

Curso de Aprendizaje de MathCad y Ejemplos

Departamento de Química Física
Luís Camacho Delgado
Curso 2001-2002

Resumen del Libro electrónico
Curso de aprendizaje MathCad

MathCad 4.0

Índice

- 1) Cálculos aritméticos
 - 2) Edición de ecuaciones
 - 3) Manejo de variables
 - 4) Variables de intervalo e iteración
 - 5) Gráficos X-Y
 - 6) Operadores
 - 7) Funciones
 - 8) Formateo de los resultados
 - 9) Unidades
 - 10) Matrices y vectores
 - 11) Resolución de ecuaciones
 - 12) Gráficos polares
 - 13) Gráficos de superficies
 - 14) Gráficos de curvas de nivel
 - 15) Matemáticas simbólicas
 - 16) SmartMath
 - 17) Texto
-

Ejemplos

Química Física (3º de Químicas)

- 1) Relación de Completitud (Lección 2)
 - 2) Efecto Túnel (Lección 3)
 - 3) Partícula en una caja de potenciales bidimensional de paredes infinitas (Lección 3)
 - 4) El oscilador armónico (Lección 4)
 - 5) Representación gráfica de armónicos esféricos (Lección 5)
 - 5-b) Armónicos esféricos (2) (Lección 5)
 - 6) Representación de los orbitales 3d (Lección 6)
 - 7) Integrales de Coulomb: Integrales bieletrónicas (Lección 7)
 - 7-b) Teoría de Perturbaciones: Partícula en un plano inclinado (Lección 7)
 - 8) El hueco de Fermi (Lección 8)
 - 9) La molécula H_2^+ (Lección 9)
-

Funciones especiales de MathCad

- 1) Funciones de interpolación de spline cúbico
 - 2) La función root (Cálculo numérico de las raíces de una función)
 - 3) La función gamma de Euler
 - 4) La función if. Funciones discontinuas o con indeterminaciones
-

Tratamiento de datos y estadística

- 1) Ajuste de curvas polinómico
 - 2) Filtrado de una señal con una FFT
 - 3) Trazado de histogramas -- Lanzamiento de una moneda al azar
 - 4) Ajuste de curvas no polinómicas
 - 5) Funciones de distribución de datos
 - 6) Integración y diferenciación numérica de datos
 - 7) Ajuste de datos a una recta
 - 8) Gaussianas y Lorencianas
 - 9) Alisado de curvas
 - 10) Manejo de datos y trazado de histogramas
 - 11) Armónicos esféricos
 - 12) Mecánica Ondulatoria
 - 13) Atractores caóticos
-

Química de la Atmósfera

- 1) El poder emisor de un cuerpo negro
 - 2) Capa de Chapman
 - 3) Efecto Invernadero-CO₂
-

Cinética

- 1) Iteración simultánea -- Difusión de una epidemia
 - 2) Sistema predador-presa: Método de Runge-Kutta de 4º orden para la resolución de Ecuaciones diferenciales
 - 3 Atractores caóticos
-

1) CÁLCULOS ARITMÉTICOS

Mathcad reorganiza las expresiones aritméticas, según se escriben:
escriba

$$1+3*2/1.5$$

Apareciendo en pantalla

$$1 + 3 \cdot \frac{2}{1.5}$$

Al pulsar el signo igual, Mathcad evalúa la expresión y muestra el resultado.
Haga clic en cualquier parte de la expresión que acaba de escribir y pulse =

$$1 + 3 \cdot \frac{2}{1.5} = 5$$

Mathcad actualiza automáticamente el resultado, al modificar la ecuación:
Haga clic a la izquierda del 3. Pulse **Supr**, escriba 33 y haga clic fuera de la ecuación.

$$1 + 33 \cdot \frac{2}{1.5} = 45$$

NÚMEROS COMPLEJOS

Mathcad utiliza números complejos. Así:

$$\sqrt{-1} = i$$

$$\arccos(1.2) = 0.622i$$

Para escribir la unidad imaginaria "i" hay que escribir "1i." Observe en los ejemplos siguientes que cuando se hace clic dentro del ejemplo, se ve el "1i" y cuando se hace clic fuera el "1i" desaparece:

$$(1 + i)^2 = 2i$$

$$(3 + 2i) \cdot i = -2 + 3i$$

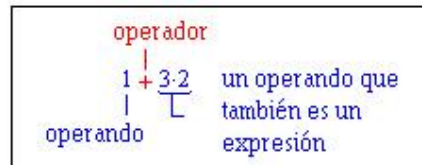
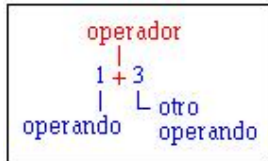
2) EDICIÓN DE ECUACIONES

Mathcad se comporta exactamente como un procesador de texto, y permite editar tanto texto como ecuaciones según una secuencia lógica.

OPERADORES Y OPERANDOS

Mathcad enlaza los "operandos" con los "operadores" para formar "expresiones."

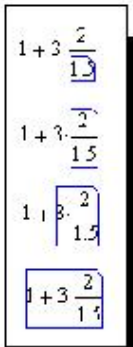
A veces un operando puede ser también una expresión:



RECUADROS DE SELECCIÓN

Mathcad posee dos tipos de recuadros de selección:

- Cuando se pulsa en una región limpia de la pantalla y manteniendo apretado el botón izquierdo del ratón, se arrastra hasta abarcar un texto o ecuación, el objeto queda seleccionado con un recuadro negro. Este tipo de selección nos permite copiar o suprimir el objeto. Asimismo, podemos trasladar el objeto, a través de la pantalla, situándonos sobre el y arrastrándolo con el botón izq. del ratón apretado. También es posible modificar su tamaño, si es una grafica o una franja de texto.
- Cuando se pulsa sobre una ecuación, aparece un recuadro azul de selección que enmarca las diferentes partes de la estructura de la ecuación. Vamos a practicar con este recuadro.



Es esencial comprender el funcionamiento del cuadro de selección, para saber cómo editar ecuaciones. Los cuadros de selección pueden tener cualquier tamaño: Teclee la expresión que sigue y experimente con las cuatro teclas de las flechas de dirección, para modificar el cuadro de selección.

$$1 + 3 \cdot \frac{2}{1.5}$$

Ahora, pruebe con una expresión más complicada. Pruebe igualmente a hacer clic sobre los operadores.

$$\left[(1 + 3^2) \cdot \frac{2}{3 + 1} \right]^2$$

MANEJO DEL CUADRO DE SELECCIÓN

Al usar el cuadro de selección, retenga la siguiente regla general:

- *Todo lo que esté incluido en el cuadro de selección, se convertirá en el primer operando del siguiente operador que escriba.*

Vamos a practicar lo anterior para sustituir operadores y para insertar operadores:

Supongamos que queremos convertir la expresión

$$\frac{3^2}{2} + 2$$

en ...

- Haga que el cuadro de selección incluya el operador que desea reemplazar: "+". Use la flecha arriba o simplemente haga clic en el "+".
- Pulse **Supr** para eliminar el operador, y deje los dos operandos en espera de operador.
- Pulse "/" para insertar el operador división.

A veces Mathcad modifica bastante el aspecto de una ecuación al editarla. Sin embargo, se trata de los mismos sencillos pasos. Observe atentamente los cambios en los mensajes emergentes, mientras convertimos :

Haga que el cuadro de selección incluya el operador que desea reemplazar: "/" Use la flecha arriba o haga clic en la barra de división. Pulse **Supr** para eliminar el operador, y pulse "^" para insertar el operador exponente.

$$\frac{3}{2+1}$$

en ...

$$3^{2+1}$$

Hasta ahora, hemos reemplazado el operador "extremo" o de "nivel superior", haciendo el cuadro de selección lo más grande posible. Pero podemos reemplazar cualquier operador, simplemente poniendo el cuadro de selección en el lugar adecuado; observe el cuadro mientras convertimos...

- Incluya el "3 - 5" en el cuadro. Use la flecha arriba o haga clic en el signo menos.
- Pulse **Supr** para eliminar el menos.
- Pulse "+". Observe que lo hemos hecho como si el "2+1" no existiera.

$$\frac{3-5}{2+1}$$

en ...

$$\frac{3+5}{2+1}$$

Supongamos que desea crear la expresión:

$$2^{3+1} - 1$$

Si escribe simplemente "2^3+1-1", obtendrá:

$$2^{3+1-1}$$

Escriba la expresión anterior siguiendo los puntos que se indican a continuación y observe el cuadro de selección:

- Escriba 2^3+1 para obtener el primer elemento.
 - Pulse flecha arriba, hasta que el cuadro de selección lo incluya todo. Esto será el primer operando del siguiente operador que escriba; en este caso, el menos.
 - Escriba "-" para insertar el signo menos
 - Escriba "1" para rellenar el espacio vacío.
- Practique escribiendo la expresión

$$\frac{2 \cdot \sin\left(\frac{2}{3}\right)}{\log(2) + \sqrt{3.2}} = 0.592$$

3) DEFINICIÓN DE VARIABLES

Mathcad permite definir variables. Es posible utilizar estas variables en las ecuaciones, como si se tratase de números. Para asignar el valor "1" a la variable "x", haga lo siguiente:

- Haga clic en una zona vacía y escriba el nombre de la variable, "x".
- Pulse la tecla de dos puntos (":").
- Escriba el valor, "1".

Una vez definida, puede usar la variable en una ecuación.
Por ejemplo:

$$\begin{aligned} a &:= 3 \\ 3 \cdot a + 2 &= 11 \end{aligned}$$

Igualmente puede definir otras variables en función de esta variable.
Por ejemplo:

$$\begin{aligned} B &:= 2 \cdot a + 1 \\ B &= 7 \end{aligned}$$

Al cambiar el valor de una variable, Mathcad actualiza todos los resultados que dependan de esta variable. Reemplace la definición de $A:=3$ por otro valor cualquiera y observe que todos los resultados cambian, en función del nuevo valor de "A".

