

Tecniche di Programmazione in Chimica Computazionale AA 2018/2019

Esame 23/9/19

1) Leggere da input due interi positivi n e m (con $m > n$), e due reali positivi (in doppia precisione) σ e μ ;

2) Definire una matrice $A(n \times n)$ il cui elemento (i,j) è dato da $1/\sqrt{2\pi\sigma^2} \exp(-(i+j-\mu)^2/(2\sigma^2))$ e una matrice $B(m \times m)$ il cui elemento (i,j) è dato da $1/\sqrt{2\pi\sigma^2} \exp(-(i+j)^2/(2\sigma^2))$;

3) Costruire una matrice $C(n \times n)$ il cui elemento (i,j) sia dato dalla somma tra l'elemento (i,j) di A , l'elemento (i,j) di B e la somma di tutti gli elementi (k,l) di B con k e/o l maggiori di n . Se il valore della somma degli elementi diagonali di C è maggiore di 0.5, calcolare l'integrale I della funzione

$$f(x) = 1/\sqrt{2\pi\sigma^2} \exp(-x^2/(2\sigma^2))$$

con metodo a piacere, nell'intervallo $[-R,R]$, con R reale in doppia precisione letto da input (usare un numero s di punti discreti per l'integrazione tale per cui $|I(S_{new}) - I(S_{old})| < 10^{-6}$);

4) Leggere da file un array di n elementi reali (in doppia precisione). Calcolare il prodotto scalare tra la diagonale della matrice C e il vettore appena letto. Sommare il risultato ottenuto ai primi n elementi diagonali di B , prenderne l'intero più grande più vicino, sottrarre il valore dell'indice i (corrispondente alla posizione dell'elemento) e definire così un vettore d ;

5) Ordinare in senso crescente gli elementi in posizione dispari del vettore d ;

6) Stampare le matrici A , B e C , l'integrale I (solo se la condizione al punto 3) è soddisfatta) e il vettore d (ordinato) in files differenti, con formato a piacere.