

763315A ATK II – NUMEERINEN MALLINTAMINEN

Koe 8.6.2007

Kokeen laatija: Jussi Mattas

1. Mitä seuraavat *Mathematican* funktiot tekevät? Mitkä ovat niiden argumentit? Anna esimerkki kunkin käytöstä.

- `Table`
- `ReadList`
- `FindRoot`

2. Miten suoritat seuraavat toiminnot *Mathematicassa*?

- ratkaiset differentiaaliyhtälön $y''(x) + xy'(x) = 2y(x)$, reunaehdoilla $y(0) = 1$ ja $y'(0) = 0$
- ratkaiset matriisiyhtälön $MX = B$, missä M on n -kertaa- n -neliömatriisi, ja X ja B ovat n -alkioisia pystyvektoreita
- määrittele paloittain määritellyn funktion $f(x) = x$, kun $x < 0$ ja $f(x) = 2 - x$, kun $x \geq 0$
- lasket funktion $g(x, y)$ (i) kokonaisdifferentiaalin ja (ii) osittaisderivaatat $\frac{\partial g}{\partial x}$ ja $\frac{\partial^2 g}{\partial y^2}$
- ajat tiedostoon `nuclearstrike.m` kirjoitetut *Mathematica*-komentot, kun tiedosto sijaitsee kansiossa `C:\WORLD_DOMINATION`
- määrittele matriisiin

$$M = \begin{pmatrix} b & i & g \\ m & a & t \\ r & i & x \end{pmatrix},$$

lasket sen determinantin sekä käänteismatriisin M^{-1} ja tarkistat tuloksen laskemalla matriisitulot MM^{-1} ja $M^{-1}M$

3. Vastaa seuraaviin kysymyksiin viittaamatta *Mathematican* syntaksiin.

- Mitä tarkoittaa interpolaatio? Mitä suureita tässä toimenpiteessä oletetaan tunnetuiksi ja mitä halutaan selvittää? Anna esimerkki.
- Mitä tarkoittaa annetun funktion sovittaminen datapisteisiin? Mitä oletetaan tunnetuksi ja mitä halutaan selvittää? Anna esimerkki.

KÄÄNNÄ!

4. Tarkastellaan Schrödingerin yhtälöä

$$-y''(r) - \frac{2}{r}y(r) = Ey(r), \quad r > 0.$$

Se on differentiaaliyhtälö, jolla on ominisarvo, ja sen ratkaisuna saadaan ominisarvo E ja vastaava ominaisfunktio $y(r)$. Kvanttimekaniikassa y yhtälöllä kuvataan vetyatomia, ominisarvo E kuvaa elektronin energiaa ja ominaisfunktio 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 toteuttavat ehdot (i) y on jatkuva ja (ii) y' on jatkuva. Esitä tarkasti iteraatioon perustuva algoritmi, jolla ratkaist tämän ominisarvoyhtälön. Perustele hyvin algoritmin vaiheet. *Mathematica*-ohjelmaa ei tarvitse kirjoittaa.

5. Tarkastellaan harmonisen oskillaattorin Schrödingerin yhtälöä

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

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