

Tecniche di Programmazione in Chimica Computazionale
AA 2018/2019

Esame 22/1/20

- 1) Leggere da input un numero reale in doppia precisione $R > 3$;
- 2) Calcolare l'integrale I della funzione

$$f(x) = x^2 + x - 5,$$

nell'intervallo $[0, R]$, con metodo piacere. Stampare a video il numero n di punti necessari per avere un errore minore di 10^{-4} rispetto al valore numericamente esatto dell'integrale;

- 3) Definire un vettore b di lunghezza $\text{int}(I)$, i cui elementi sono dati $f(\text{sqrt}(i))$, con $i=1, \dots, \text{int}(I)$ l'indice del vettore. Se I è maggiore di R , calcolare la norma di b usando una subroutine; altrimenti, costruire un vettore c con solo i valori positivi di b , e calcolarne la norma usando una funzione. In entrambi i casi, stampare a video il risultato ottenuto;
- 4) Costruire una lista contenente il valore di I , la norma di b (o c) ed il valore di R^2 e stamparla in un file;
- 5) Definire una matrice A ($n \times n$) di elementi interi, con n la parte intera di R ; l'elemento A_{ij} sia dato dalla parte intera del rapporto $I/[2(i+j)]$. Calcolare la differenza tra il valore massimo e quello minimo di A , chiamata d : se $d > 4R$, ordinare le colonne di A in posizione dispari secondo un ordine decrescente; altrimenti, ordinare le righe di A in posizione pari secondo un ordine decrescente;
- 6) Stampare su file la matrice A modificata ed il vettore b con formato a piacere.