APLICACIONES INFORMÁTICAS EN QUÍMICA

Problemas Tema 3.4:

Manipulador Algebraico-4

Representaciones gráficas

Grado en Química

1º SEMESTRE

Universitat de València

Facultad de Químicas

Departamento de Química Física

F. Química - Edifici E - 3º planta.
C./ Dr. Moliner 50. 46100 Burjassot, Valencia • Tel. (+34) 963543389 • Fax (+34) 963544564
Aula Virtual: http://aulavirtual.uv.es/

I. GRAFICAS 2D

1. Representar la función y = 2 x sen(2x) entre x= -40 y x= 40. Modifique el tamaño, los límites de x, etc.

2. Represente ahora entre los mismos límites del ejercicio anterior, la función y= 25 $e^{-10^{\wedge}(-1.5\ x)}$ sin(x). Utilice un color diferente del del ejercicio anterior para representar la función.

3. Superponga en un mismo gráfico las dos funciones anteriores.

4. Representar en la misma gráfica las funciones y = 2 x sen(2x), y = 3 x sen(3x), y= 4 x sen(4x), entre x= -20 y x= 20 usando diferentes estilos de línea, puntos, colores, etc.

5. Realice el mismo tipo de ejercicio de superposición de gráficos con algunas de las funciones que se definieron en otro ejercicio.

$$\mathrm{y}(x) = x^3 - 2.5\,x^2 - 6\,x + 8$$

$$\mathrm{y}(x) = \mathrm{e}^x\ \mathrm{sen}(x)$$

$$\mathrm{y}(x) = \frac{x+3}{2x-4}$$

6. Represente en la misma gráfica la función $h = x^3 + 2$ y su primera derivada.

7. Represente en la misma gráfica la función $h = \sqrt{\frac{x^3+1}{\sqrt{x}}}$ y su primera derivada.

8. Representar en sendos gráficos cada una de las principales funciones trigonométricas acompañada de su primera derivada, entre -4π y 4π.

a) sin(x) y su primera derivada
b) idem para cos(x)
c) idem para tan(x)
d) idem para csc(x) (la inversa del seno)
e) idem para sec(x) (la inversa del coseno)
f) idem para cot(x) (la inversa de la tangente).

9. Representar en sendos gráficos cada una de las principales funciones trigonométricas **hiperbólicas** acompañada de su primera derivada, entre -4π y 4π.

a) sinh(x) y su primera derivada
b) idem para cosh(x)
c) idem para tanh(x)
d) idem para csch(x) (la inversa del seno hiperbólico)
e) idem para sech(x) (la inversa del coseno hiperbólico)
f) idem para coth(x) (la inversa de la tangente hiperbólica).

10. Queremos representar una función de forma discreta(con puntos) y en forma de linea continua en la misma gráfica; para ello:

- Generar la lista de puntos xx entre -10 y 10 de 0.5 en 0.5;
- Definir la función $f(x) = x^3-2.5x^2-6x+8$;
- Calcular la lista yy de valores de f(x) correspondiente a la lista de valores xx;
- Por último, representar en la misma grafica los puntos discretos (xx,yy) y la función f(x)

11. Realizar el mismo proceso del ejercicio anterior pero usando la función $f(x) = 3x^2*\sin(3x)$; NOTA: para que la función f(x) que contiene sin( ) se aplique a una lista, puede ser necesario usar la intrucción map(f, lista).

12. Representar los siguientes puntos, que corresponden, por ejemplo, a una señal eléctrica (intesidad I en mA) medida, en dos series independientes, a determinados tiempos fijos:

	t /s	I_1 /mA	I_2 /mA
	0.50	0.731	0.829
	0.75	2.118	2.016
	1.00	5.150	5.190
	1.25	3.551	3.460
	1.50	9.244	9.120
	1.75	9.052	9.088
	2.00	15.10	15.24
	2.25	13.91	13.79
	2.50	33.21	33.36
	2.75	30.71	30.51
	3.00	33.75	34.82
	3.25	43.64	43.84

	3.50	59.72	58.81
	3.75	72.60	73.51
	4.00	60.10	62.00
	4.25	86.75	88.85
	4.50	85.38	87.49
	4.75	107.0	106.2
	5.00	110.1	113.8
	5.25	136.3	135.1
	5.50	136.7	141.6

Representar los conjuntos de puntos (I , t) en una gráfica sobre la curva de la función $0.25\ x^3+3.0\ x^2+1.5\ x-1.0$.