Si usa una variable antes de haberla definido, Mathcad no sabrá qué hacer con ella.

$$\begin{aligned} Z &:= \blacksquare \quad \text{<--- Obtendrá un mensaje indicándole dónde está el error.} \\ 3 \cdot Z + 2 &= \blacksquare \quad \text{<--- En todas las ocasiones en que aparezca una Z, ésta aparecerá resaltada.} \end{aligned}$$

$$D := 2 \cdot Z + 1$$

Para que todo vuelva a la normalidad bastará con escribir un número en el espacio vacío para asignar un valor a Z.

$$D = \blacksquare$$

NOMBRES DE VARIABLES EN LETRAS GRIEGAS

Las variables pueden ser igualmente letras griegas. Para escribir una letra griega, pulse la letra latina equivalente y a continuación pulse **[Ctrl]G**. También es posible acceder a estas letras mediante las ventanas de diálogo 3 y 4 de la izquierda. A estas se accede pulsando sobre el 1 de la primera ventana.

ORDEN DE EVALUACIÓN

Una vez que se usan variables, es importante tener en cuenta el orden en el que se colocan en la página. La regla básica es que

- *puede usarse una variable en cualquier parte debajo de donde se definió.*
- *en cualquier parte inmediatamente a la derecha de donde se definió.*

DOS SIGNOS DE IGUALDAD DIFERENTES

Hasta ahora hemos visto dos símbolos que funcionan de forma similar que el signo de igualdad que se usa al hacer cálculos sobre papel; son:

- El símbolo "=". Se trata de un signo de igualdad de "interrogación". Le *pide* a Mathcad que evalúe lo que está a la izquierda y que muestre el resultado a la derecha.
- El símbolo ":=". Se trata de un signo de igualdad de "asignación". Le *dice* a Mathcad que tome lo que está a la derecha y que lo asigne a lo que está a la izquierda. Este es el equivalente de *meter en memoria* de una calculadora manual

Existen dos signos de igualdad adicionales. Es decir, en realidad MathCad tiene definidos 4 signos de igualdad con significados diferentes. Los dos adicionales son:

Definición global

$$a \equiv 4$$

(icono del menú dos de ventanas)

Se utiliza para definir variables o funciones, antes de que aparezcan definiciones de tipo :=.

Igualdad lógica

$$a = c$$

Pulse **Ctrl +**

Utilícelo en resolver bloques y como operador booleano. Este operador retorna un 1 si en efecto $a=b$, y un 0 si la igualdad no se cumple

3) VARIABLES DE INTERVALO

Hasta ahora hemos utilizado variables que representan un único número. Ahora nos ocuparemos de variables que representan una secuencia de números. Se llaman "variables de intervalo".

Para definir una variable que vaya del 1 al 7:

- Escriba "n" seguido de dos puntos, como si definiera una variable normal.
- En el espacio vacío de la derecha, escriba el primer número del intervalo, "1", y pulse la coma.
- En el espacio vacío siguiente, escriba el segundo número del intervalo, "2", y pulse punto y coma.
- Escriba el último número del intervalo: "7"

`n := 1,2..7`

La variable de intervalo está definida. Para verla escriba "n=":

n =

1
2
3
4
5
6
7

Puede utilizar variables de intervalo para realizar cálculos repetitivos.

Por ejemplo, supongamos que desea una lista de los valores de "y" a lo largo de la parábola $y=x^2+1$, con x variando según los valores -1, -0.5, 0...1.

`x := -1,-0.5..1`---Defina la variable de intervalo que vaya desde -1 a 1 de 0.5 en 0.5 .

Escriba " x^2+1 =" para obtener una tabla de valores. --->

$x^2 + 1 =$

2
1.25
1
1.25
2

VARIABLES DE INTERVALO Y ARRAYS

Hasta ahora hemos visto cómo las variables de intervalo facilitan los cálculos repetitivos. Pero las variables de intervalo siempre varían en pasos iguales. ¿Que ocurre si queremos obtener la lista de los valores de "y" a lo largo de la parábola $y=x^2+1$, cuando x tome cinco valores arbitrarios?

Puede comenzar por crear una array (vector o matriz de datos) :

- Primero defina una variable de intervalo **n** que tome los cinco valores 0, 1, 2, 3 y 4.
- Ahora escriba **x** seguido por el corchete izquierdo ([) para crear un espacio de subíndice. También puede escribir **x** y pulsar sobre el símbolo **x_i** del menú 1 de las ventanas de diálogo.
- Luego escriba **n** y a continuación dos puntos (:).
- Escriba cinco números, separados por comas.

`n := 0,1..4`

<--- Defina la variable de intervalo.

<--- Defina la intervalo.

$x_n :=$

-1
2
3
0.5
4

Tras haber definido la tabla, puede evaluar la parábola $y=x^2+1$ utilizando los puntos de la array.

$y_n := (x_n)^2 + 1$ <--- Evalúe la parábola en cada uno de los puntos dados.

Visualice la array que acaba de definir tecleando

x [n = ----->

$x_n =$

-1
2
3
0.5
4

$y_n =$

2
5
10
1.25
17

Visualice el resultado tecleando

y[n = ----->

.

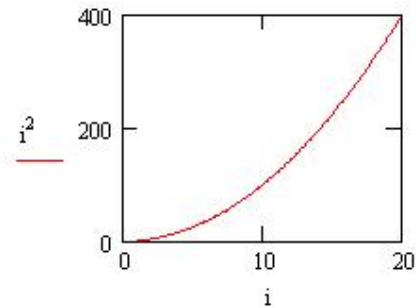
4) GRÁFICOS X-Y

Como los gráficos X-Y contienen normalmente una o varias expresiones con variables de intervalo en ambos ejes; defina una variable de intervalo. Cree una variable de intervalo i que vaya del 1 al 20 en incrementos de 0,1.

$i := 1, 1.1 \dots 20$

Luego, para crear el gráfico X-Y, haga clic donde desee colocar el gráfico. Luego seleccione **Crear gráfico X-Y** del menú **Gráf.**, o también puede elegir gráficos en el menú (1) de ventanas de la izquierda

- Haga clic en el espacio en la parte inferior central del gráfico. Escriba " i ". Ésta es la expresión que se trazará en el eje x.

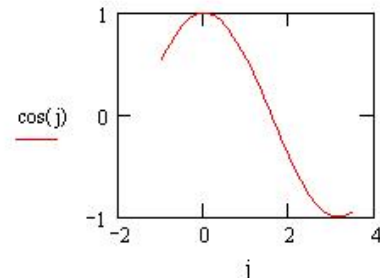


- Haga clic en el espacio en la parte central izquierda del gráfico. Escriba " i^2 ". Ésta es la expresión que se trazará en el eje y.
- Haga clic fuera del gráfico, o pulse **[F9]**. Mathcad trazará la gráfica i^2 frente a i .

Por ejemplo . . .

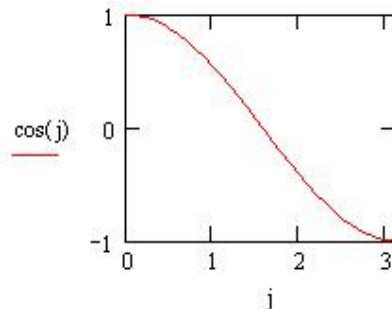
$j := -1, -0.9 \dots 3.5$

Probablemente habrá observado que Mathcad ajusta los límites superior e inferior de cada eje de un gráfico X-Y automáticamente. Puede sustituir con facilidad los parámetros de Mathcad por los suyos propios, si desea mostrar un rango de valores en particular en uno o ambos ejes.



Supongamos que únicamente desea mostrar los valores del eje x para 0 y π .

- Haga clic en el gráfico para ver los espacios que contienen los límites actuales de los datos de cada eje.
- Haga clic en el espacio más a la derecha del eje x, use la tecla flecha arriba para seleccionar el número, y escriba " π ". Puede escribir "**p**" seguido de "**[Ctrl]+G**", o utilizar el botón de la paleta.
- Luego haga clic en el espacio más a la izquierda del eje x, use la tecla flecha arriba para seleccionar el número y escriba el número "0".



- Teniendo el gráfico seleccionado, elija

Formato de gráfico X-Y del menú de **Gráf.** y marque la casilla de verificación "Escala automática" para el eje x.

- Haga clic fuera del gráfico o pulse **[F9]**.

Mathcad le permite dar *formato* a los gráficos X-Y cambiando las escalas de los ejes, retículas y tipos de trazo.

A continuación se muestran varios ejemplos del mismo gráfico, pero con diferentes opciones de formato activadas. Para ver las opciones de formato activadas en cada gráfico, primero haga clic en el gráfico y elija **Formato de gráfico X-Y** del menú **Gráf..**

$$i := 0..100$$

$$K := 10^{.02}$$

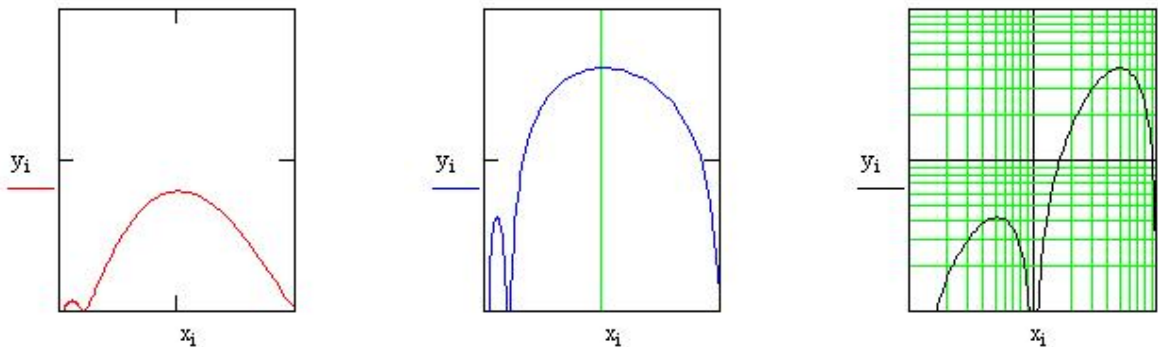
$$x_i := K^i$$

$$y_i := K^i \cdot \left| \sin\left(i \cdot \frac{\pi}{50}\right) + .01 \right|$$

... con escala logarítmica en el eje x, y con retícula en el mismo eje ...

