763315A ATK II – NUMEERINEN MALLINTAMINEN

Koe 4.5.2007

Kokeen laatija: Jussi Mattas

Ratkaise viisi (5) tehtävää!

1. a) Selosta lyhyesti, tarvittaessa esimerkkien avulla, mitä seuraavat *Mathematican* käsitteet tarkoittavat:
   - suoran ja viivästetyn sijoituksen ero (operaattorien `=` ja `:=` ero)
   - lista
   - sääntö

   b) Mitä seuraavat *Mathematican* funktiot tekevät? Mitkä ovat niiden argumentit?
   - `Table`
   - `Reduce`
   - `Simplify`

2. Miten suoritat seuraavat toiminnot *Mathematicassa*?
   - ratkaiset differentiaaliyhtälön $y''(x) + xy'(x) = 2y(x)$, reunaehdoilla $y(0) = 1$ ja $y'(0) = 0$
   - ratkaiset yhtälön $\tan x = x$
   - määrittelet funktion $f(x) = e^x \ln x \cos^2 x$ ja piirrät sen kuvaajan annetulla välillä $a < x < b$
   - lasket funktion $g(x, y, z) = 2^{\cos x} y^9 + e^z \sin y$ (i) kokonaisdifferentiaalin ja (ii) osittaisderivaatat $\frac{\partial g}{\partial x}$ ja $\frac{\partial^2 g}{\partial z^2}$
   - ajat tiedostoon `ohjelma.m` kirjoitetut *Mathematica*-komennot, kun tiedosto sijaitsee kansiossa `C:\ATK2`
   - määrittelet matriisin
   $$M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix},$$
   lasket sen käänteismatriisin M^{-1} ja tarkistat tuloksen laskemalla matriisitulot MM^{-1} ja $M^{-1}M$

3. Mitä tarkoittaa interpolaatio? Miten se on toteutettavissa *Mathematicassa*?

KÄÄNNÄ!

4. Esitä vähintään kaksi tapaa ohjelmoida toisto *Mathematicassa*. Kirjoita yhdellä tavalla ohjelma, joka laskee kymmenen ensimmäistä Fibonaccin lukua. Fibonaccin luvut $x_0, x_1, \ldots$ määritellään rekursiokaavalla

$$\begin{cases} x_0 = 0 \\ x_1 = 1 \\ x_n = x_{n-1} + x_{n-2}, \text{ kun } n \geq 2. \end{cases}$$

5. Tarkastellaan Schrödingerin yhtälöä

$$-y''(r) - \frac{2}{r} y(r) = Ey(r).$$

Se on differentiaaliyhtälö, jolla on ominaisarvo ja sen ratkaisuna saadaan ominaisarvo E ja vastaava ominaisfunktio $y(r)$. Kvanttimekaniikassa yo. yhtälöllä kuvataan vetyatomia, ominaisarvo E kuvaa elektronin energiaa ja ominaisfunktiosta y saadaan laskettua elektronin todennäköisyysjakauma protonin ympärillä. Funktion y asymptoottinen käyttäytyminen lähellä origoa ja äärettömyydessä oletetaan tunnetuksi. Nämä reunaehdot määräävät ne E:n arvot, joita vastaavat ominaisfunktiot y ovat "hyväksyttäviä" ratkaisuja, eli totettavat ehdot (i) y on jatkuva ja (ii) y' on jatkuva. Esitä tarkasti algoritmi, jolla ratkaiset tämän ominaisarvoyhtälön. *Mathematica*-ohjelmaa ei tarvitse kirjoittaa.

6. Tarkastellaan harmonisen oskillaattorin Schrödingerin yhtälöä

$$-y''(r) + \frac{1}{2} r^2 y(r) = Ey(r), \qquad 0 < r < a.$$

Approksimoimalla yhtälössä esiintyviä derivaattoja erotusosamäärillä tämä yhtälö voidaan muokata ryhmäksi lineaarisia yhtälöitä, joissa esiintyvät muuttujat $y(r_i)$, missä $\{r_i \mid i = 1, \ldots n\}$ on joukko pisteitä väliltä $[0, a]$. Tämä yhtälöryhmä voidaan kirjoittaa matriisimuodossa $MY = EY$, missä $Y = (y(r_1), \ldots, y(r_n))^T$. Selitä tarkasti, miten muodostat tämän matriisiyhtälön lähtien yo. differentiaaliyhtälöstä. Johda myös kaavat joilla approksimoit yhtälössä esiintyviä derivaattoja. Esitä lisäksi, miten ratkaiset yhtälön $MY = EY$ *Mathematicassa*.