

Επαναληπτικές ασκήσεις για το μάθημα 'Χημεία και Πληροφορική'

1) Συμπληρώστε τον πιο κάτω πίνακα με τις σημαντικές μεθόδους σύνοψης δεδομένων NumPy.

min	Ελάχιστο
argmin	Δείκτης ελάχιστης τιμής στον πίνακα
max	Μέγιστο
argmax	Δείκτης μέγιστης τιμής στον πίνακα
sign	Πρόσημο κάθε στοιχείου (επιστρέφει -1, 0 ή +1)
sum	Άθροισμα στοιχείων πίνακα
prod	Γινόμενο στοιχείων πίνακα
mean	Μέσος όρος
average	Σταθμισμένος μέσος όρος
median	Διάμεσος μέσος όρος
std	Τυπική απόκλιση
var	Διακύμανση

2) Συμπληρώστε τον πιο κάτω πίνακα με τους τρόπους ανοίγματος αρχείων Python.

‘r’	Άνοιγμα για ανάγνωση (η προεπιλογή)
‘w’	Άνοιγμα για εγγραφή, αντικαθιστώντας το αρχείο εάν υπάρχει
‘x’	Άνοιγμα για εγγραφή, αποτυγχάνοντας εάν το αρχείο υπάρχει ήδη
‘a’	Άνοιγμα για εγγραφή, προσαρτώντας εάν το αρχείο υπάρχει
‘t’	Ανάγνωση / εγγραφή δεδομένων κειμένου (η προεπιλογή)
‘b’	Ανάγνωση / εγγραφή δυαδικών δεδομένων
‘+’	Άνοιγμα για ενημέρωση (ανάγνωση και εγγραφή)

3) Συμπληρώστε τον πιο κάτω πίνακα με τις κοινές εξαιρέσεις Python.

IndexError	Ευρετηρίαση μιας ακολουθίας (όπως μια λίστα ή μια συμβολοσειρά) με έναν δείκτη που είναι εκτός εμβέλειας
KeyError	Ευρετηρίαση ενός λεξικού με ένα κλειδί που δεν υπάρχει σε αυτό το λεξικό
NameError	Αναφορά σε ένα όνομα μεταβλητής που δεν έχει οριστεί
TypeError	Προσπάθεια χρήσης ενός αντικειμένου ακατάλληλου τύπου ως όρισμα σε μια ενσωματωμένη λειτουργία ή συνάρτηση
ValueError	Προσπάθεια χρήσης ενός αντικειμένου σωστού τύπου αλλά με μια ασύμβατη τιμή ως όρισμα σε μια ενσωματωμένη λειτουργία ή συνάρτηση
ZeroDivisionError	Προσπάθεια διαίρεσης με το μηδέν (είτε ρητά (χρησιμοποιώντας “/” ή “//”) είτε ως μέρος μιας πράξης modulo “%”)
SyntaxError	Χρήση λανθασμένης σύνταξης Python, για παράδειγμα προσπάθεια ανάθεσης μιας δεσμευμένης λέξης-κλειδί ως όνομα μεταβλητής, παράλειψη μιας κλειστής παρένθεσης ή χρήση ενός μόνο σύμβολου ισότητας, = για μια σύγκριση αντί για ==.

4) Τα μέρη του υπολογιστή μπορούν να χωριστούν σε λογισμικό (software) και υλικό (hardware). Αναφέρατε τα 5 κύρια μέρη από τα οποία αποτελείται συνήθως το υλικό (hardware) μέρος ενός υπολογιστή.

Το υλικό μέρος (hardware) αποτελείται από:

- 1) κεντρική μονάδα επεξεργασίας (central processing unit, CPU)
- 2) κεντρική μνήμη (RAM & ROM-BIOS: read only memory & basic input / output system)
- 3) μονάδες εισόδου-εξόδου (πληκτρολόγιο, ποντίκι, οθόνη, κλπ)
- 4) εσωτερικές (ή εξωτερικές) μονάδες ανάγνωσης και αποθήκευσης δεδομένων όπως σκληρός δίσκος π.χ. (solid state) drive, δισκέτα (στο παρελθόν), CD, DVD
- 5) περιφερειακές συσκευές όπως εκτυπωτής, σαρωτής, μόντεμ, κλπ

5) Αναφέρατε 5 θεωρίες και υπολογισμούς οι οποίοι αναφέρθηκαν στις διαλέξεις και σημειώσεις και μπορεί να είναι σχετικοί και χρήσιμοι στη Χημεία.