Primero, sin escala logarítmica ni retícula:

... y con escala logarítmica y retícula en ambos ejes.



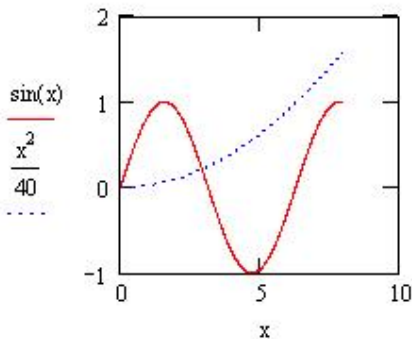
Puede trazar varias líneas, o *trazas*, en el mismo gráfico X-Y. Por ejemplo, puede trazar dos expresiones del eje y sobre una expresión del eje x. Como en el caso precedente, las expresiones que se tracen contendrán variables de intervalo. Lo que sigue es la definición de la variable de intervalo **x**:

$$x := 0, 0.01 .. 8$$

... y dos funciones que podemos trazar:

$$\frac{\sin(x)}{\frac{x^2}{40}}$$

Para trazar estas funciones en relación con la variable **x** ...



- Cree un gráfico X-Y
- Haga clic en el espacio en la parte inferior central del gráfico. Escriba "**x**". Ésta es la expresión que se trazará en el eje x.
- Haga clic en el espacio en la parte central izquierda del gráfico. Primero escriba "**sen(x)**"; luego escriba una coma (",") y a continuación "**(x^2)/40**".
- Haga clic fuera del gráfico, o pulse **[F9]**

Es posible representar hasta 16 trazas en una misma gráfica

6) OPERADORES

DERIVADAS

Mathcad admite tanto derivadas numéricas como simbólicas. Estas últimas se describen en la sección sobre matemáticas simbólicas. En esta sección describe las derivadas numéricas.

El ejemplo muestra cómo evaluar la derivada de

$$x^2 + \log(x)$$

en

$$x := 4$$

- Defina el punto en el que desea evaluar la derivada.
- Pulse ? para insertar el operador de derivada, o pulse el botón correspondiente del menú 1 de ventanas de la izquierda.
- Escriba la variable de diferenciación en el espacio inferior.
- Escriba la expresión que desea diferenciar en espacio restante y pulse =

$$\frac{d}{dx} (x^2 + \log(x)) = 8.109$$

Puede evaluar derivadas en varios puntos a la vez utilizando variables de intervalo:

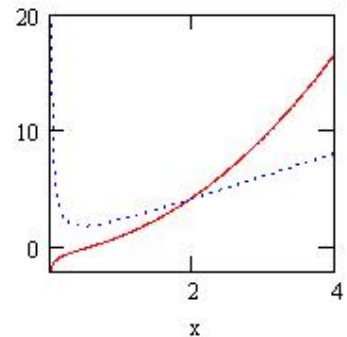
$$x := 1..4$$

$$\frac{d}{dx} (x^2 + \log(x))$$

2.434
4.217
6.145
8.109

$$x := 0.01, 0.02..4$$

$$\frac{d}{dx} (x^2 + \log(x))$$



En la Figura se muestra la representación de la función y su derivada ----->

DERIVADAS DE ORDEN N

Con este operador podrá evaluar derivadas de orden de 1 a 5. Para evaluar la derivada de segundo orden de la expresión del ejemplo anterior, defina el valor en el que desea evaluar la derivada. Luego:

- Pulse [Ctrl][Mayús]Ç. Esto crea un operador con dos espacios adicionales.
- Rellene los espacios, como hizo en el ejemplo anterior.
- En el espacio inferior escriba el orden de la derivada. Observe que éste también aparece en el espacio superior.
- Ahora pulse el signo igual.

$$x := 1..4$$

$$\frac{d^3}{dx^3} (x^2 + \log(x))$$

0.869
0.109
0.032
0.014

INTEGRALES

Puede utilizar el operador de integración de Mathcad para evaluar numéricamente la integral definida de una función, en un intervalo determinado. El ejemplo siguiente muestra cómo evaluar la integral definida de $\sin(x)^2$ de 0 a $\pi/4$.

- Haga clic en un espacio vacío y escriba **&** o pulse el botón correspondiente del menú 1 de ventanas de la izquierda. Aparece una integral, con espacios para el integrando, los límites y la variable de integración.
- Haga clic en el espacio inferior y escriba **0**. Luego haga clic en el espacio superior y escriba **[Ctrl]p/4**.
- Haga clic en el espacio entre el signo de integral y la "d". Luego escriba **sen(x)^2**.
- Haga clic en el espacio restante, escriba **x** y pulse =

$$\int_0^{\pi/4} \sin(x)^2 dx = 0.143$$

También puede usarse una integral con una variable de intervalo. Por ejemplo:
Defina una variable de intervalo:

i := 1..5 <--Escriba **i** [dos puntos] **1** [punto y coma] **5**

Defina la nueva variable

$$y_i := \int_0^i x^2 dx$$

Para ver la tabla de valores

$y_i =$
0.333
2.667
9
21.333
41.667

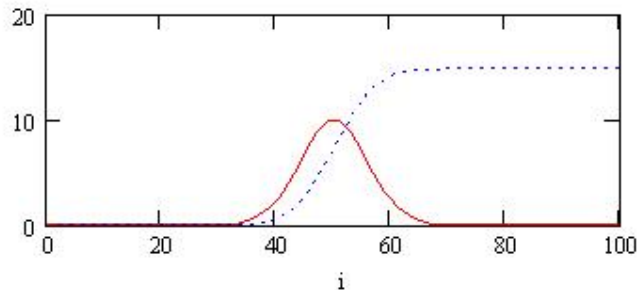
Al igual que en el caso anterior, podemos representar una función y su integral. Por ejemplo:

i := 0..100

$$Iz_i := \int_0^i e^{-\frac{(u-50)^2}{70}} du$$

$$z_i := e^{-\frac{(i-50)^2}{70}}$$

$$\frac{z_i \cdot 10}{Iz_i}$$



donde z_i ha sido multiplicado por 10 para que pueda ser visualizada en la misma gráfica

SUMATORIAS Y PRODUCTORIAS

Los operadores sumatoria y productoria funcionan de la misma manera. Hay que especificar un rango de valores y la expresión que se desea sumar. Por ejemplo, para sumar el cuadrado de los enteros del 1 al 100:

- Pulse **[Ctrl][Mayús]4** para insertar el operador sumativo.
- Inserte un índice para la suma, así como los límites inferior y superior de la suma.
- Inserte la expresión que desea sumar y pulse el signo igual.

$$\sum_{i=0}^{60} \frac{1}{1+i} = 4.696$$

El símbolo sumatoria puede ser insertado también desde el menú 1 de ventanas, sin embargo, este sumatoria no es exactamente el mismo que el anterior, ya que requiere la definición previa de una variable de intervalo.

El productoria funciona de la misma forma. Pulse simplemente **[Ctrl][Mayús]3** en lugar del anterior.

$$\prod_{i=0}^6 \left(\frac{4}{3} + i \right) = 1.113 \times 10^4$$

SUMAS DOBLES

Las sumas pueden anidarse para formar sumas dobles.

Para crear una suma doble, pulse **[Ctrl][Mayús]4** dos veces y rellene los espacios. Por ejemplo:

$$\sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{10} i \cdot j = 3.025 \times 10^3$$

$$\sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^i i \cdot j = 1.705 \times 10^3$$

o con un límite superior variable:

7) FUNCIONES

Pueden definir funciones casi de la misma forma que variables. Por ejemplo:

$$f(x) := x^2 + \sin(10 \cdot x)$$

Para usar una función, ponga un numero o una expresión en lugar de su argumento.

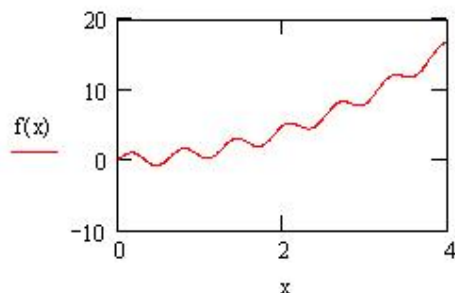
$$f(3) = 8.012$$

Las funciones se usan habitualmente con variables de intervalo.

$x := 1, 1.1 \dots 1.2$
 $f(x) =$

0.456
0.21
0.903

 <--- Escriba $f(x)=$
 o de gráficos --->
 $x := 0, .01 \dots 4$



FUNCIONES CON MÁS DE UNA VARIABLE

Las funciones pueden tener más de un argumento. Para definir una función de este tipo, separe los argumentos como sigue:

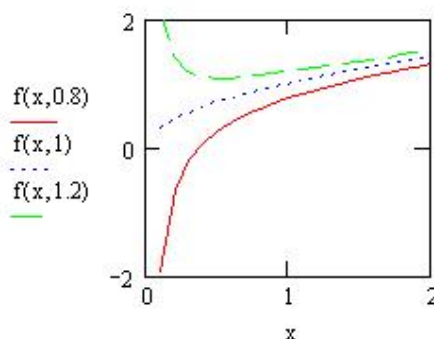
Una función de este tipo se usa como cualquier otra función.

$$f(x, y) := \sqrt{x} + \frac{\ln(y)}{x}$$

$$f(3, 1) = 1.732$$

$$f(5, 2) = 2.375$$

$$x := 0.1, 0.2 \dots 2$$



FUNCIONES INCORPORADAS

Mathcad cuenta con una gran cantidad de funciones incorporadas, algunas de gran complejidad.

