APLICACIONS INFORMÀTIQUES EN QUÍMICA

Problemes Tema 3.4:

Manipulador Algebraic-4

Representacions gràfiques

Grau en Química

1º SEMESTRE

Universitat de València

Facultat de Química

Departament de Química Física

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

I. GRÀFIQUES 2D

1. Representar la funció y = 2 x sin(2x) entre x= -40 i x= 40. Modifiqueu la grandària, els límites de x, etc...

2. Representeu ara entre els mateixos límits de l'exercici anterior, la funció y= 25 $e^{-10\text{^}(-1.5\ x)}$ sin(x). Utilitzeu un color diferent que l'utilitzat en el darrer exercici per representar la funció.

3. Superposeu en un mateix gràfic les dues funcions anteriors.

4. Representar en la mateixa gràfica les funcions y = 2 x sin(2x), y = 3 x sin(3x), y= 4 x sin(4x), entre x= -20 y x= 20 usant diferents estils de línia, punts, colors, etc...

5. Realiceu el mateix tipus d'exercici de superposició de gràfics amb algunes de les funcions que se varen definir en l'altre exercici.

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

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

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

6. Representeu en la mateixa gràfica la funció $h = x^3 + 2$ i la seua primera derivada.

7. Representeu en la mateixa gràfica la funció $h = \sqrt{\frac{x^3+1}{\sqrt{x}}}$ i la seua primera derivada.

8. Representar en successives gràfiques cadascuna de les principals funcions trigonomètriques junt amb llur primera derivada, entre -4π i 4π.

a) sin(x) i la seua primera derivada
b) el mateix per a cos(x)
c) el mateix per a tan(x)
d) el mateix per a csc(x) (la inversa del sinus)
e) el mateix per a sec(x) (la inversa del cosinus)
f) el mateix per a cot(x) (la inversa de la tangent).

9. Representar en successives gràfiques cadascuna de les principals funcions trigonomètriques **hiperbòliques** junt amb llur primera derivada, entre -4π i 4π.

a) sinh(x) i la seua primera derivada
b) el mateix per a cosh(x)
c) el mateix per a tanh(x)
d) el mateix per a csch(x) (la inversa del sinus hiperbòlic)
e) el mateix per a sech(x) (la inversa del cosinus hiperbòlic)
f el mateix per a coth(x) (la inversa de la tangent hiperbòlica).

10. Volem representar una funció de forma discreta (amb punts) i en forma de línia contínua en la mateixa gràfica. Per a fer-ho:

- Generar la llista de punts xx entre -10 i 10 de 0.5 en 0.5;
- Definir la funció $f(x) = x^3-2.5x^2-6x+8$;
- Calcular la llista yy de valors de f(x) corresponent a la llista de valors xx;
- Per últim, representar en la mateixa gràfica els punts discrets (xx, yy) i la funció f(x)

11. Realitzar el mateix procés de l'exercici anterior però usant la funció:
$f(x) = 3x^2$*sin(3x); **NOTA:** per a que la funció f(x) que conté sin( ) s'aplique a una llista, pot èsser necessari usar la instrucció **map(f, llista)**.

12. Representar els següents punts, que corresponen, per exemple, a un senyal elèctric (intesitat **I** en **mA**) amidada, en dues sèries independents, a determinats temps fixos:

	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 els conjunts de punts **(I , t)** en una gràfica sobre la corba de la funció 0.25 x^3+3.0 x^2+1.5 x-1.0.

II.- GRÀFIQUES 3D

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

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

3. Representar la funció z(x,y) = 1/x + x*y + 1/y
(Aquesta és una funció una mica difícil de representar bé. Usant com a límits per als eixos **x** i **y** els valors **-1** i **+1**, comproveu l'efecte de canviar el "grid" o malla de punts. Després proveu a canviar els límits de **z**, i així successivament fins conseguir veure bé el comportament de la funció en la regió pròxima a l'origen x=0, y=0).

4. Representar les funcions següent i observar de forma acurada l'efecte que produeix la multiplicació per la funció angular.
(Prendre inicialment els valors per als paràmetres **a** i **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 coordenades cilíndriques:
a) f(z,ϕ) = 2.0 (cilindre)
b) f(z, ϕ) = 2.0*ϕ (cilindre espiral)
c) f(z, ϕ) = 1.25*z (con)
d) f(z, ϕ) = z*ϕ (con espiral)..

6. Representar, en coordenades esfèriques:
f(th,ph) = 2.0 (esfera)
f(th,ph) = th
f(th,ph) = ph
f(th,ph) = ph*th
Tracta de descriure les superfícies que s'obtenen en cada cas.

III.- REPRESENTACIONS PARAMÈTRIQUES

1. Representar la corba paramètrica (x=2*t^2, y=3*sin(3*t)).

2. Representar la corba paramètrica (x=tg(n*t), y=sin(m*t)) para n=2, m=1. Veure l'efecte d'altres valors sencers de **n** i **m**.
   (AJUDA: usar l'opció [nticks, nnn] i veure l'efect de valors alts de nnn.

3. Representar la corba paramètrica (x=sin(n*t), y=cos(m*t)) para n=2, m=2.
   Una vegada representada, repetiu la gràfica amb diverses combinacions de **(n,m).**

4. Representeu la trajectòries en el plànol **(x,y)** d'un objecte per al que x = 4.5*t^2 mentre que y= -5*t), entre t=-10 i t=10.

IV.- PROBLEMES APLICATS

1. La massa reduïda, μ, d'una molècula diatòmica A-B satisfà, per definició, la condició: $\frac{1}{\mu}=\frac{1}{m_A}+\frac{1}{m_B}$.

Definir μ com una funció de les variables m_A i m_B i representar-la per a masses atòmiques entre 1 i 110

2. La màxima eficiència teòrica d'una màquina que converteix calor en treball ve donada per l'expressió de Carnot: $\varepsilon = 1-\frac{\mathrm{T}_f}{\mathrm{T}_c}$

Representar la funció $\varepsilon\left(\mathrm{T}_f,\mathrm{T}_c\right)$ per a temperatures absolutes entre 100 i 500 K

NOTA: Observeu que, tot i que per definició, $T_c > T_f$, i ambdues són positives, l'eficiència no pot èsser ni negativa ni major que 1.

3. Baix certes condicions, en reaccions consecutives del tipus $\mathrm{A}\xrightarrow{k_1}\mathrm{B}\xrightarrow{k_2}\mathrm{C}$ se compleix que la dependència de la concentració de l'intermedi B amb el temps, ***t***, ve donada per l'expressió:

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

a) Definir [B] com una funció de k_1 i k_2, (podem nomenar-la $c_B(k_1,k_2)$) per a un valor arbitrari de $[A]_o$, la concentració inicial d'**A**; (per exemple c_{Ao} = 0.05 M) i per a un temps donada, per exemple ***t*** = 10 s.

b) Representar c_B en funció de k_1 i k_2 per a valors de les variables que vagen des de 10^{-2} fins 10 .

NOTA: A l'intentar representar la darrera funció, si k_1 és estrictament igual a k_2, pot ocorrer que l'aplicació detecte un denominador nul i detinga el càlcul amb una senyal d'error. Si ocorreix això, una manera senzilla d'evitar-lo, en aquest cas, és donar límits lleugerament diferents a una de les variables. Per exemple, k_1, en compte d'anar des de 0.01 a 10 se li demana que vaja des de 0.09999 fins a 9.9999.