TENTAMEN Moleculaire Modellering & Wiskunde (wiskundegedeelte) *Vrijdag 4 februari 2011*

1. Schrijf je naam, voorletters en studentennummer op elk vel papier.
2. Nummer alle pagina's.
3. *Geef niet alleen antwoorden, maar laat ook zien* **hoe** *je eraan gekomen bent.*
4. Het gebruik van het boek van Steiner en de handout is wel toegestaan, echter **niet**: aantekeningen en uitwerkingen van opgaven!
5. Rekenmachientjes mogen wel worden gebruikt, maar laptops **niet**.

SUCCES!

Opgave 1 *(max. 20 punten)*

Beschouw de energiefunctie $\mathcal{E} = x^3 + y^3 - 3xy + 14\pi$.

(a) Bereken $\nabla\mathcal{E}$, $\Delta\mathcal{E}$ en $\frac{\partial^2\mathcal{E}}{\partial x \partial y}$.

(b) Wat zijn de stationaire punten van $\mathcal{E}$?

(c) Bepaal de aard (minimum, maximum of zadelpunt) van deze stationaire punten.

Opgave 2 *(max. 15 punten)*

Gegeven is de functie $f(x) = \mathrm{e}^{-x}\ \sin(\pi x)$.

(a) Geef de Taylorbenadering van f (t/m x^3) rond het punt 0.

(b) Bepaal m.b.v. onderdeel (a) de limiet: $\lim_{x\to 0} \frac{f(x)-\pi x}{x^2}$.

Opgave 3 *(max. 15 punten)*

Bereken

$$\int_{-1}^{1}\int_{0}^{z}\int_{x-z}^{x+z} f(x,y,z)\ dydxdz,$$

waarbij $f = \nabla \cdot \vec{F}$ met

$$\vec{F} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}x^2 - \cos(y) + \sinh(z) \\ \sin(x) + \frac{1}{2}y^2 + \tan(z) \\ \mathrm{e}^{-x} + \log(y) + \frac{1}{2}z^2 + \pi \end{pmatrix}.$$

Opgave 4 *(max. 15 punten)*

Beschouw de differentiaalvergelijking $y'(x) = -\pi\ y(x)$ met beginwaarde $y(0) = 1$.

(a) Bepaal $h(n)$ in de recursierelatie $c_{n+1} = h(n)\ c_n$, indien we aannemen dat de oplossing van de volgende vorm is: $y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n$.

(b) Bepaal de coëfficiënten c_n. Welke waarde heeft c_0?

Opgave 5 *(max. 15 punten)*

Voor welke waarden van de parameter $c \in \mathbb{R}$ is de functie $u(x,t) = (1-\mathrm{e}^{-t}) \sin(\pi x)$ oplossing is van de inhomogene warmtevergelijking:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + [(1-\pi^2)\mathrm{e}^{-t} + c] \sin(\pi x)$$

met bijbehorende beginvoorwaarde $u(x,0) = \sin(\pi x)$ en randvoorwaarden $u(0,t) = u(1,t) = 0$.

Opgave 6 *(max. 10 punten)*

Bepaal voor $\gamma = \pi$ de oplossing $y(x)$ van de gewone differentiaalvergelijking

$$y'' - \gamma\ y' + \pi^2 y = 0,$$

met randvoorwaarden $y(0) = 0,\ y(1) = 1$. Voor welke waarde(n) van $\gamma \in \mathbb{R}$ zijn er periodieke oplossingen?

Opgave 7 *(max. 10 punten)*

Beschouw de periodieke functie $f(t) = t^2 + t$ voor $0 < t < 2\pi$ met periode 2π, d.w.z. $f(t + 2\pi) = f(t)$ voor $t \in (-\infty, \infty)$. We bekijken de Fourierreeks van f:

$$f(t) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cos(nt) + b_n \sin(nt)].$$

(a) Schets de functie $f(t)$ voor $t \in [-3\pi, 3\pi]$.

(b) Bepaal de coëfficiënt a_0 uit de Fourierreeks van f.