Trigonométricas

$\text{sen}(z)$ $\text{cos}(z)$
 $\text{tg}(z)$ $\text{cosec}(z)$
 $\text{sec}(z)$ $\text{cotg}(z)$

Hiperbólicas

$\text{senh}(z)$ $\text{cosh}(z)$
 $\text{tgh}(z)$ $\text{cosech}(z)$
 $\text{sech}(z)$ $\text{cotgh}(z)$

Trig. e Hip. inversas

$\text{arcsen}(z)$ $\text{arcsenh}(z)$
 $\text{arccos}(z)$ $\text{arccosh}(z)$
 $\text{arctg}(z)$ $\text{arctgh}(z)$

Exponen. y logarít.

$\exp(z)$ e a la pot. de z
 $\ln(z)$ Log natural
 $\log(z)$ Log base 10

Varias

$\text{ceil}(x)$ Entero menor x
 $\text{floor}(x)$ Entero mayor x
 $\text{mod}(x, y)$ Resto de x/y con signo de x
 $\text{ángulo}(x, y)$ Ángulo eje x al punto (x, y)

Funciones complejas

$\text{Re}(z)$ Parte real de z

Im(z) Parte imaginaria de z

Arg(z) Argumento de z

Funciones condicionales

if(cond, valt, valf)

until(expr1, expr2)

$\delta(m,n)$ Función de Kronecker

$\Phi(x)$ Función de Heaviside

Otras Funciones

rnd(x) Función aleatoria entre 0 y x

lspline(vx,vy) Función spline cubico

erf(x) Función de error

fft(v) Transformada de Fourier

ifft(v) inversa de la transf. de Fourier

$\Gamma(x)$ Función gamma de Euler

J0(x), J1(x), Jn(m,x), K0(x), K1(x)

Kn(m,x) --> Funciones de Bessel

READ(fichero) leer ficheros de datos

WRITE(fichero) grabar fichero de datos

Funciones estadísticas

mean(v) valor medio del vector v

stdev(v) desviación standard

vat(v) varianza de v

slope(vx,vy) pendiente entre vectors vx e vy

intercept(vx,vy) ordenada en el origen de vx e vy

linterp(vx,vy,x) interpolación lineal

interp(vs,vx,vy,x) función de interpolación

Funciones con matrices y vectores

augment(A,B) Unir dos matrices

cols(M) Número de columnas

valprop(M) Vector de valores propios

vecprop(M,z) Vecprop de M de z

last(v) Índice del último elem. vector v.

max(M) Mayor elemento en M

min(M) Menor elemento en M

rows(M) Número de filas de M

tr(M) Suma de los elem. de la diagonal

La mayoría de estas funciones pueden usarse directamente, aunque algunas requieren algunas definiciones previas.

8) FORMATEO DE LOS RESULTADOS

Por defecto, Mathcad muestra los resultados con tres dígitos significativos. Por ejemplo:

$$\sqrt{2} = 1.414$$

Sin embargo, Mathcad almacena todos los números con quince dígitos significativos. Para ver el número mostrado arriba, tal y como Mathcad lo ve internamente:

- Haga clic en cualquier parte del número.
- Pulse **Ctrl+F**.
- Observe el mensaje en la parte inferior de la ventana.

Para no tener que pulsar **Ctrl+F** para ver el resultado completo, puede mostrar un resultado más completo directamente en documento. Para ello:

- Haga doble-clic en cualquier parte de la ecuación.
- En el cuadro de diálogo, cambie "Precisión de visualización" a "6" y pulse aceptar".

$$\sqrt{2} = 1.414214$$

En el cuadro anterior puede modificar otros parámetros sobre cómo Mathcad muestra los resultados.

9) UNIDADES

Es posible asociar unidades a cualquier variable o constante. Por ejemplo:

$x := 3 \cdot \text{cm}$ <-- Escriba "**x : 3 * cm**".

Al hacer que Mathcad muestre el resultado, se indicará que el resultado contiene unidades de "longitud" (en metros):

$$x = 0.03 \text{ m}$$

Mathcad muestra por defecto los resultados en términos de sus dimensiones fundamentales. Por ejemplo:

$$y := 33 \cdot \text{newton}$$

se muestra en términos de las dimensiones de fuerza:

$$y = 33 \text{ N}$$

Para mostrar resultados en términos de unidades habituales:

- Haga clic en cualquier parte de la ecuación. Observará un espacio vacío al final.
- Incluya el espacio vacío en un cuadro de selección.
- Elija **Insertar unidad** del menú **Matemát.**, haga clic en alguna unidad de la lista y haga clic en botón "Insertar".
- Haga clic en cualquier parte de fuera de la ecuación.

$$x = 3 \text{ cm}$$

$$y = 33 \text{ newton}$$

UNIDADES EN CÁLCULOS

Mathcad "arrastra" las unidades según va calculando. Por ejemplo:

$$3 \cdot \text{newton} \cdot 4 \cdot \text{cm} = 0.12 \text{ J}$$

Observe que las dimensiones de newtons y cm se desarrollan.

Como podría esperarse, no se puede sumar ni restar unidades diferentes. Por ejemplo:

$$3 \cdot \text{newton} + 4 \cdot \text{m} = \blacksquare$$

10) VECTORES Y MATRICES

Además de calcular con números simples (denominados *escalares*), Mathcad puede trabajar con columnas de números (*vectores*) o con *matrices*.

Creación de un vector

Para crear una columna que contenga los números 2, 4, y -10:

- Haga clic en un espacio vacío
- Elija **Matrices** del menú **Matemát.**, pulse **[Ctrl]+V**, o elija matrices en el menu de ventanas 2.
- Escriba "3" en el cuadro de "Filas", y "1" en el cuadro de "Columnas". Pulse "Crear".
- Rellene los espacios vacíos del vector con los valores. Haga clic en el espacio superior y escriba "2".

Haga clic en el siguiente (o pulse **[Tab]** para ir allí) y escriba "4"; y lo mismo para el espacio inferior y escriba "-10."

$$\begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ -10 \end{pmatrix}$$

Crear una matriz en Mathcad es tan fácil como crear un vector:

- Haga clic en un espacio vacío.
- Abra el cuadro de diálogo de **Matrices** (menú **Matemát.**, pulse **[Ctrl]+V** o elija matrices en el menu de ventanas 2. Escriba el número adecuado de filas y columnas en el cuadro de diálogo. Cree una matriz de 3 columnas por 2 filas.

Luego haga clic sobre "Crear".

- Rellene los espacios de la matriz con sus valores. Puede utilizar la tecla **[Tab]** para pasar de un espacio de la matriz a otro.

$$\begin{pmatrix} 2 & 6 & 3 \\ 5 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Para crear matrices de gran tamaño, se utilizan variables de intervalo o se pueden utilizarse datos de un archivo externo con las funciones READ(nombre fichero) o READPRN(nombre fichero), para datos estructurados..

Si desea cambiar el tamaño de un vector o de una matriz ya creados, puede borrar o insertar filas o columnas con facilidad.

Supongamos que ha definido la variable **M** como una matriz . . .

$$M := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

. . . y que desea borrar la tercera columna e insertar una fila entre la primera y la segunda.

Para borrar la tercera columna:

- Haga clic sobre el número de la parte superior de la tercera columna.
- Abra la ventana de diálogo de **Matrices**. Escriba el número de filas o columnas que desea eliminar.

Aquí, escriba "0" en el cuadro al lado de "Filas", y escriba "1" en el cuadro al lado de "Columnas". Luego haga clic sobre "Eliminar".

$$M := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Para insertar una fila entre la primera y la segunda:

- Haga clic sobre el número al principio de la primera fila.
- Abra el cuadro de diálogo de **Matrices**, escriba el número de filas o columnas que desea añadir. Aquí, escriba "1" en el cuadro al lado de "Filas", y escriba "0" en el cuadro al lado de "Columnas". Luego haga clic sobre "Introducir".
- Rellene los espacios de la matriz con sus valores.

$$M := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 2 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Para hacer referencia a elementos de un vector o de una matriz, use los *subíndices*, o números que representan las posiciones de los elementos de la matriz.

Mathcad empieza a contar los elementos de un vector o matriz a partir del elemento cero, pero puede modificarse la variable incorporada ORIGIN para que sea un número diferente (p. ej. 1), eligiendo

Variables incorporadas del menú **Matemát.**

... tiene los elementos del vector:

Por ejemplo, el vector **V**...

$$V := \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 5 \\ 7 \end{pmatrix}$$

$$V_0 = 1$$

$$V_1 = 2$$

$$V_2 = 5$$

$$V_3 = 7$$

Para escribir un subíndice:

- Escriba el nombre de una variable que represente un vector o una matriz.
- Escriba un corchete izquierdo "[" o pulse sobre la función "x_i" del menú 1 de ventanas. A continuación ponga un entero (o una pareja de enteros para una matriz) en el espacio vacío.

