

## Guia Scipy

En esta guía usted ejercitará algunas características del módulo scipy. El módulo scipy se importa como:

```
import scipy as sp
```

1. Grafique la función de Bessels de orden 5 entre  $x=0$  y  $x=20$  y encuentre sus raíces en ese intervalo.
2. Integre la función de Bessels entre 0 y su 3 raiz.
3. Calcule las siguientes integrales numéricamente:
  - (a)  $\int_0^{10} x \sin(2x^3 - 10) dx$
  - (b)  $\int_{-2}^{28} x e^{-x^2+5} dx$
  - (c)  $\int_0^{100} 10x^3 + x^7 dx$
4. El trabajo de expansión un gas de van der Waals se obtiene calculando la integral:

$$w = - \int_i^f P dV \quad (1)$$

La presión se puede calcular mediante la expresión:

$$P = \frac{nRT}{V - nb} - \frac{an^2}{V^2} \quad (2)$$

Dado los siguiente datos:

- $R = 8.314 JK^{-1} mol^{-1}$
- $n = 1 mol$
- $a = 0.657 Jm^3 mol^{-2}$ ,  $b = 5.62 \times 10^{-5} m^3 mol^{-1}$
- $T = 298 K$

Calcule el trabajo si el gas se expande de  $0.1 m^3$  a  $0.6 m^3$  manteniendo la temperatura constante.

5. Dada las siguientes matrices:

$$A = \begin{bmatrix} 10 & 8 & 0 & 1 \\ 1 & 3 & 8 & 9 \\ 5 & 9 & 0 & 1 \\ 6 & 7 & 13 & 9 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 9 & 8 & 7 & 4 \\ 3 & 6 & 8 & 7 \\ 5 & 2 & 2 & 1 \\ 6 & 12 & 0 & 9 \end{bmatrix}$$

Calcule las siguientes operaciones:

- (a) Inversa de  $A$
- (b)  $e^A$
- (c)  $\det(B)$

- (d) Los valores y vectores propios de A
- (e) Escriba un programa que calcula la traza de una matriz.
6. Una molécula de agua tiene las siguientes coordenadas cartesianas en Ångstrom:

	x	y	z
O	0.000000	0.000000	0.000000
H	0.758602	0.000000	0.504284
H	0.758602	0.000000	-0.504284

- (a) Guarde las coordenadas x,y,z y el símbolo atómico en un array de numpy.
- (b) Escriba un diccionario que tiene como llaves símbolos atómicos y como valor la masa atómica. (O: 15.999 g/mol, H: 1.000 g/mol)
- (c) El momento de inercia de una molécula esta dado por:

$$I_{xx} = \sum_i^N m_i(y_i^2 + z_i^2) \quad I_{yy} = \sum_i^N m_i(x_i^2 + z_i^2) \quad I_{zz} = \sum_i^N m_i(x_i^2 + y_i^2) \quad (3)$$

En el caso de los elementos diagonales, y para los fuera de la diagonal:

$$I_{xy} = \sum_i^N m_i y_i x_i \quad I_{xz} = \sum_i^N m_i x_i z_i \quad I_{yz} = \sum_i^N m_i y_i z_i \quad (4)$$

Donde N es el número de átomos. Calcule el tensor de inercia y encuentre los valor de los momentos de inercia principales, los que corresponden a los valores propios del tensor de inercia.

7. Resuelva numéricamente la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{dy}{dx} = x - y \quad y(0) = 1 \quad (5)$$

La solución analítica de la ecuación diferencial es:

$$y(x) = x - 1 + 2e^{-x} \quad (6)$$

Grafique tanto la solución numérica como la solución analítica entre 0 y 5 y compare ambos resultados.

8. Considere la siguiente ecuación diferencial de segundo orden para  $y(x)$ .

$$y'' + 2y' + 2y = \cos(2x), \quad y(0) = 0, y'(0) = 0 \quad (7)$$

Esta ecuación se puede transformar en un sistema de dos ecuaciones de primer orden definiendo una nueva variable dependiente. Por ejemplo:

$$z' + 2z + 2y = \cos(2x) \quad (8)$$

$$z = y' \quad (9)$$

Con las condiciones iniciales  $z(0) = y(0) = 0$ . Resuelva la ecuación diferencial entre 0 y 10 y grafique el resultado.

9. De las siguientes funciones, encuentre los máximos, mínimos y raíces. Grafique cada una para verificar visualmente su resultado.
- $f(x) = 2x^4 + x^3 + -3x^2$
  - $f(x) = -x^6 - 3x^3 + x + 1$
  - $f(x) = 4x^5 - 8x^4 - 5x^3 + 10x^2 + x - 2$
10. En el archivo peliculas.txt se encuentran los datos de el largo de las películas en minutos, con rating IMDB mayor a 7.0 hechas en el año 2015.
- (a) Calcule el promedio de el largo de las películas.
  - (b) Grafique un histograma para las película, y dibuje una curva de distribución normal en el mismo gráfico.
  - (c) Calcule la desviación estándar y la varianza de la distribución.