763315A ATK II – NUMEERINEN MALLINTAMINEN

Koe 25.1.2008

Kokeen laatija: Jussi Mattas

1. Miten suoritat seuraavat toiminnot *Mathematicassa*?
   - ratkaiset epälineaarisen differentiaaliyhtälön
   - ratkaiset lineaarisen yhtälöryhmän
   - ratkaiset ei-algebrallisen yhtälön
   - etsit funktion ääriarvon
   - luet lukupareja (x, y) tiedostosta ja hahmottelet näistä käyrän $y(x)$ kuvaajan
   - sovitat mittaustuloksiin suoran pienimmän neliösumman menetelmällä
2. Vastaa seuraaviin kysymyksiin viittaamatta *Mathematican* syntaksiin.
   - Mitä tarkoittaa interpolaatio? Jos probleema vaatii interpolaatiota, mitä dataa on käytettävissä ja mitä halutaan saada selville? Keksi jokin fysikaalinen esimerkki tilanteesta, jossa interpolaatiota tarvittaisiin.
   - Esitä eri tapoja suorittaa interpolaatio, ja pohdi niiden vahvuuksia ja heikkouksia.
3. Monesti fysikaalisia ongelmia käsiteltäessä yhtälöiden tulkinta ja/tai muodostaminen "käsiä heiluttamalla" voi olla suureksi avuksi.
   a) Tarkastellaan jonkin populaation kasvua ympäristössä, jossa kasvua rajoittavia tekijöitä ei ole. Millainen differentiaaliyhtälö kuvaa populaation koon aikakehitystä?
   b) Jos ympäristön resurssit oletetaan rajallisiksi, populaation kasvu ei voi jatkua loputtomiin. Millainen termi a-kohdan differentiaaliyhtälöön on lisättävä tämän takia?
   c) Jos saman ympäristön rajallisista resursseista kilpailee kaksi populaatiota, toisen kasvu haittaa toisen menestystä. Tällaista systeemiä kuvaa differentiaaliyhtälöpari, joka kytkee näiden populaatioiden aikakehitykset toisiinsa. Luonnostele tällainen differentiaaliyhtälöpari ja selitä jokaisen termin merkitys.
   d) Miten tutkisit c-kohdassa kuvattua ekosysteemiä Mathematican avulla?

   Perustele vastauksesi!

KÄÄNNÄ!

4. 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.

Fysikaalisilla argumenteilla voidaan perustella reunaehdot funktiolle y origossa ja äärettömyydessä. Tällainen probleema, jossa etsittävän funktion on täytettävä annetut reunaehdot kahdessa pisteessä, voidaan ratkaista siten, että luodaan kaksi yritefunktiota, joista toinen toteuttaa reunaehdot origossa ja toinen äärettömyydessä. Nämä yritefunktiot sovitetaan yhteen jossakin välipisteessä.

Esitä tarkasti yllä kuvattu algoritmi, jolla ratkaiset yo. Schrödingerin yhtälön numeerisesti. Huolehdi, että ratkaisufunktiosta tulee jatkuva ja derivoituva! Perustele hyvin algoritmin eri vaiheet. *Mathematica*-ohjelmaa ei tarvitse kirjoittaa.

5. Differentiaaliyhtälöitä voidaan joskus tutkia lineaarialgebran avulla. Seuraavassa luonnostellaan menetelmä, jolla differentiaaliyhtälö, jolla on ominaisarvo, muutetaan matriisiyhtälöksi. Olkoon f jokin yhden muuttujan reaaliarvoinen funktio, jonka käyttäytymistä halutaan tutkia pisteissä x_i, $i = 1, \ldots, n$, ts. ongelmana on selvittää $f(x_i)$, $i = 1 \ldots n$. Oletetaan, että pisteet x_i ovat tasavälein, ts. $x_{i+1} - x_i = h$ aina kun $i = 1, \ldots, n-1$.

   a) Lähtien funktion f Taylorin sarjasta

   $$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(a)}{i!}(x-a)^i,$$

   johda likimääräiset lausekkeet $f'(x_i)$:lle ja $f''(x_i)$:lle, $i = 1, \ldots n$, funktion arvojen $f(x_i)$ avulla. Reunaehtoina voit olettaa $f(x_1 - h) = f(x_n + h) = 0$.

   b) Sijoita a-kohdassa muodostamasi derivaattojen lausekkeet differentiaaliyhtälöön

   $$-f''(x) + \frac{1}{2}x^2 f'(x) = Ef(x),$$

   missä E on ominaisarvo, ja muodosta lineaarinen yhtälöryhmä (n kpl yhtälöitä) muuttujille $f(x_i)$.

   c) Miten ratkaiset b-kohdassa muodostamasi yhtälöryhmän? Miten saat tästä ratkaistusta funktion f kuvaajan? Esitä tarvittavat Mathematica-komennot ja kuvaile, mitä ne antavat tulokseksi.