Para la matriz **M** mostrada a continuación, es necesario especificar dos números en el subíndice, el primero para la fila y el segundo para la columna:

$$M := \begin{pmatrix} 11 & 17 \\ 13 & 19 \end{pmatrix}$$

$$M_{0,0} = 11$$

$$M_{0,1} = 17$$

Los elementos de la matriz son:

$$M_{1,0} = 13$$

$$M_{1,1} = 19$$

También puede utilizar subíndices para *definir* elementos individuales de un vector o una matriz. Por ejemplo:

$$q_0 := 1$$

$$q_1 := -10$$

$$q_2 := 15$$

Entonces:

$$q = \begin{pmatrix} 1 \\ -10 \\ 15 \end{pmatrix}$$

Mathcad dispone de múltiples operadores y funciones incorporadas para vectores y matrices. Veamos algunos ejemplos:

Dados dos vectores, u y v ...

$$u := \begin{pmatrix} 0 \\ 0.5 \\ 1 \\ 1.5 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$v := \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 4.8 \\ 6 \\ 7 \end{pmatrix}$$

• Adición y sustracción vectoriales

$$u + v = \begin{pmatrix} 1 \\ 3.5 \\ 5.8 \\ 7.5 \\ 9 \end{pmatrix}$$

$$v - u = \begin{pmatrix} 1 \\ 2.5 \\ 3.8 \\ 4.5 \\ 5 \end{pmatrix}$$

• Adición, multiplicación y división escalares

$s := 6$... un escalar

$$u + s = \begin{pmatrix} 6 \\ 6.5 \\ 7 \\ 7.5 \\ 8 \end{pmatrix}$$

$$u \cdot s = \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 6 \\ 9 \\ 12 \end{pmatrix}$$

$$\frac{u}{s} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0.083 \\ 0.167 \\ 0.25 \\ 0.333 \end{pmatrix}$$

• Producto escalar

$$u \cdot v = 29.3$$

• Producto vectorial (definido solo para vectores de orden 3)

$$u \times v = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

• Modulo

$$|u| = 2.739$$

$$|v| = 10.865$$

• Suma de vectores

$$\sum u = 5$$

$$\sum v = 21.8$$

• Funciones estadísticas y otras

$\text{mean}(v) = 4.36$... media de los elementos del vector

$\text{stdev}(u) = 0.707$... desviación estándar

$\text{last}(u) = 4$... índice del último dato del vector u

$\text{corr}(v, u) = 0.989$... correlación

$\text{slope}(u, v) = 3$... pendiente

$\text{intercept}(u, v) = 1.36$... valor de v cuando $u = 0$, supuesta regresión lineal

$\text{lininterp}(u, v, 2) = 7$... valor de y para $x=5$ según la interpolación lineal de $u(x)$ vs $v(y)$

$V := \text{lspline}(u, v)$... función de spline cúbico de los vectores $u(x)$ vs $v(y)$

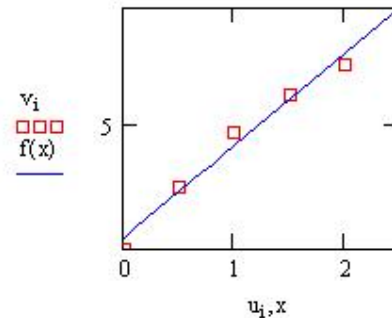
$\text{interp}(V, u, v, 2) = 7$... interpolación según la función de spline cúbica

veamos un ejemplo de como representar u frente a v y efectuar la regresión lineal de ellos

- primero hay que definir la variable de intervalo correspondiente $i := 0..last(u)$
- a continuación se define la función lineal que mejor se ajusta a dichos vectores y se define otra variable de intervalo x , para la representación.
- Por último se efectúa la representación gráfica

$$f(x) := \text{intercept}(u, v) + \text{slope}(u, v) \cdot x$$

$$x := 0..2.5$$



Mathcad también proporciona operadores y funciones incorporados para el cálculo con matrices. Dadas dos matrices, A y B . . .

$$A := \begin{pmatrix} 1 & 3 & 0 \\ 1 & -1 & -7 \\ 1 & 4 & 2 \end{pmatrix}$$

$$B := \begin{pmatrix} 9 & 13 & -1 \\ 17 & 0 & -6 \\ 1 & 4 & 21 \end{pmatrix}$$

• Adición y sustracción de matrices

$$A + B = \begin{pmatrix} 10 & 16 & -1 \\ 18 & -1 & -13 \\ 2 & 8 & 23 \end{pmatrix}$$

$$A - B = \begin{pmatrix} -8 & -10 & 1 \\ -16 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -19 \end{pmatrix}$$

• Adición, multiplicación y división escalares

$s := 6$. . . un escalar

$$B \cdot s = \begin{pmatrix} 54 & 78 & -6 \\ 102 & 0 & -36 \\ 6 & 24 & 126 \end{pmatrix}$$

$$A + s = \begin{pmatrix} 7 & 9 & 6 \\ 7 & 5 & -1 \\ 7 & 10 & 8 \end{pmatrix}$$

$$\frac{A}{s} = \begin{pmatrix} 0.167 & 0.5 & 0 \\ 0.167 & -0.167 & -1.167 \\ 0.167 & 0.667 & 0.333 \end{pmatrix}$$

• Multiplicación de matrices

$$A \cdot B = \begin{pmatrix} 60 & 13 & -19 \\ -15 & -15 & -142 \\ 79 & 21 & 17 \end{pmatrix}$$

• Potencias de matrices e inversa de matrices

$$B^2 = \begin{pmatrix} 301 & 113 & -108 \\ 147 & 197 & -143 \\ 98 & 97 & 416 \end{pmatrix}$$

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} -26 & 6 & 21 \\ 9 & -2 & -7 \\ -5 & 1 & 4 \end{pmatrix}$$

• **Determinante**

$$|A| = -1$$

$$|B| = -4.571 \times 10^3$$

• **Operador columna**

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 0 \\ 1 & -1 & -7 \\ 1 & 4 & 2 \end{pmatrix}$$

$$A_{\langle 0 \rangle} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

• **Transposición**

$$A^T = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 3 & -1 & 4 \\ 0 & -7 & 2 \end{pmatrix}$$

• **Valores propios y vectores propios**

... valores propios de una matriz

$$\text{eigenvals}(A) = \begin{pmatrix} -0.042 \\ 1.021 + 4.8i \\ 1.021 - 4.8i \end{pmatrix}$$

... vector propio correspondiente a un valor propio específico

$$\text{eigenvec}(A, \text{eigenvals}(A)_0) = \begin{pmatrix} -0.93 \\ 0.323 \\ -0.177 \end{pmatrix}$$

• **Funciones Identidad y Aumentar**

... matriz identidad del tamaño especificado

$$\text{identity}(2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\text{augment}(A, B) = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 0 & 9 & 13 & -1 \\ 1 & -1 & -7 & 17 & 0 & -6 \\ 1 & 4 & 2 & 1 & 4 & 21 \end{pmatrix}$$

• **Funciones varias**

$\text{rows}(A) = 3$... número de filas

$\text{cols}(B) = 3$... número de columnas

11) RESOLUCION DE ECUACIONES

MathCad utiliza tres formas de resolver ecuaciones numéricamente.

LA FUNCIÓN root

Se utiliza cuando se quiere resolver una ecuación con una incógnita. Consiste en aplicar el método de Newton y requiere un valor inicial o de prueba, no necesariamente aproximado:

Resolver para x en:

$$x^2 + \sqrt{x} = 2$$

valor de prueba --> $x := 3$

$$\text{root}\left[\left(x^2 + \sqrt{x} - 2, x\right) = 1\right]$$

INVERSIÓN DE MATRICES

Se utiliza cuando se tiene un sistema de ecuaciones lineal. Por ejemplo, para resolver:

$$x + y = 3$$

y

$$2 \cdot x - 3 \cdot y = 2$$

Piense en términos de ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & -3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Para la cual la solución es simplemente:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & -3 \end{pmatrix}^{-1} \cdot \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.2 \\ 0.8 \end{pmatrix}$$

BLOQUES DE RESOLUCIÓN

Los bloques de resolución son la técnica más universal de todas. He aquí un ejemplo de solución de dos ecuaciones con dos incógnitas:

Primero, defina los valores estimados:

$$x := 3$$

$$y := 4$$

Luego escriba la palabra clave "given", seguida de las ecuaciones a resolver.

Given

$$x + 2 \cdot y^2 = 3 \quad \text{Asegúrese de que genera este signo de igual con [Ctrl]+ .}$$

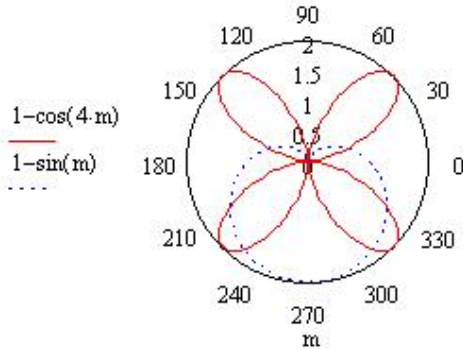
$$3 \cdot x - y^2 = 4 \quad \text{Use la función incorporada "find(x,y) para obtener un vector de soluciones.}$$

$$\text{Find}(x, y) = \begin{pmatrix} 1.571 \\ 0.845 \end{pmatrix}$$

12) GRÁFICOS POLARES

$m := 0 \cdot \text{deg}, 1 \cdot \text{deg} \dots 360 \cdot \text{deg}$

- Los gráficos polares suelen contener una variable de rango, así que comience por crear una variable "m" que vaya de 0 a 360 grados.



- Haga clic donde quiera colocar el gráfico y elija **Crear gráfico polar** del menú **Gráf.**
- Escriba una ecuación adecuada en el espacio de la izquierda, como por ejemplo: " $1-\cos(4m)$ ". Escriba "m" en el espacio inferior.
- Haga clic fuera del gráfico para verlo.

