

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ

Θέματα Προόδου Θεωρίας Δεκέμβριος 2013

1. Ο πίνακας

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

έχει μία αρνητική ιδιοτιμή (και η οποία είναι διπλή). Βρείτε τη με τρία σημαντικά ψηφία σωστά.

2. Ακριβείς κβαντομηχανικοί υπολογισμοί έδωσαν τις ακόλουθες τιμές για το δυναμικό V συναρτήσει της απόστασης r μεταξύ δύο μοριακών συστημάτων (για την ακρίβεια, των CO_2 και C_6H_6):

r (Å)	V (kcal/mol)
2.8	1.403
3	-1.188
3.2	-2.470
3.4	-2.633
3.6	-2.560
3.8	-2.304
4	-1.988
4.2	-1.668
4.4	-1.374
4.6	-1.117

Επιθυμούμε να προσεγγίσουμε το πραγματικό $V(r)$ με το εμπειρικό δυναμικό Lennard-Jones:

$$V_{LJ} = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}.$$

Εφαρμόστε με κατάλληλο τρόπο τη μέθοδο ελάχιστων τετραγώνων για να υπολογίσετε τους συντελεστές A , B στο V_{LJ} .

Διάρκεια: 90 λεπτά

Καλή επιτυχία!

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ

Θέματα Προόδου Εργαστηρίου Δεκέμβριος 2013

1. Γνωρίζουμε ότι μια συνεχής συνάρτηση περνάει από τα σημεία

x	y
4.1	-3.320741
5.5	-3.903899
7.0	4.583520
7.4	6.642431

Δώστε μια εκτίμηση με 6 σημαντικά ψηφία για τη ρίζα της (αυτή που προφανώς είναι μεταξύ 5.5 και 7.0).

2. Μια άγνωστη συνάρτηση $f(x)$ περνά από τα σημεία (x_i, y_i) που δίνονται παρακάτω

x_i	y_i
1.1	2.1
1.5	2.7
1.7	2.6
2.0	2.4

Επιπλέον, η πρώτη παράγωγός της μηδενίζεται στο σημείο $x = 1.6$. Βρείτε ένα προσεγγιστικό πολυώνυμο που να ικανοποιεί αυτές τις συνθήκες και, χρησιμοποιώντας το, δώστε μια εκτίμηση για την τιμή της $f(x)$ στο $x = 1.6$.

Διάρκεια: 90 λεπτά

Καλή επιτυχία!