



주의

- B123456은 학번을 뜻하므로 모든 B123456은 자신의 학번으로 바꾸시오.
- 파이선 파일을 만들었으면, (부)문제에서 지정한 파일 이름에 맞춰 제출하시오.
- 모든 .py 파일의 마지막에는 `input('Press Enter')` 줄을 더하시오.
- 엑셀은 B123456hw20.xlsx 하나에 (부)문제에서 지정한 워크시트를 순서대로 만들어 제출하시오.
- 각 문제 12점. 문제별 부문제는 따로 정하지 않았으면 동일 배점.
- 풀이의 타당성과 설득력 > 답의 정확성

2.1 10개의 미지수를 갖는 선형 방정식 $\vec{A}\vec{x} = \vec{b}$ 의 \vec{A} 와 \vec{b} 가 B123456hw20.xlsx의 워크시트 hw21에 들어있다.

- 엑셀의 MINVERSE() 함수를 이용하여 \vec{x} 를 구하고 M열의 3행부터 저장하시오. (워크시트 hw21)
- 엑셀의 해 찾기 추가 기능을 이용하여 \vec{x} 를 구하고 N열의 3행부터 저장하시오. (워크시트 hw21)
 - 해법은 단순 LP를 선택하시오.
- numpy.linalg.solve로 \vec{x} 를 구하여 O열의 3행부터 저장하시오. (B123456hw21c.py, 워크시트 hw21)
- scipy.linalg.solve로 \vec{x} 를 구하여 P열의 3행부터 저장하시오. (B123456hw21d.py, 워크시트 hw21)
- 엑셀에서 4가지 해를 비교하여 완전히 같으면 '같다' 조금이라도 다르면 '다르다'고 아래 표에 답하시오.

	해 찾기	numpy	scipy
MINVERSE			
해 찾기	-		
numpy	-	-	

- 파이선에서 openpyxl 라이브러리를 이용하여 엑셀과 직접 데이터를 교환하시오.

2.2 선형 방정식 $\vec{A}\vec{x} = \vec{b}$ 에서 \vec{A} 와 \vec{b} 는 다음과 같다.

$$\vec{A} = \begin{pmatrix} 0.4 & -1.1 & 1.4 & 0.5 \\ 0.6 & -1.3 & 1.2 & 0.3 \\ -0.9 & 0.2 & 0.7 & 1.6 \\ -1.5 & 0.8 & 0.1 & 1.0 \end{pmatrix} \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} 1.6 \\ 1.1 \\ 2.8 \\ 2.3 \end{pmatrix}$$

다음의 계산을 수행하시오.

- 피버팅 후 1열의 Gauss 소거 결과를 확장 행렬 $(\vec{A}|\vec{b})$ 형태로 쓰시오.
- 피버팅 후 2열의 Gauss 소거 결과를 확장 행렬 $(\vec{A}|\vec{b})$ 형태로 쓰시오.
- 피버팅 후 3열의 Gauss 소거 결과를 확장 행렬 $(\vec{A}|\vec{b})$ 형태로 쓰시오.
- scipy.linalg.lu로 위 삼각 행렬 \vec{U} 를 구하여 출력하고 (c)와 비교하시오. (B123456hw22d.py)
- 후방 대입법에 의하여 \vec{x} 를 구하시오.
- numpy.linalg.solve로 해 \vec{x} 를 구하여 출력하고 (e)와 비교하시오. (B123456hw22f.py)

다음 사항을 지키시오.

- 손글씨와 .py 모두 숫자는 %10.3f 형식에 맞춰 답하시오.
- (a), (b), (c), (e)의 계산 과정과 결과, (d)와 (f)의 비교 결과 설명을 손글씨로 정리하시오.

2.3 분자 사이의 위치 에너지(potential energy)는 다음 형태의 Lennard-Jones의 퍼텐셜로 나타낼 수 있다.

$$f(x) = \frac{1}{x^{12}} - \frac{1}{x^6} - \frac{c}{x^4}$$

여기에서 x 는 무차원의 분자 사이 거리, f 는 무차원의 퍼텐셜, c 는 하전 입자에 대한 상수이다. $f(x)$ 의 근은 두 분자 사이의 인력과 척력이 정확히 비기는 거리이다. $c = 0.3$ 일 때 $f(x)$ 의 근을 구하자.

- 초기 추정치는 $x_1 = 0.9$, $x_2 = 2$
- 수렴 조건은 $|y_k| \leq 10^{-4}$ 뿐
- $k_{\max} = 40$
- $k = 1$ 이면 k , x_k , y_k 를 `print`, $k > 1$ 이면 k , x_k , y_k , $x_k - x_{k-1}$ 를 `print`. 단, k 는 `%5d`, 나머지는 `%10.4f`

이상의 조건에서 근을 구하는 파이썬 스크립트를 작성하자.

- (a) 초기 추정치로 정의되는 구간에서 $f(x)$ 는 한 개 이상의 근을 갖는 것을 보이시오.
- (b) 가위치법으로 근을 구하시오. (B123456hw23b.py)
- (c) 할선법으로 근을 구하시오. (B123456hw23c.py)
- (d) 수치 해석 결과에 대하여 논하시오.