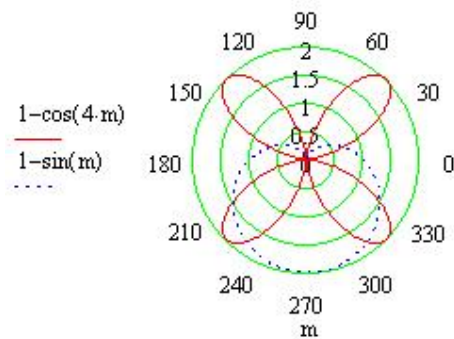
GRÁFICOS POLARES- TRAZOS MÚLTIPLES

Puede trazar varias curvas en el mismo gráfico polar, separando las expresiones por una coma. Por ejemplo, para añadir la curva " $1-\sin(m/4)$ " al ejemplo anterior:

- Incluya la expresión radial en un cuadro de selección.
- Escriba una coma, para crear un nuevo espacio nuevo.
- Escriba la expresión " $1-\sin(m)$ " en este espacio y haga clic fuera de la región para ver el gráfico.

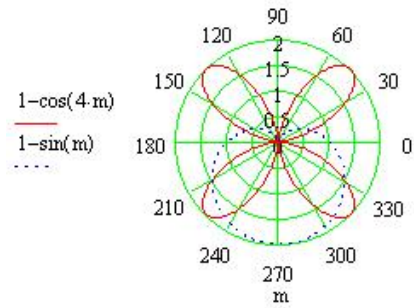
FORMATEO DE GRÁFICOS POLARES

Puede modificar la apariencia de los gráficos polares modificando el tipo de trazo, las escalas de los ejes y las líneas de retícula. Los ejemplos que siguen muestran el mismo gráfico polar del ejemplo, utilizando formatos diferentes.

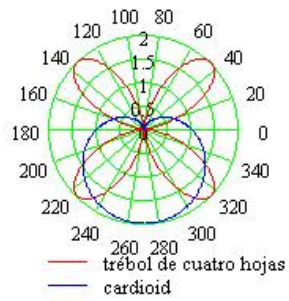


Para ver los ajustes de formato de un gráfico, haga doble clic en el gráfico.

Con líneas de retícula radiales. ----
-->



Con líneas de retícula radiales y angulares.



Con leyenda pero ocultando
los argumentos ----->

13) GRÁFICOS DE SUPERFICIES

Mathcad puede representar de forma tri-dimensional los datos contenidos en una matriz, mediante un gráfico de superficies.

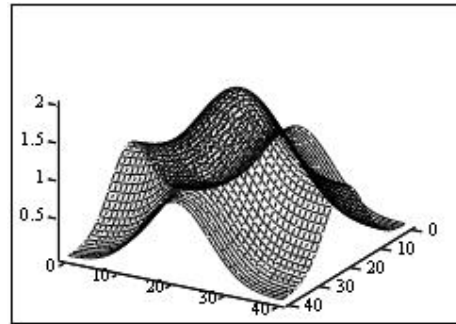
Primero cree una matriz con los valores que desea trazar, una opción para esto es a través de una función, como se muestra a continuación:

$$i := 0..40$$

$$j := 0..40$$

- Elija **Crear gráfico de superficies** del menú **Gráf.**, o pulse **[Ctrl]+2**, o elija el icono correspondiente del menú 2 de ventanas de la izquierda. Mathcad muestra un cuadro con un espacio vacío.

$$M_{i,j} := \cos\left(\frac{i-20}{20}\right)^{10} + \cos\left(\frac{j-20}{20}\right)^{10}$$



M

- Haga clic en el espacio bajo el cuadro y escriba el nombre de la matriz **M**.
- Haga clic fuera del gráfico, o pulse **[F9]**.

Mathcad muestra el gráfico de superficies.

Es posible que matrices grandes tarden unos segundos en trazarse.

Mathcad proporciona muchas opciones de formato para los gráficos de superficies: cambiando la perspectiva, la ampliación de la escala vertical, ocultando líneas, modificando el sombreado o mostrando la superficie como *gráfico de áreas*.

Para ver las opciones de formato de un gráfico, haga clic en el gráfico y elija **Formato de gráfico de superficies** del menú **Gráf.**, o simplemente haga doble clic sobre dicho gráfico

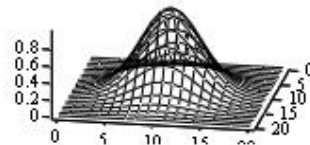
$$N := 20$$

$$i := 1..N$$

$$j := 1..N$$

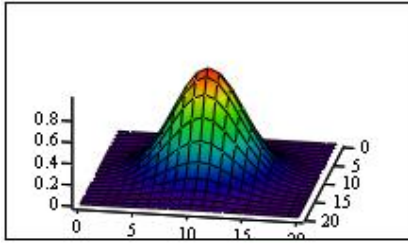
Primero, con los ajustes por defecto . . .

$$G_{i,j} := e^{-\frac{\left(i-\frac{N}{2}\right)^2 + \left(j-\frac{N}{2}\right)^2}{N}}$$



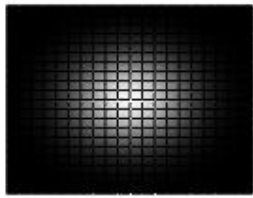
G

. . . con sombreado en colores . . .

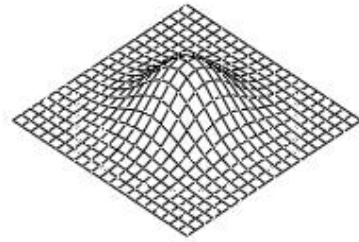


G

. . . con sombreado de escala de grises, sin rotación y con una inclinación de 90° .
. . . con una escala vertical muy reducida . . .



G



G

14) GRÁFICOS DE CURVAS DE NIVEL

En Mathcad pueden mostrar gráficos de curvas de nivel. Para ello:

- Cree una matriz, cuyos valores representen alturas sobre el plano x-y. Por ejemplo:

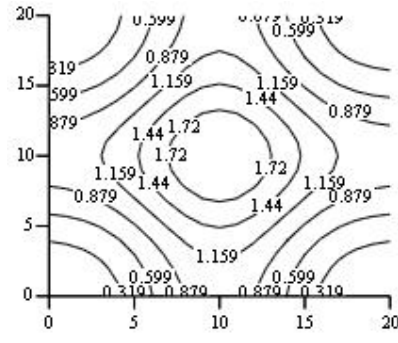
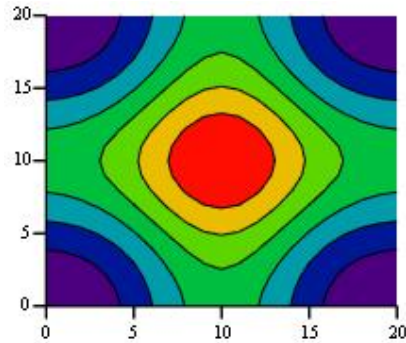
$$\begin{aligned} m &:= 0..20 \\ n &:= 0..20 \\ Z_{m,n} &:= \cos(0.1 \cdot m - 1)^7 + \cos(0.1 \cdot n - 1)^6 \end{aligned}$$

- Elija **Crear gráfico de curvas de nivel** del menú de **Gráf..**
- Escriba el nombre de la matriz en el espacio vacío y haga clic fuera del gráfico.

Pueden cambiarse múltiples características de un gráfico de curvas de nivel, como por ejemplo, el número de líneas de retícula o si el espacio entre las líneas se colorea o se sombrea.

Para ello:

- Haga doble-clic sobre el gráfico de curvas de nivel. Mathcad muestra un cuadro de diálogo. Los ejemplos que siguen muestran algunos ejemplos:
 . . sin numerar, y con los espacios entre curvas coloreados.
 . . . Número de curvas reducido a 6.



15) SIMBÓLICO

Mathcad puede manipular símbolos al igual que números utilizando Maple (Waterloo Maple Software Inc). Para realizar cálculos simbólicos, elija **Iniciar procesador simbólico** del menú **Simbólico**. Veamos algunos ejemplos de cálculo simbólico:

Simplificación

Es posible simplificar expresiones muy complejas, simplemente con una opción de menú. Supongamos que desea simplificar:

$$\left[\frac{x^3 - y^3}{(x - y)} \right] - x \cdot y + \frac{x^2}{3} + \sec(x)^2 - \tan(x)^2$$

- Primero haga clic en la expresión. Asegúrese de que está completamente rodeada por el cuadro de selección azul.
- Luego elija **Simplificar** del menú **Simbólico**.

Aparece esta expresión -----> $\frac{4}{3} \cdot x^2 + y^2 + 1$

Factorización

Para factorizar:

$$x^3 + 6 \cdot x^2 \cdot y + 11 \cdot x \cdot y^2 + 6 \cdot y^3$$

- Haga clic en la expresión y selecciónela utilizando la flecha arriba, hasta que esté completamente incluida en el cuadro de selección.
- Luego elija **Factorizar expresión** del menú **Simbólico**.

Aparece esta expresión -----> $(x + 3 \cdot y) \cdot (x + y) \cdot (x + 2 \cdot y)$

Diferenciación simbólica

Para efectuar la evaluación simbólica de una derivada, como por ejemplo:

- Haga clic en la expresión y selecciónela utilizando la flecha arriba, hasta que esté completamente incluida en el cuadro de selección azul.

$$\frac{d^2}{dz^2} z \cdot \arctan(z)$$

- Luego elija **Evaluar simbólicamente** del menú **Simbólico**.

El procesador simbólico mostrará el resultado. -----> $\frac{2}{(1 + z^2)} - 2 \cdot \frac{z^2}{(1 + z^2)^2}$

Por otra parte, el menú **Simbólico** contiene un comando específico, **Diferenciar para variable**, que diferencia la expresión respecto a la variable seleccionada.

$$\frac{x + a}{x^2 + b}$$

Supongamos que desea diferenciar:
respecto a la variable **x**.