Μερικές από τις θεωρίες και υπολογισμούς οι οποίοι αναφέρθηκαν στις διαλέξεις και σημειώσεις και μπορεί να είναι σχετικοί και χρήσιμοι στη Χημεία είναι:

- 1) Η εύρεση της μοριακής γεωμετρίας (στην ισορροπία) χημικών ενώσεων. Για παράδειγμα τα μήκη δεσμών, επίπεδες γωνίες, διέδρες γωνίες, κλπ.
- 2) Απόλυτες τιμές ενέργειας της θεμελιώδους και διεγερμένων καταστάσεων χημικών ενώσεων.
- 3) Μοριακές ιδιότητες (κατανομή ηλεκτροστατικών φορτίων, διπολική ροπή, κλπ)
- 4) Υπολογισμός ενέργειας και συμμετρίας (σχήματος) μοριακών τροχιακών.
- 5) Υπολογισμός φασμάτων, για παράδειγμα φάσμα:
 - υπερύθρου (infrared, IR) στη δονητική φασματοσκοπία
 - Raman στη δονητική φασματοσκοπία
 - υπεριώδους-ορατού στην ηλεκτρονική φασματοσκοπία
 - φθορισμού στην ηλεκτρονική φασματοσκοπία
 - πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού (nuclear magnetic resonance, NMR)

6) Αναφέρατε 4 πηγές για αναζήτηση, άντληση, και επεξεργασία επιστημονικής πληροφορίας στη Χημείας οι οποίες αναφέρθηκαν στις διαλέξεις και σημειώσεις.

1) Γενικές μηχανές αναζήτησης: google (και ιδιαίτερα google scholar), Bing, ChatGPT, ...

2) Chemical abstracts (για παράδειγμα μέσω SciFinder)

3) Web of Science (μερικές φορές ονομάζεται και Web of Knowledge)

4) Scopus

7) Αναφέρατε 5 πηγές, οποίες αναφέρθηκαν στις διαλέξεις και σημειώσεις, για αναζήτηση, άντληση, και επεξεργασία επιστημονικής πληροφορίας για συγκεκριμένο ερευνητή / ερευνήτρια.

1) Google scholar

2) SciFinder

3) Scopus

4) Web of Science (μερικές φορές ονομάζεται και Web of Knowledge)

5) ORCID & PUBLONS

8) Χρησιμοποιώντας Python, ποιος είναι ο πιο σύντομος και εύκολος τρόπος να ορίσουμε το διάνυσμα (ή ισοδύναμα πίνακα-στήλη)

$$\begin{bmatrix} 11 \\ 12 \\ 13 \\ 14 \\ 15 \\ 16 \\ 17 \\ 18 \\ 19 \end{bmatrix}$$

Ο πιο σύντομος και "σωστός" τρόπος για να ορίσετε ένα διάνυσμα-στήλη στην Python είναι μέσω της βιβλιοθήκης NumPy.

Αν και μπορείτε να το κάνετε με απλές λίστες της Python, το NumPy είναι το πρότυπο για μαθηματικούς υπολογισμούς καθώς επιτρέπει πράξεις γραμμικής άλγεβρας.

```
import numpy as np
```

```
v = np.arange(11, 20)[: , None]
```

```
# Δημιουργεί το [11, 12, ..., 19] και το μετατρέπει σε στήλη
```

```
# Το np.arange(11, 20) δημιουργεί τους αριθμούς από το 11 έως το 19.
```

```
# Το [: , None] λέει στο NumPy: "κράτα όλα τα στοιχεία στην πρώτη διάσταση
```

```
# και πρόσθεσε μια δεύτερη διάσταση (στήλη)".
```

```
print(v)
```


