

**Tecniche di Programmazione in Chimica Computazionale**  
**AA 2022/2023**

**Esame 13/9/23**

1. Find the root of the function  $f(x) = x^3 - x + 2$  in the interval  $[-2;1]$  using a threshold of  $10^{-5}$  and a maximum value of  $10^4$  iterations;
2. Define a double-precision one-dimensional array  $a$  with element values from -2.00 (first element) to 1.00 (last element), being the difference between adjacent element values equals to 0.05; also insert the value corresponding to the found root, named  $xroot$  (e.g., -2.00, -1.95, -1.90 ...  $xroot$  ... 1.00);
3. Sum the elements before and after  $xroot$ ; print a message on the screen if the first sum is larger than the second one, or viceversa.
4. Write to file the array  $a$ , with a given format.

1. Trovare la radice della funzione  $f(x) = x^3 - x + 2$  nell'intervallo  $[-2;1]$  utilizzando una soglia di  $10^{-5}$  ed un massimo di  $10^4$  iterazioni;
2. Definire un array unidimensionale in doppia precisione  $a$  con valori degli elementi da -2.00 (primo elemento) a 1.00 (ultimo elemento), essendo la differenza tra i valori degli elementi adiacenti pari a 0.05; inserire anche il valore corrispondente alla radice trovata, denominato  $xroot$  (es. -2.00, -1.95, -1.90 ...  $xroot$  ... 1.00);
3. Sommare gli elementi prima e dopo  $xroot$ ; stampare un messaggio sullo schermo se la prima somma è maggiore della seconda, o viceversa.
4. Scrivi nel file l'array  $a$ , con formato a piacere.