II.- GRAFICAS 3D

1. Representar z = x^3 + 5*y^2

2. Representar z = x^3 - 5*y^2

3. Representar la función z(x,y) = 1/x + x*y + 1/y
(Esta es una función algo dificil de representar bien. Usando como límites para los ejes x e y los valores -1 y +1, compruebe el efecto de cambiar el "grid" o malla de puntos. Luego pruebe a cambiar los límites de z, y asi sucesivamente hasta conseguir ver bien el comportamiento de la función en la región próxima al origen x=0, y=0).

4. Representar las funciones siguientes y observar de forma cuidadosa el efecto que produce la multiplicación por la función angular.
(Tomar inicialmente los valores para los parámetros a y b : a=3, b=2).
a) z(x,y) = a/(1+b*x/y)
b) z(x,y) = a/(1+b*x/y) * cos(2*y)
c) z(x,y) = a/(1+b*x/y) * cos(2*x)
d) z(x,y) = a/(1+b*x/y) * cos(2*x+2*y).

5. Representar, en coordenadas cilíndricas:
a) f(z,ϕ) = 2.0 (cilindro)
b) f(z, ϕ) = 2.0*ϕ (cilindro espiral)
c) f(z, ϕ) = 1.25*z (cono)
d) f(z, ϕ) = z*ϕ (cono espiral)..

6. Representar, en coordenadas esféricas:
f(th,ph) = 2.0 (esfera)
f(th,ph) = th
f(th,ph) = ph
f(th,ph) = ph*th
Trata de describir las superficies que se obtienen en cada caso

III.- REPRESENTACIONES PARAMETRICAS

1. Representar la curva paramétrica (x=2*t^2, y=3*sen(3*t)).

2. Representar la curva paramétrica (x=tg(n*t), y=sen(m*t)) para n=2, m=1. Ver el efecto de otros valores enteros de n y m.
   (AYUDA: usar la opción [nticks, nnn] y ver el efecto de valores altos de nnn.

3. Representar la curva paramétrica (x=sen(n*t), y=cos(m*t)) para n=2, m=2.
   Una vez representada, repetir la gráfica con diversas combinaciones de (n,m).

4. Representar la trayectoria en el plano (x,y) de un objeto para el que x = 4.5*t^2 mientras que y= -5*t), entre t=-10 y t=10.

IV.- PROBLEMAS APLICADOS

1. La masa reducida , μ, de una molécula diatómica A-B satisface, por definición, la condición: $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B}$.

Definir μ como una función de las variables m_A y m_B y representarla para masas atómicas entre 1 y 110

2. La máxima eficiencia teórica de una máquina que convierta calor en trabajo viene dada por la expresión de Carnot: $\varepsilon = 1 - \frac{T_f}{T_c}$

Representar la función $\varepsilon(T_f, T_c)$ para temperaturas absolutas entre 100 y 500 K

NOTA: Obsérvese que como por definición $T_c > T_f$, y ambas son positivas, la eficiencia no puede ser ni negativa ni mayor que 1.

3. Bajo ciertas condiciones, en reacciones consecutivas del tipo $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$ se cumple que la dependencia de la concentración del intermedio B con el tiempo, *t*, viene dado por la expresión:

$$[B] = [A]_0 \frac{k_1}{k_2 - k_1}\left(e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}\right)$$

a) Definir [B] como una función de k1 y k2, (podemos llamarla cB(k1,k2)) para un valor arbitrario de $[A]_o$, la concentración inicial de A; (por ejemplo cAo = 0.05 M) y para un tiempo dado, por ejemplo *t* = 10 s.

b) Representar cB en función de k1 y k2 para valores de las variables que vayan desde 10^{-2} hasta 10 .

NOTA: Al intentar representar la función anterior, si k1 es estrictamente igual a k2, puede ocurrir que la aplicación detecte un denominador nulo y detenga el cálculo con una señal de error. Si ocurre eso, una manera sencilla de evitarlo, en este caso, es dar límites ligeramente diferentes a una de las variables. Por ejemplo, k1, en vez de ir desde 0.01 a 10 se le pide que vaya desde 0.09999 hasta 9.9999.