9) Γράψτε κώδικα σε Python να κάνει τον υπολογισμό:

$$2 \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{bmatrix} + 3 \cdot \begin{bmatrix} 5 \\ 4 \\ 3 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \\ 6 \\ 8 \\ 10 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 15 \\ 12 \\ 9 \\ 6 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 17 \\ 16 \\ 15 \\ 14 \\ 13 \end{bmatrix}$$

```
a = np.array([[1, 2, 3, 4, 5]]).T
```

```
b = np.array([[5, 4, 3, 2, 1]]).T
```

```
# Η πράξη
```

```
result = 2*a + 3*b
```

```
print(result)
```

10) Γράψτε κώδικα σε Python να κάνει τον πολλαπλασιασμό κατά στοιχεία (element-wise multiplication ή Hadamard product).

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix} \circ \begin{bmatrix} 12 \\ 6 \\ 4 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \cdot 12 \\ 2 \cdot 6 \\ 3 \cdot 4 \\ 4 \cdot 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12 \\ 12 \\ 12 \\ 12 \end{bmatrix}$$

```
import numpy as np

# Ορισμός των διανυσμάτων ως στήλες (2D arrays)
a = np.array([[1, 2, 3, 4]]).T
b = np.array([[12, 6, 4, 3]]).T

# Πολλαπλασιασμός κατά στοιχεία (αντίστοιχο του .*)
result = a * b

print(result)
```

11) Να γραφτεί πρόγραμμα σε Python που να υπολογίζει τη γωνία (σε μοίρες) ανάμεσα στο μοναδιαίο διανύσμα κατά μήκος του άξονα των x και του μοναδιαίου διανύσματος κατά μήκος του άξονα των y .

1. Ορισμός των μοναδιαίων διανυσμάτων (Unit Vectors)

$\hat{i}$: μοναδιαίο στον άξονα x , $\hat{j}$: μοναδιαίο στον άξονα y

```
 $\hat{i}$  = np.array([1, 0])
```

```
 $\hat{j}$  = np.array([0, 1])
```

2. Υπολογισμός εσωτερικού γινομένου (Dot Product)

```
dot_product = np.dot( $\hat{i}$ ,  $\hat{j}$ )
```

3. Υπολογισμός της γωνίας σε ακτίνια (radians)

```
angle_rad = np.arccos(dot_product)
```

4. Μετατροπή σε μοίρες

```
angle_deg = np.degrees(angle_rad)
```

```
print(f'Η γωνία μεταξύ των αξόνων  $x$  και  $y$  είναι: {angle_deg} μοίρες')
```

12) Να περιγραφεί η μέθοδος της διχοτόμησης

Η μέθοδος της διχοτόμησης είναι μια αριθμητική τεχνική που χρησιμοποιείται για την εύρεση ριζών μιας συνεχούς συνάρτησης $f(x)$ μέσα σε ένα συγκεκριμένο διάστημα $[a,b]$, όπου $f(a)$ και $f(b)$ έχουν αντίθετα πρόσημα. Βασίζεται στο Θεώρημα Ενδιάμεσης Τιμής, το οποίο εγγυάται ότι υπάρχει ρίζα στο διάστημα αν η συνάρτηση είναι συνεχής. Η μέθοδος διαιρεί επανειλημμένα το διάστημα στη μέση, αξιολογώντας τη συνάρτηση $f(c)$ στο μέσο $c=(a+b)/2$. Αν $f(c)=0$, τότε το c είναι η ρίζα· διαφορετικά, το διάστημα ενημερώνεται σε $[a,c]$ ή $[c,b]$ ανάλογα με το πρόσημο του $f(c)$. Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται έως ότου το διάστημα γίνει αρκετά μικρό ή η ρίζα προσεγγιστεί με την επιθυμητή ακρίβεια.

