

# Dudas - Química Computacional

Diana Marlén Castañeda Bagatella

23/09/20

Para la elaboración de la gráfica en gnuplot de  $\theta_1$  del artículo, se elaboró lo siguiente:

- Se generó un archivo de gráfica de contornos de prueba "Int-func-prueba-contour-view.p" del que se obtuvo exitosamente la función de prueba.

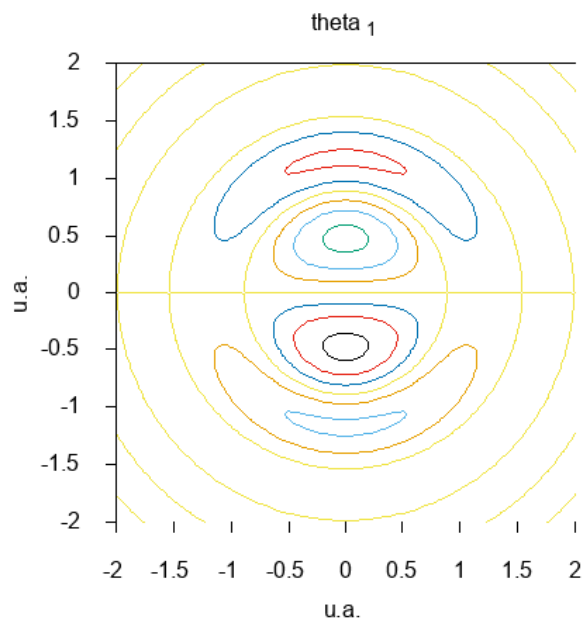


Figura 1

Esto se realizó con la finalidad de corroborar el el script de Gnuplot no tuviera errores en las instrucciones, y si se gráfica con una función conocida, se podía reconocer con mayor facilidad.

- Por otra parte, se generó el archivo "contour-view.p" en el que se modificó la función de prueba por  $\theta_1$ , del artículo, en el que el problema presentado es que no genera la función por problemas en la escritura de la misma.