

Tecniche di Programmazione in Chimica Computazionale

AA 2022/2023

Esame 28/6/23

1. Read from input three real numbers a and b , with $a < b$, and eps ;
2. Compute the approximate value of the integral V of $f(x) = x^3 - x^2 + 1$ from a to b , using the proper number of points, such that $abs(V - E)$, where E is the exact value of the integral (use at most 8 decimal digits), is smaller than eps ;
3. If $V > 0$, create a two-dimensional array $M(n \times n)$, with $n = abs(int(b)) + 3$ and the element M_{ij} equal to $exp[-i]cos(j*i)$. Otherwise, create a one-dimensional array c , whose number of elements is the number of points used to compute V . The element c_i of the array is given by $V*i^2/(i+1)$;
4. Print on output V , $abs(V - E)$ and the number of points needed for the integration. Also write to file the array M or c .

- 1) Leggere da input tre numeri reali a e b , con $a < b$, e eps ;
- 2) Calcolare il valore approssimato dell'integrale V di $f(x) = x^3 - x^2 + 1$ da a a b , utilizzando il numero appropriato di punti, tale che $abs(V - E)$, dove E è il valore esatto dell'integrale (usare al massimo 8 cifre decimali), sia più piccolo di eps ;
- 3) Se $V > 0$, creare un array bidimensionale $M(n \times n)$, con $n = abs(int(b)) + 3$ e l'elemento M_{ij} uguale a $exp[-i]cos(j*i)$. Altrimenti, creare un array unidimensionale c , il cui numero di elementi è il numero di punti usati per calcolare V . L'elemento c_i dell'array è dato da $V*i^2/(i+1)$;
- 4) Stampare in output V , $abs(V - E)$ e il numero di punti necessari per l'integrazione. Scrivere su file l'array M o c .