13) Να περιγραφεί η μέθοδος Newton

Η μέθοδος του Νεύτωνα, ή μέθοδος Newton-Raphson, είναι μια επαναληπτική αριθμητική τεχνική που χρησιμοποιείται για την προσέγγιση των ριζών μιας πραγματικής συνάρτησης $f(x)$. Ξεκινώντας από μια αρχική εκτίμηση x_0 , η μέθοδος βελτιώνει την προσέγγιση χρησιμοποιώντας τον τύπο:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

όπου $f'(x_n)$ είναι η παράγωγος της $f(x)$. Σε κάθε βήμα, η μέθοδος χρησιμοποιεί την εφαπτομένη στη θέση x_n για να προσεγγίσει τη ρίζα. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι η διαφορά μεταξύ διαδοχικών προσεγγίσεων να είναι εντός μιας καθορισμένης ανοχής ή μέχρι η τιμή της συνάρτησης $f(x_n)$ να πλησιάσει αρκετά το μηδέν. Αν και η μέθοδος του Νεύτωνα συγκλίνει γρήγορα όταν η αρχική εκτίμηση είναι κοντά στη ρίζα και $f'(x) \neq 0$, ενδέχεται να αποτύχει ή να αποκλίνει αν η παράγωγος είναι μηδέν ή αν η συνάρτηση έχει κακή συμπεριφορά. Είναι ιδιαίτερα διαδεδομένη λόγω της τετραγωνικής σύγκλισής της κοντά σε απλές ρίζες.

14) Να γραφτεί πρόγραμμα (script) στο MATLAB που να υπολογίζει τη diedρη γωνία μεταξύ 4 σημείων: (0,-1,0), (0,0,0), (1,0,0), και (1,1,0). Τι θα γίνει αν το τελευταίο σημείο από (1,1,0), γίνει (1,-1,0);

```
import numpy as np
def calculate_dihedral(p1, p2, p3, p4):
# Μετατροπή σε numpy arrays
p1, p2, p3, p4 = np.array(p1), np.array(p2), np.array(p3), np.array(p4)

# Διανύσματα μεταξύ των σημείων
b1 = p2 - p1
b2 = p3 - p2
b3 = p4 - p3

# Κάθετα διανύσματα στα δύο επίπεδα (Normals)
n1 = np.cross(b1, b2)
n2 = np.cross(b2, b3)

# Κανονικοποίηση (normalization) των καθέτων
n1 /= np.linalg.norm(n1)
n2 /= np.linalg.norm(n2)

# Υπολογισμός του συνημιτόνου της γωνίας (εσωτερικό γινόμενο)
cosine = np.dot(n1, n2)

# Περιορισμός τιμών λόγω πιθανών σφαλμάτων στρογγυλοποίησης [-1, 1]
cosine = np.clip(cosine, -1.0, 1.0)

# Γωνία σε μοίρες
angle = np.degrees(np.arccos(cosine))

return angle
# Αρχικά σημεία
P1, P2, P3, P4 = (0,-1,0), (0,0,0), (1,0,0), (1,1,0)
angle = calculate_dihedral(P1, P2, P3, P4)
print(f'Η diedρη γωνία είναι: {angle:.1f}°')
```

Στην 1^η περίπτωση έχουμε: Η diedρη γωνία είναι 180.00 degrees

Τα σημεία σχηματίζουν ένα 'σκέλος' ή 'βραχίονα' (περιστρεφόμενα τμήματα γραμμών γύρω από ένα κεντρικό άξονα, όπου κάθε σκέλος συνδέεται σε ορθές γωνίες).

Στη 2^η περίπτωση έχουμε: Η diedρη γωνία είναι 0.00 degrees

Τα σημεία σχηματίζουν το επίπεδο σύμβολο Π

15) Να περιγραφεί ο κανόνας Simpson 1/3 για αριθμητική ολοκλήρωση

Ο κανόνας Simpson είναι πιο ακριβής προσέγγιση από τον κανόνα του τραπεζοειδούς επειδή χρησιμοποιεί παραβολικά (πολυωνμικά) τμήματα αντί για γραμμές για να προσεγγίσει την καμπύλη. Υπάρχουν δύο κύριες μορφές του κανόνα, το 1/3 και το 3/8.