- Primero haga clic en la expresión al lado de la variable **x** o incluya la variable **x** en un cuadro de selección.
- Luego elija **Diferenciar para variable** del menú **Simbólico**. El procesador simbólico mostrará el resultado.

Aparece esta expresión ----->

$$\frac{1}{(x^2 + b)} - 2 \cdot \frac{(x + a)}{(x^2 + b)^2} \cdot x$$

Integración simbólica

Para efectuar la evaluación simbólica de una integral definida, como por ejemplo:

- Primero incluya la expresión en un cuadro de selección haciendo clic en la expresión y utilizando la flecha arriba.

$$\int_1^t x \ln(x) dx$$

- Luego elija **Evaluar simbólicamente** del menú **Simbólico**.

Aparece esta expresión ----->

$$\frac{1}{2} \cdot \ln(|t|) \cdot t^2 - \frac{1}{4} t^2 + \frac{1}{4} + \frac{1}{2} \cdot i \cdot \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cdot \text{signum}(t) \right) \cdot \pi \cdot t^2$$

Mathcad puede igualmente ayudarle a hallar simbólicamente integrales *indefinidas*, si existe la solución simbólica (espacio cerrado).

$$\frac{a + e^{-x}}{x^2}$$

Supongamos que desea integrar:
respecto a la variable **x**.

- Primero haga **clic** en la expresión al lado de la variable **x** o incluya la variable **x** en un cuadro de selección.
- Luego elija **Integrar para variable** del menú **Simbólico**. Si la integral es demasiado grande para ser mostrada en pantalla, Mathcad pondrá el resultado en el portapapeles (en forma de texto).

Aparece esta expresión ----->

$$\frac{-a}{x} - \frac{1}{x} \cdot \exp(-x) + \text{Ei}(1, x)$$

Los resultados simbólicos pueden contener funciones especiales, como la función Z de Riemann, Z(x), la función integral logarítmica Ei(x), etc. Para una definición de estas funciones ver <<Ayuda/Índice/buscar/funciones especiales>>

Resolución simbólica

El procesador simbólico le permitirá reorganizar fácilmente una ecuación para expresar una variable en términos de una expresión o hallar la raíz de una expresión.

Por ejemplo, supongamos que desea resolver para la variable **x** de la expresión:

$$\frac{x}{(1 + x^2)} = y$$

- Primero, asegúrese de que utilizó **[Ctrl]+** (el signo de igualdad lógica) para crear el símbolo de igualdad de la ecuación.

Aparece esta expresión ----->

- Haga clic en la expresión al lado de la variable **x** o incluya la variable **x** en un cuadro de selección.
- Luego elija **Resolver para variable** del menú **Simbólico**. Si hay más de una solución, Mathcad mostrará el resultado en forma de vector.

$$\left[\begin{array}{l} \frac{-1}{(2 \cdot y)} \cdot (-1 + \sqrt{1 - 4 \cdot y^2}) \\ \frac{-1}{(2 \cdot y)} \cdot (-1 - \sqrt{1 - 4 \cdot y^2}) \end{array} \right]$$

16) SMARTMATH

Cuando SmartMath está activado, se dispone de dos características más:

- **Simbólico activo:** Permite obtener resultados simbólicos con la misma facilidad que los resultados numéricos.
- **Optimizar:** Transforma lo que se introduce en una forma que aumenta la eficacia del cálculo. Antes de continuar, abra el menú **Matemát.** y asegúrese de que la opción **SmartMath** tenga la marca de verificación. Si no la tiene, elija **SmartMath** del menú **Matemát.**

SIMBÓLICO ACTIVO

Al utilizar el signo de igualdad simbólica, " \rightarrow ", Mathcad devolverá lo que se encuentre en el lado izquierdo de forma simplificada en el lado derecho. Por ejemplo:
Para utilizar el signo de igualdad simbólica:

- Escriba la expresión que desea evaluar simbólicamente y asegúrese de que está seleccionada

$$\int_c^b t^4 + 3 \cdot t \, dt \rightarrow \frac{1}{5} \cdot b^5 + \frac{3}{2} \cdot b^2 - \frac{1}{5} \cdot c^5 - \frac{3}{2} \cdot c^2$$

- Pulse **[Ctrl][Punto]** para generar el " \rightarrow ".
- Haga clic fuera de la región. Mathcad rellenará el espacio con el resultado.

PERSONALIZACION DEL SIMBOLO " \rightarrow "

Puede controlar el modo en que el " \rightarrow " evalúa una expresión escribiendo una palabra clave antes de la expresión. Por ejemplo:

1. Desarrolle una multiplicación:

$$(t + 1) \cdot (t - 1) \text{ expand} \rightarrow t^2 - 1$$

2. Factorice una expresión:

$$t^2 - 1 \text{ factor} \rightarrow (t + 1) \cdot (t - 1)$$

3. Simplifique una expresión:

$$\sin(t)^2 + \cos(t)^2 \text{ simplify} \rightarrow 1$$

OPTIMIZACION DE ECUACIONES

SmartMath aumenta la "inteligencia" de Mathcad en el cálculo matemático. Por ejemplo, la integral que sigue tiene un espacio cerrado simple. Sin embargo, sin la ayuda de SmartMath, Mathcad tiene que usar un algoritmo de integración numérica para evaluarla.

$$\begin{aligned} a &:= 4 \\ x &:= \int_0^a \int_0^a \int_0^a x^2 + y^2 + z^2 \, dx \, dy \, dz \\ x &= 1.024 \times 10^3 \end{aligned}$$

Para hacerse una idea de la cantidad de tiempo que puede tomar este cálculo, pruebe a cambiar el valor de "a" y vea lo que se tarda en evaluar la integral.

La integral que sigue parece igual a la anterior, salvo que la palabra clave "optimizar" le dice a Mathcad que resuelva la integral inteligentemente.

Como se le dijo a Mathcad que se comportara de forma inteligente, encontró el espacio cerrado. Haga doble-clic sobre la estrella roja para verlo.

$$a := 4$$

optimuze

$$x := \int_0^a \int_0^a \int_0^a x^2 + y^2 + z^2 \, dx \, dy \, dz$$

$$x = 1.024 \times 10^3$$

Ahora cambie el valor de "a". En lugar de comenzar el cálculo integral numérico desde el principio, Mathcad lo resuelve de forma inteligente, es decir que usa directamente la expresión del espacio cerrado que se oculta tras la estrella roja.

En el último ejemplo hubo que escribir la palabra clave "optimizar" para hacer que Mathcad se ocupara "inteligentemente" de la asignación que se encontraba a continuación.

Puede hacer que Mathcad optimice todas las asignaciones eligiendo **Controles SmartMath** del menú **Matemát.** y activando la opción **Optimizar** del menú que emerge a la derecha.

Con **Optimizar** activado, Mathcad intentará encontrar soluciones de espacio cerrado para todas las asignaciones, salvo las precedidas por la palabra clave "literalmente".

17) TEXTO

Mathcad supone por defecto que todo lo que se escribe está en una "región de matemáticas".
Para crear una región de texto:

- Escriba unas comillas. El cursor en forma de cruz se convierte en una línea vertical, denominada "punto de inserción".
- Comience a escribir texto. Utilice las flechas izquierda y derecha para desplazarse por el texto.
- Cuando haya terminado, haga clic fuera del texto. Pulsar **[Intro]** simplemente añade un retorno de carro, sin salirse de la región de texto.

FRANJAS DE TEXTO

Las regiones de texto son muy adecuadas para textos cortos en cualquier parte del documento. Sin embargo, si desea escribir gran cantidad de texto, le serán más útiles las franjas de texto porque, a diferencia de las regiones:

- las franjas de texto van de lado a lado de la página;
- las franjas de texto abren espacio al escribir, empujando otras regiones hacia abajo.

Para crear una franja de texto:

- Haga clic en un espacio vacío. Asegúrese de que no hay otras regiones a la derecha o a la izquierda de donde hizo clic.
- Pulse **[Ctrl]+T**.

CAMBIO DEL TIPO DE LETRA DEL TEXTO

Para cambiar el tipo de letra de todo el texto, elija **Cambiar tipo de letra por defecto...** del menú **Texto**.

Para cambiar el tipo de letra de un texto seleccionado:

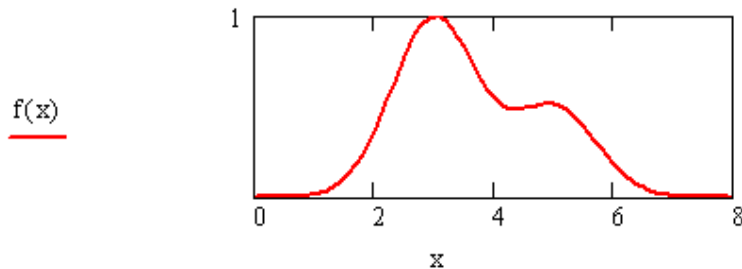
- Seleccione el texto arrastrando el ratón sobre el mismo.
- Elija **Cambiar tipo de letra** del menú **Texto**.
- Elija el tipo de letra, tamaño y estilo deseados del cuadro de diálogo.

RELACIÓN DE COMPLETITUD

Supongamos una función cualquiera, por ejemplo:

$$f(x) := e^{-(x-3)^2} + 0.5 \cdot e^{-(x-5)^2}$$

$$x := 0..8$$



Consideremos asimismo un conjunto completo de funciones ortogonales.

