

## Guia Scipy

1. En esta guia usted ejercitará algunas características del modulo scipy. El modulo scipy se importa como:

```
import scipy as sci
```

2. Integre la función de Bessels entre 0 y su 3 raiz.
3. Calcule las siguientes integrales numricamente:

- $\int_0^1 0x \operatorname{sen}(2x^3 - 10) dx$
- $\int_{-2}^2 8xe^{-x^2+5} dx$
- $\int_0^1 0010x^3 + x^7 dx$

4. El trabajo de expansión un gas de van der Waals se obtiene calculando la integral:

$$w = - \int_f^i P dV \quad (1)$$

La presión se puede calcular mediante la expresión:

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

Dado los siguientes datos:

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

5. Dada las siguientes matrices:

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

Calcule las siguientes operaciones:

- Inversa de A
  - $e^A$
  - $\det(B)$
  - Los valores y vectores propios de A
  - Escriba un programa que calcula la traza de una matriz.
6. La operación de multiplicación de una matriz **A** de dimensiones  $i \times j$  por una matriz **B** de dimensiones  $j \times k$ , donde  $j = 1 \dots m$  está dada por :

$$AB = \sum_{j=1}^5 A_{ij} B_{ji} \quad (3)$$

Implemente una rutina que hace un calculo de multiplicación de matrices y verifique su resultado con la función dot de numpy.

7. Una molcula de agua tiene las siguientes coordenadas cartesianas en Ångstrom:

|   |        |        |         |
|---|--------|--------|---------|
| O | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000  |
| H | 0.7586 | 0.0000 | 0.5043  |
| H | 0.7586 | 0.0000 | -0.5043 |

1. Guarde las coordenadas x,y,z y el simbolo atómico en un array de numpy.

2. 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)
3. El momento de inercia de una mol
4. cula esta dado por:

$$I_{xx} = \sum_i^N m_i(y_i^2 + z_i^2) \quad I_{yy} = \sum_i^N m_i(x_i^2 + z_i^2) \quad I_{zz} = \sum_i^N m_i(x_i^2 + y_i^2) \quad (4)$$

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

$$I_{xy} = \sum_i^N m_i x_i y_i \quad I_{xz} = \sum_i^N m_i x_i z_i \quad I_{yz} = \sum_i^N m_i y_i z_i \quad (5)$$

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

8. Resuelva numricamente la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{dy}{dx} = x - y \quad y(0) = 1 \quad (6)$$

La solución analítica de la ecuación diferencial es:

$$y(x) = x - 1 + 2e^{-x} \quad (7)$$

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

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

$$y'' + 2y' + 2y = \cos(x) \quad y(0) = 0 \quad y'(0) = 0 \quad (8)$$

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

$$z' + 2z + 2y = \cos(2x) \quad (9)$$

$$z = y' \quad (10)$$

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

10. De las siguientes funciones, encuentre los máximos, mínimos y raíces. Grafique cada una para verificar visualmente su resultado.

- $f(x) = 2x^4 + x^3 + -3x^2$
- $f(x) = -x^6 - 3x^3 + x + 1$
- $f(x) = 4x^5 - 8x^4 - 5x^3 + 10x^2 + x - 2$

11. 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 del 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.