Η πιο συνηθέστερη μορφή είναι το 1/3 και αυτή θα περιγραφεί πιο κάτω.

Η μέθοδος αυτή χρειάζεται να μπορεί να χωριστεί η περιοχή ολοκλήρωσης $[a, b]$ σε άρτιο αριθμό n υποπεριοχών

$$h = \frac{b - a}{n}$$

Ο κανόνας 1/3 προσεγγίζει το ολοκλήρωμα ως:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3} \left[f(a) + 4 \sum_{i=1, \text{περιττός}}^{n-1} f(x_i) + 2 \sum_{i=2, \text{άρτιος}}^{n-2} f(x_i) + f(b) \right]$$

όπου $x_i = a + i \cdot h$

16) Να περιγραφεί η μέθοδος Monte Carlo για αριθμητική ολοκλήρωση

Η μέθοδος Monte Carlo είναι μια πιθανοτική τεχνική που χρησιμοποιείται για την προσέγγιση της τιμής ορισμένων ολοκληρωμάτων, ειδικά όταν η συνάρτηση είναι πολύπλοκη ή όταν η αναλυτική ολοκλήρωση είναι δύσκολη. Χρησιμοποιείται ευρέως σε τομείς όπως η φυσική, τα οικονομικά και η μηχανική λόγω της απλότητάς της και της αποτελεσματικότητάς της σε προβλήματα υψηλής διάστασης.

Η μέθοδος Monte Carlo για ολοκλήρωση βασίζεται στη χρήση τυχαίων δειγμάτων. Για την εκτίμηση του ολοκληρώματος μιας συνάρτησης $f(x)$ στο διάστημα $[a, b]$, η ιδέα είναι να αντιμετωπίσουμε το ορισμένο ολοκλήρωμα ως πρόβλημα μέσης τιμής. Μαθηματικά, το ορισμένο ολοκλήρωμα

$$I = \int_a^b f(x)dx$$

μπορεί να προσεγγιστεί με τη λήψη του μέσου όρου των τιμών της $f(x)$ σε τυχαία επιλεγμένα σημεία στο $[a, b]$.

Βήματα υλοποίησης της μεθόδου Monte Carlo

1. Δημιουργία τυχαίων σημείων: επιλέξτε τυχαία n σημεία $x_1, x_2, \dots, x_n$ ομοιόμορφα κατανομημένα στο διάστημα $[a, b]$.
2. Υπολογισμός της συνάρτησης: υπολογίστε $f(x_i)$ για κάθε τυχαίο σημείο x_i .
3. Υπολογισμός του Μέσου Όρου: Βρείτε τη μέση τιμή των $f(x_i)$ για όλα τα δείγματα:

$$\text{Μέσος Όρος} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i)$$

4. Εκτίμηση του ολοκληρώματος: πολλαπλασιάστε τη μέση τιμή με το μήκος του διαστήματος $(b-a)$ για να πάρετε την προσέγγιση:

$$I \approx (b - a) \times \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i)$$

17) Να περιγραφεί η μέθοδος παρεμβολής Lagrange

Η μέθοδος εισαγωγής Lagrange είναι ένας τρόπος για να εκτιμήσουμε την τιμή μιας συνάρτησης σε ένα σημείο που βρίσκεται μεταξύ γνωστών δεδομένων. Χρησιμοποιείται για να δημιουργήσουμε ένα πολυώνυμο που περνά ακριβώς από όλα τα δεδομένα που έχουμε. Η βασική ιδέα είναι να βρούμε ένα πολυώνυμο που ταιριάζει ακριβώς με τα δεδομένα.

Περιγραφή της μεθόδου

Έχουμε ένα σύνολο από σημεία - ας πάρουμε μόνον δύο για απλούστευση: $(x_0, y_0) = (1, 2)$ και $(x_1, y_1) = (3, 4)$.

