763315A ATK II – NUMEERINEN MALLINTAMINEN

Koe 12.10.2007

Kokeen laatija: Jussi Mattas

Ratkaise viisi (5) tehtävää!

1. Mitä seuraavat *Mathematican* funktiot tekevät? 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
   - määrittelet 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 `ohjelma.m` kirjoitetut *Mathematica*-komennot, kun tiedosto sijaitsee kansiossa `C:\ATK2`
   - määrittelet matriisin
     $$M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix},$$
     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:
   a) Mitä tarkoittaa interpolaatio? Anna esimerkki.
   b) Mitä tarkoittaa annetun funktion sovittaminen datapisteisiin? Anna esimerkki.

KÄÄNNÄ!

4. Käyttäen vähintään yhtä *Mathematican* toistorakennetta, kirjoita ohjelma, joka tulostaa näytölle sata ensimmäistä Fibonaccin lukua *käänteisessä järjestyksessä*, ts. alkaen sadannesta ja päättyen ensimmäiseen. 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

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

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 iteraatioon perustuva algoritmi, jolla ratkaiset tämän ominaisarvoyhtälön. Perustele hyvin algoritmin vaiheet. *Mathematica*-ohjelmaa ei tarvitse kirjoittaa.

6. Tarkastellaan harmonisen oskillaattorin Schrödingerin yhtälöä

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

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*.