
Benjamin Franklin

Vilken inställning till lärande bör man ha?

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Beräkningsvetenskap**  
**Introduktion – om ämnet**

Beräkningsvetenskap I/KF

**Informationsteknologi**

**Vad är beräkningsvetenskap?**

Laborationer

Teori

Simuleringar/datorberäkningar

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Informationsteknologi**

**Vad är beräkningsvetenskap?**

- Beräkning av satellitbanor
- Simulering av luftflöde kring flygplan
- Simulerad krocktest av bilar
- Hållfasthetsberäkningar
- Väderleksprognoser
- Simulering av förbränning, t ex i motor
- Simulering av föroreningstransport i naturen
- Bildanalys ("förbättra" bilder, hitta mönster)
- Bestämning av molekylstrukturer hos proteiner
- Molekyldynamik

...och mycket mycket mer

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Informationsteknologi**

**Vad är beräkningsvetenskap?**

Partitionering vid beräkning på parallell dator

Simulering av blixtnedslag i SAAB 2000

Krocksimulering

Simulering av proteinveckning

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Informationsteknologi**

**Vad är beräkningsvetenskap?**

Molekyldynamik

Här: studier av utbytesmekanismer och utbyteshastigheter mellan vattenmolekyler runt en litiumjon (i vatten)

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Vad är beräkningsvetenskap?**

Veckning av HIV-virus



Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Vad är beräkningsvetenskap?**

Tillämpningarna är exempel på problem som kan beskrivas med *matematiska modeller*

**Problem!**  
Kan som regel inte lösas analytiskt, på "vanligt" sätt.

**Lösning:**  
Lös problemet på dator – måste använda *numeriska lösningsmetoder*.

**Resultat:**  
Ger approximativ lösning.

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Vad är beräkningsvetenskap?**



Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Vad är beräkningsvetenskap?**

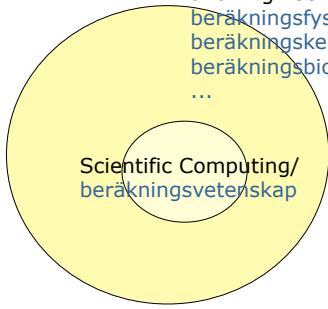
**Ett (trivialt) exempel**  
Beräkna arean på jorden med den matematiska modellen  $A = 4\pi r^2$

Innehåller flera approximationer och fel:

- Jorden approximeras av en sfär – idealisering av jordens verkliga yta
- Värdet på radien baseras på empiriska mätningar och tidigare beräkningar
- Värdet på  $\pi$  kräver trunkering (avhuggning) av oändlig decimalutveckling
- Indata och resultat avrundas av datorn

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Beräkningsvetenskapens sammanhang**



Computational Science and Engineering/  
beräkningsfysik,  
beräkningskemi,  
beräkningsbiologi;  
...

Scientific Computing/  
beräkningsvetenskap

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Vad är beräkningsvetenskap?**



Datavetenskap

Matematik

Numeriska metoder

Datorprogram

Tillämpningsämnen

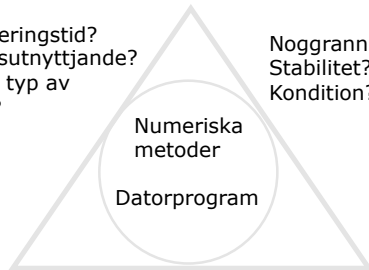
Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

## Vad är beräkningsvetenskap?

### Frågeställningar inom beräkningsvetenskap

Exekveringstid?  
Minnesutnyttjande?  
Vilken typ av dator?

Noggrannhet?  
Stabilitet?  
Kondition?



## Ämnets historia

- |           |                                         |
|-----------|-----------------------------------------|
| 1945      | Den moderna datorn                      |
| 1960-tal  | Professurer i numerisk analys           |
| 1975-2000 | Ett tvärvetenskapligt område tar form   |
| 2000-tal  | Begreppet beräkningsvetenskap etableras |