Για κάθε σημείο δεδομένων, δημιουργούμε ένα πολυώνυμο βάσης Lagrange

$$L_i(x) = \prod_{\substack{0 \leq j \leq n \\ j \neq i}} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

$$L_0(x) = \frac{x-3}{1-3} = \frac{x-3}{-2}$$

$$L_1(x) = \frac{x-1}{3-1} = \frac{x-1}{2}$$

$$(x_0, y_0) = (1, 2) \text{ και } (x_1, y_1) = (3, 4).$$

$$L_0(x) = \frac{x-3}{1-3} = \frac{x-3}{-2}, L_1(x) = \frac{x-1}{3-1} = \frac{x-1}{2}$$

Τώρα, το πολυώνυμο εισαγωγής είναι:

$$P(x) = y_0 L_0(x) + y_1 L_1(x) = 2 \frac{x-3}{-2} + 4 \frac{x-1}{2} = -(x-3) + 2(x-1)$$

Αυτό είναι το πολυώνυμο που περνά από τα σημεία $(1, 2)$ και $(3, 4)$.

Σύνοψη:

Η μέθοδος παρεμβολής Lagrange μας βοηθά να βρούμε ένα πολυώνυμο που περνά από δεδομένα σημεία. Είναι απλή και δεν απαιτεί επίλυση συστημάτων εξισώσεων, κάτι που την καθιστά εύκολη στην εφαρμογή για μικρά σύνολα δεδομένων. Μειονέκτημα είναι ότι για μεγάλο αριθμό δεδομένων, το προκύπτον πολυώνυμο μπορεί να γίνει πολύπλοκο και μπορεί να υπάρχουν ζητήματα αριθμητικής σταθερότητας.

18) Να περιγραφεί η μέθοδος Euler για επίλυση διαφορικών εξισώσεων

Η μέθοδος Euler είναι μία από τις απλούστερες αριθμητικές τεχνικές για την επίλυση συνήθων διαφορικών εξισώσεων (ordinary differential equations, ODEs) της μορφής:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$

όπου y είναι μια συνάρτηση του x , και $f(x, y)$ περιγράφει πώς αλλάζει το y ως προς το x

Περιγραφή της μεθόδου

1. **Αρχική Συνθήκη:** Ξεκινάμε από ένα γνωστό σημείο (x_0, y_0) , που αντιπροσωπεύει την αρχική τιμή του y στο x_0 .
2. **Μέγεθος Βήματος:** Επιλέγουμε ένα μικρό μέγεθος βήματος h , που καθορίζει πόσο μακριά κινούμαστε στην κατεύθυνση του x σε κάθε βήμα. Όσο μικρότερο είναι το h , τόσο πιο ακριβής είναι η μέθοδος, αλλά απαιτούνται περισσότερα βήματα για να φτάσουμε στο επιθυμητό σημείο.
3. **Τύπος Ενημέρωσης:** Χρησιμοποιώντας την κλίση που δίνεται από το $f(x, y)$, εκτιμούμε την τιμή του y στο επόμενο σημείο (x_1, y_1) χρησιμοποιώντας τον τύπο:

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot f(x_n, y_n)$$

Εδώ, το y_n είναι η τρέχουσα τιμή, και το $f(x_n, y_n)$ δίνει την κλίση στο σημείο (x_n, y_n) . Στη συνέχεια, επαναλαμβάνουμε αυτή τη διαδικασία για να πάρουμε τις επόμενες τιμές.

19) Πόσα μόρια νερού υπάρχουν σε ένα ποτήρι νερό 250 mL; Πάρτε την πυκνότητα, $\rho(\text{H}_2\text{O}(\text{l})) = 1 \text{ g cm}^{-3}$ και τη μοριακή μάζα, $M(\text{H}_2\text{O}) = 18 \text{ g mol}^{-1}$.

Δείτε την απάντηση στο βιβλίο, Π2.1, σελ. 25

20)

Η ταχύτητα του ήχου σε ένα αέριο μοριακής μάζας M σε θερμοκρασία T είναι

$$c = \sqrt{\frac{\gamma RT}{M}},$$

όπου R είναι η σταθερά των αερίων και για τον αέρα ο αδιαβατικός δείκτης, $\gamma = \frac{7}{5}$. Υπολογίστε την ταχύτητα του ήχου στον αέρα σε (α) $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ και (β) $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$. Πάρτε $M = 29\text{ g mol}^{-1}$.

