PITANJA ZA PONAVLJANJE:

1. Koja je razlika između numeričkih i analitičkih metoda rješavanja nekog problema? Koja je razlika između numeričkog i analitičkog rješenja nekog problema? Zašto koristimo numeričke metode? Navedite numeričke metode za koje smatrate da se s njima susreće svaki kemičar bez obzira na granu kemije kojom se bavi. Pokušajte nabrojati čim više primjera korištenja numeričkih metoda u kemiji i dati objašnjenje zašto se koriste. Izaberite primjer koji možete riješiti i numeričkom metodom i analitički pa na njemu objasnite razliku ta dva pristupa.
2. Što podrazumijevamo pod pojmom „optimizacije“ funkcije?
3. Što su stacionarne točke? Prikažite grafički i objasnite.
4. Nacrtajte plohu potencijalne energije (PPE) za molekulu HCl.
5. Zašto je u slučaju složenijih molekula za optimizaciju funkcije koja opisuje zavisnost energije molekule o njenim koordinatama neophodno koristiti numeričke metode? Kako se te metode dijele? O kojim faktorima vodimo računa prilikom odabira metode koju ćemo koristiti za molekulu koja nas zanima?
6. Objasnite razliku globalnog i lokalnog minimuma.
7. Objasnite metodu optimizacije koju nazivamo simplex.
8. U slučaju funkcije više varijabli, koje informacije možemo saznati iz gradijenta u jednoj točki, a koje iz matrice drugih derivacija? Kako te informacije možemo iskoristiti za nalaženje minimuma funkcije koja opisuje zavisnost energije molekule o njenim koordinatama?
9. Objasnite metodu najstrmijeg spusta (SD)?
10. Koja dva načina pronalaska minimuma duž jedne dimenzije u metodi SD poznajete? Opišite ih.
11. Objasnite metodu konjugiranih gradijenata (CG)?
12. Koja metoda je robustnija, SD ili CG? Kojim redoslijedom bi primijenili te dvije metode za optimizaciju geometrije molekule?
13. Koje modifikacije CG metode poznajete?
14. Koju metodu optimizacije funkcije više varijabli koja koristi i druge derivacije poznajete? Objasnite ju i izvedite. U kojim slučajevima, odnosno kada u procesu minimizacije energije molekule se koristi? Kada ju valja izbjegavati?
15. Koje iteracijske kriterije pri optimizaciji funkcije koja opisuje zavisnost energije molekule o njenim koordinatama poznajete? Opišite njihovo korištenje.
16. O kojim faktorima moramo voditi računa pri odabiru metode za optimizaciju funkcije koja opisuje zavisnost energije molekule o njenim koordinatama?
17. Opišite metodu Monte Carlo u svrhu konformacijske pretrage molekule.