

2020 -2021 GÜZ DÖNEMİ
HBM 801 – TBY Final

İsim Soyad:

Öğrenci No:

Soru 1:

Belirli integral, iki sınır noktası arasındaki bir eğrinin altında (x eksenine ile arasında) kalan alan olarak tanımlanabilir. Simpson 1/3 yöntemi verilen fonksiyonun belirli integralini bulan bir sayısal integrasyon yöntemidir. Bu yöntem $x = a$ ve $x = b$ gibi iki sınır noktası arasında kalan bölgeyi eşit aralıklı parçalara ayırarak (N adet) bu alanların toplanması yoluyla sayısal integrale yakınsar. N sayısı büyüdükçe bu alanların toplamı integral değerini daha doğru şekilde ifade etmeye başlar.

Aşağıda yöntem hakkında verilen bilgileri kullanarak, $f(x) = e^x$ fonksiyonunun sayısal integralini $a = 0.0$ ve $b = 1.0$ sınır noktaları aralığında 10^{-10} hata payı ile yakınsayacak şekilde hesaplayınız.

(Programınızı gerçek alanı ve hesaplanan alanı kıyaslayarak, bu iki değer arasındaki farkın verilen hata payından daha düşük olacağı N değerine kadar devam edecek şekilde tasarladığınız beklenmektedir.)

Simpson 1/3 kuralı

h aralığının değeri ve verilen $[a, b]$ aralığında fonksiyonun integral değeri aşağıdaki gibi hesaplanabilir.

$$h = (b - a)/N$$

$$\int_a^b f(x) = \frac{h}{3} \left(f(a) + 4 * \sum_{i=1,3,5,...}^{N-1} f(a + i * h) + 2 * \sum_{j=2,4,6,...}^{N-2} f(a + j * h) + f(b) \right)$$

(a) (40 puan) Octave programı yazınız.

(N sayısına küçük bir değer verilerek başlanıp, istenilen hata payı ile integralin değerine ulaşılan kadar N sayısı artırılabilir.)

(b) (5 puan) Kullanılan N sayılarına karşılık gelen hata değerlerini Gnuplot ile görselleştiriniz.

Soru 2: (40 puan)

- Verilen 4 adet xyz uzantılı dosyanın (str1.xyz, str2.xyz, str3.xyz, str4.xyz olarak isimlendirilmiş) her birini okuyacak ve bu xyz dosyalarından ilgili yapıların X, Y ve Z koordinat değerlerini alacak,
- Yapıdaki her atom için elde ettiği bu koordinat değerlerini kullanarak her atomun aynı xyz dosyasındaki diğer tüm atomlar ile uzaklıklarını bulacak (bu işlemi 4 yapı için de gerçekleştirecek),
- Son olarak da her yapı için elde ettiği uzaklık değerlerini (listeler veya matrisler yardımı ile tutulabilir) diğer üç yapı ile kıyaslayarak bu dört yapıdan hangilerinin benzer yapılar olduğunu ekrana yazdıracak (Örneğin; birinci yapı (str1.xyz) diğer üç yapı (str2.xyz, str3.xyz, str4.xyz) ile kıyaslanacak)

Bir Python programı yazınız.

İki atom arasındaki uzaklığı bulabilmek için aşağıdaki formül kullanılabilir.

$$D((x_1, y_1, z_1), (x_2, y_2, z_2)) = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}$$

Farklı yapıların Atom-Atom uzaklıkları kıyaslanırken bulunan uzaklık listelerindeki değerler eleman eleman birbirinden çıkartılarak bir liste elde edilebilir ve son olarak listedeki tüm değerlerin 10^{-2} olarak belirleyeceğiniz tolerans değerinden küçük olduğu kontrol edilir. Bu şartı sağlayan yapılar benzer yapılar olarak belirlenir.

Soru 3 (15 puan):

Verilen xyz uzantılı (old.xyz isimli) dosyada

İlk satır bu xyz dosyasında verilen yapının atom sayısını (N) vermektedir.

İkinci satır yorum satırı olup bu yapı hakkında çeşitli bilgiler içermektedir.

Daha sonraki N satır atomların sembollerini ve koordinatlarını (sırasıyla 1. 2. 3. ve 4. sütunlar Sembol, X koord., Y koord., Z koord.) vermektedir.

Verilen xyz uzantılı dosyadaki yapıyı y-ekseninde 10.0 angstrom öteleyerek, ötelenmiş yapıyı new.xyz ismini vererek (birinci ve ikinci satırları kaybetmeden) kaydeden bir kabuk betiği (shell script) yazınız.

Not: Soruların cevaplarını isimsoyad_final isimli bir dizin altında toplayınız. Cevap dosyalarını yaratırken aşağıdaki örnekteki isimlendirmeyi kullanınız:

Soru1a.m Soru1b.gnu Soru2.py Soru3.sh

Sınav sonunda cevaplarınızı içeren dizini aşağıdaki şekilde paketleyip sıkıştırarak adem.tekin@itu.edu.tr, gozdeinis90@gmail.com, sametdemir@gmail.com adreslerine mail olarak gönderiniz.

tar -zcvf isimsoyad_final.tgz isimsoyad_final