Δείτε την απάντηση στο βιβλίο, Π2.2, σελ. 26

21)

Π4.2

Ερώτηση

Υπολογίστε τη μέση μοριακή μάζα του ξηρού αέρα, δεδομένης της σύνθεσης και των μαζών που αναφέρονται στον Πίνακα 4.1:

Πίνακας 4.1: Η σύνθεση του ξηρού αέρα

Μόριο	Μάζα /Da	Σύνθεση /%
N ₂	28.0134	78.084
O ₂	31.9898	20.946
Ar	39.948	0.9290
CO ₂	44.0095	0.041

Δείτε την απάντηση στο βιβλίο, Π4.2, σελ. 49

22)

Π6.1

Ερώτηση

Το μοντέλο του Einstein για τη θερμοχωρητικότητα ενός κρυστάλλου είναι:

$$C_{V,m} = 3R \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)^2 \frac{\exp \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)}{\left[\exp \left(\frac{\Theta_E}{T} \right) - 1 \right]^2},$$

όπου η θερμοκρασία Einstein, Θ_E , είναι μια σταθερά για ένα δεδομένο υλικό.

Γράψτε μια συνάρτηση Python για να υπολογίσετε το $C_{V,m}$ στους 300 K για (α) νάτριο ($\Theta_E = 192$ K) και (β) διαμάντι ($\Theta_E = 1450$ K).

Δείτε την απάντηση στο βιβλίο, Π6.1, σελ. 74

23)

Η κύρια συνάρτηση για την ανάγνωση αρχείων κειμένου σε έναν πίνακα NumPy είναι η `genfromtxt`. Η λίστα των παραμέτρων κλήσης για την `np.genfromtxt` είναι αρκετά εκτενής, αλλά τα πιο σημαντικά ορίσματα και οι προεπιλογές τους περιγράφονται εδώ:

```
np.genfromtxt(fname, dtype=float, comments='#', delimiter=None,
               skip_header=0, skip_footer=0, converters=None,
               missing_values=None, filling_values=None, usecols=None,
               unpack=False, invalid_raise=True, max_rows=None)
```

Εξηγήστε τι είναι, εν γένει, τα ορίσματα:

- 1) `fname`
- 2) `dtype`
- 3) `comments`
- 4) `delimiter`
- 5) `skip_header`
- 6) `skip_footer`
- 7) `missing_values`
- 8) `filling_values`
- 9) `converters`
- 10) `usecols`
- 11) `unpack`
- 12) `invalid_raise`
- 13) `max_rows`

Δείτε την απάντηση στο βιβλίο, 9.6, σελίδες 105-106

24) Χρησιμοποιώντας LaTeX, φτιάξτε τους πιο κάτω πίνακες

$$\begin{matrix} -1 & 0 & 2 \\ x & y & z \end{matrix}$$

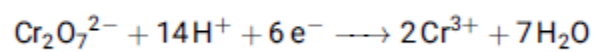
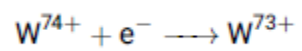
$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 2 \\ x & y & z \end{pmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 2 \\ x & y & z \end{bmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} -1 & 0 & 2 \\ x & y & z \end{vmatrix}$$

Δείτε την απάντηση στο βιβλίο, Πίνακα 14.5, σελ. 156

25) Χρησιμοποιώντας το πακέτο mhchem, γράψτε τις ακόλουθες εξισώσεις:



Δείτε την απάντηση στο βιβλίο, σελίδες 160-161

26) Χρησιμοποιήστε το Απλοποιημένο Σύστημα Εισόδου Μοριακών Δεδομένων (Simplified Molecular-Input Line-Entry System, SMILES) για:

- 1) το μοριακό άζωτο
- 2) το διοξείδιο του άνθρακα
- 3) ισοπροπανόλη
- 4) ακετόνη
- 5) κυκλοεξάνιο

Δείτε την απάντηση στο βιβλίο, σελίδες 166-167