

Tentti 13.05.2005

HUOM! Tähän kokeeseen osallistuva saa vapaasti käyttää apunaan haluamaansa lähdemateriaalia.

Kokeeseen osallistuvalla annetaan yksipuolinen taulukko luonnonvakioista.

VASTAA VAIN VIITEEN (5) KYSYMYKSEEN!

1. ~~1.~~ Etsi jokin uusi jakautuma yhdistelemällä luennolla esitettyjä jakautumia ja nimeä se. Paras palkitaan ylimääräisellä pisteellä. Generoi jakautumastasi 20 pseudosatunnaisluvun otos, arvioi sillä jakautuman kahta alinta momenttia ja vertaa tarkkoihin arvoihin, jos mahdollista.
2. ~~2.~~ Simuloitaessa NVT-joukkoa (ensemble) Metropolis-algoritilla on systeemin potentiaalienergiaa kasvattavalla askeleella edellinen konfiguraatio "laskettava" uudeksi konfiguraatioksi, jos potentiaalienergiaa kasvattavaa konfiguraatiota ei hyväksytä uudeksi (kun $\xi < e^{-\Delta V/kT}$). Osoita, että mikäli näin ei tehtäisi, mikroskooppisen tasapainon periaate ei toteutuisi.
3. Pallosymmetrisen varausjakautuman $\rho(r)$ potentiaali $V(r)$ halutaan määrittää numeerisesti "finite difference"- eli erotusosamäärämenetelmällä. Kirjoita ratkaistava differentiaaliyhtälö tai laskettava integraali ja esitä kuinka siitä määritetään potentiaali $V(r)$ erotusosamäärämenetelmällä, kun $\rho(r)$ on kaikkialla jatkuva ja ainakin kahdesti derivoituva.
4. ~~4.~~ Laske vetymolekyylin orientaatioparametri z -akselin suhteen, kun molekyylin liike on rajoittunut vapaaseen pyörimiseen xy -tasossa, xz -tasossa tai yz -tasossa.
5. Selitä, miten eroavat toisistaan
 - a) elektronirakenteen semiempiirinen ja "first principles"-laskumenetelmä, sekä
 - b) voimakenttiin perustuva ja *ab initio*-molekyylidynamiikka.
 - c) Selitä, kuinka semiempiiristä elektronirakennelaskumenetelmää voitaisiin käyttää molekyylidynamiikan simuloinnissa.
6. *Ab initio* -molekyylidynamiikka. Selitä Car-Parrinello-menetelmän perusaprosimaatiot ja pääpiirteet, erityisesti potentiaalienergiahyperpinta, simuloinnin dynaamiset muuttujat ja ortogonaalisuusehdon soveltaminen.
7. ~~7.~~ Hiilimonoksidi CO hapettuu katalyyttisesti hiilidioksidiksi CO₂ eräällä puolijohdepinnalla seuraavalla tavalla. O₂-molekyylit dissosioituvat adsorboituessaan pinnalle ja CO-molekyylit hapettuvat hiilidioksidiksi vain osuessaan pinnalla olevaan happiatomiin. Oletetaan, että CO ei adsorboidu pinnalle ja CO₂ desorboituu pinnalta välittömästi. Kehittele soluautomaattia, jolla voit simuloida edellä kuvattua pintareaktiota.
8. Tarkastele monimuuttujafunktion $f(\mathbf{x})$: $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ optimointia. Valitse kaksi luennolla esitettyä optimointimenetelmää ja esitä kuinka niitä käyttäen kyseinen optimointitehtävä ratkaistaan. Vertaile menetelmien soveltuvuutta tähän tehtävään.