Estas funciones son las soluciones del sistema:

partícula en una caja de potenciales

de paredes infinitas

$$\phi(x, n, a) := \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{n \cdot \pi \cdot x}{a}\right)$$

donde $n = 1, 2, \dots$, es un número entero (cántico)

y a el tamaño de la caja de potenciales

La función $f(x)$, con rango de existencia entre $0 < x < a$, puede definirse como

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cdot \phi(x, n)$$

Relación de Completitud

los coeficientes c_n pueden calcularse a partir de

$$c_n = \int_0^a f(x) \cdot \phi(x, n) \, dx$$

Veamos un ejemplo: Supongamos que vamos a calcular los 15 primeros coeficientes c_n y que $a=8$

ORIGIN := 1

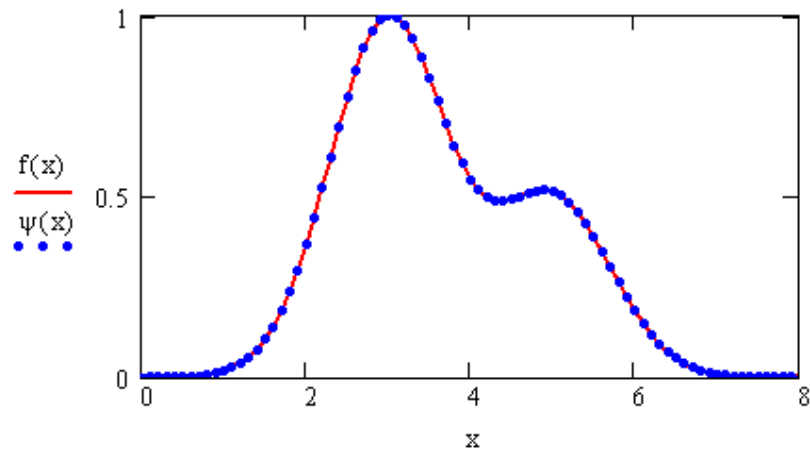
$n := 1..15$

$a := 8$

$$c_n := \int_0^a f(x) \cdot \phi(x, n, a) \, dx$$

Definamos ahora la función

$$\psi(x) := \sum_{n=1}^{15} c_n \cdot \phi(x, n, a)$$

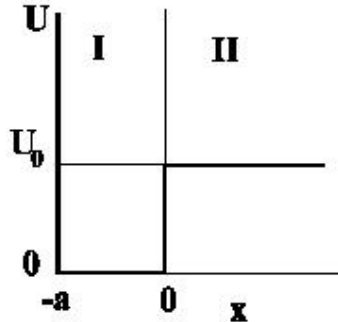


La coincidencia entre las dos funciones es total

Repetir el cálculo utilizando valores de n inferiores, hasta que las funciones dejen de coincidir

Efecto Tunnel

Supongamos un perfil de potenciales como el de la Figura



en la región I:

$$\psi_I = A \cdot e^{i \cdot \alpha \cdot x} + B \cdot e^{-i \cdot \alpha \cdot x}$$

siendo

$$\alpha = \frac{2 \cdot \pi \cdot \sqrt{2 \cdot m \cdot E}}{h}$$

$$\psi_{II} = D \cdot e^{-\beta \cdot x}$$

en la región II:

siendo

$$\beta = \frac{2 \cdot \pi \cdot \sqrt{2 \cdot m \cdot (U_0 - E)}}{h}$$

La constante B en función de la constante A, se obtiene a partir de la relación de continuidad $\Psi_I(x=-a) = 0$.

$$B = -A \cdot e^{-2 \cdot i \cdot \alpha \cdot a}$$

La constante D en función de la constante A, se obtiene a partir de la relación de continuidad $\Psi_I(x=0) = \Psi_{II}(x=0)$.

$$D = A \cdot (1 - e^{-2 \cdot i \cdot \alpha \cdot a})$$

La Energía se obtiene a partir de la relación de continuidad de la primera derivada de las funciones en $x = 0$
 $\delta \Psi_I / \delta x [x=0] = \delta \Psi_{II} / \delta x [x=0]$.

Ecuación que nos da cuenta de los estados cuanticos permitidos con $E < U_0$

$$\sqrt{\frac{E}{U_0 - E}} = -\tan\left(\frac{2 \cdot \pi \cdot \sqrt{2 \cdot m \cdot E}}{h} \cdot a\right)$$

Para analizar un ejemplo elegiremos arbitrariamente que

$$\frac{2 \cdot \sqrt{2 \cdot m}}{h} \cdot a = 1$$

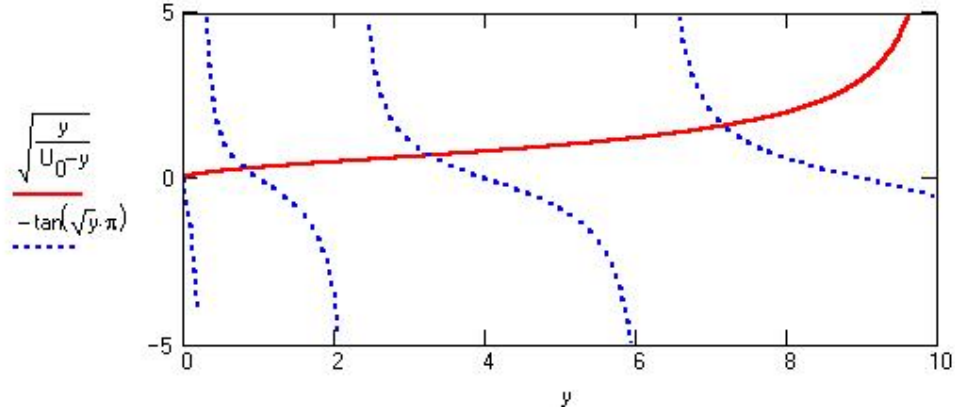
$$U_0 := 10$$

luego:

$$\sqrt{\frac{E}{10 - E}} = -\tan(\pi \cdot \sqrt{E})$$

Esta ecuación tiene tres soluciones reales como puede verse en la gráfica siguiente, en la cual se representan los dos lados de la igualdad

$$y := 0, 0.02 \dots 10$$



Para obtener las soluciones numéricas se parte de tres valores aproximados

$$x1 := 1$$

$$x2 := 3$$

$$x3 := 7$$

y se define la función

$$f(E) := \sqrt{\frac{E}{U_0 - E}} + \tan(\sqrt{E} \cdot \pi)$$

Las soluciones serán

$$E1 := \text{root}(f(x1), x1)$$

$$E1 = 0.823$$

$$E2 := \text{root}(f(x2), x2)$$

$$E2 = 3.263$$

$$E3 := \text{root}(f(x3), x3)$$

$$E3 = 7.174$$

Llamando $y=x/a$ y sin escribir la constante A de normalización, las soluciones en cada región del espacio serán en la región I:

$$\psi I(y, E) := \left[e^{i \cdot \pi \cdot \sqrt{E} \cdot y} - e^{-i \cdot \pi \cdot \sqrt{E} \cdot (y+2)} \right]$$

en la región II:

$$\psi II(y, E) := \left(1 - e^{-i \cdot 2 \cdot \pi \cdot \sqrt{E}} \right) \cdot e^{-\pi \cdot y \cdot \sqrt{U_0 - E}}$$

Las funciones son ahora normalizadas, calculando la constante A. El límite superior de la segunda integral (2) debe ser lo suficientemente grande como para que la integral sea constante

$$N1 := \int_{-1}^0 \overline{\psi I(y, E1)} \cdot \psi I(y, E1) dy + \int_0^{\infty} \overline{\psi II(y, E1)} \cdot \psi II(y, E1) dy$$

$$A1 := \frac{1}{\sqrt{N1}}$$

$$N2 := \int_{-1}^0 \overline{\psi I(y, E2)} \cdot \psi I(y, E2) dy + \int_0^{\infty} \overline{\psi II(y, E2)} \cdot \psi II(y, E2) dy$$

$$A2 := \frac{1}{\sqrt{N2}}$$

$$N3 := \int_{-1}^0 \overline{\psi I(y, E3)} \cdot \psi I(y, E3) dy + \int_0^{\infty} \overline{\psi II(y, E3)} \cdot \psi II(y, E3) dy$$

$$A3 := \frac{1}{\sqrt{N3}}$$

A continuación pueden calcularse las funciones de probabilidad

$$P1(x, E, A) := \psi I(x, E) \cdot \psi I(x, E) \cdot A^2$$

$P2(x, E, A) := \overline{\psi II(x, E) \cdot \psi II(x, E) \cdot A^2}$
 $P(x, E, A) := \text{if}(x \leq 0, P1(x, E, A), P2(x, E, A))$
 $i := 0 \dots 150$

$z_i := -1 + \frac{i}{100}$

$PE1_i := P(z_i, E1, A1)$

Funciones de probabilidad

$PE2_i := P(z_i, E2, A2)$

$PE3_i := P(z_i, E3, A3)$

Con objeto de dibujar la curva de energía potencial distancia se define:

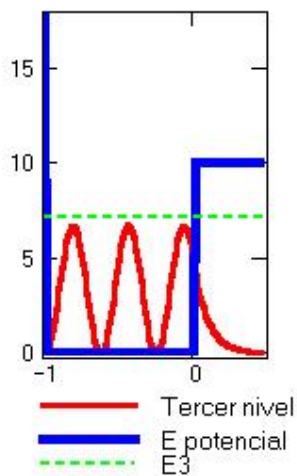
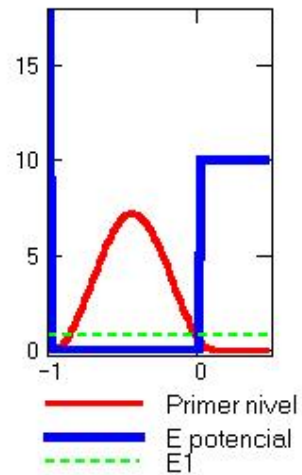
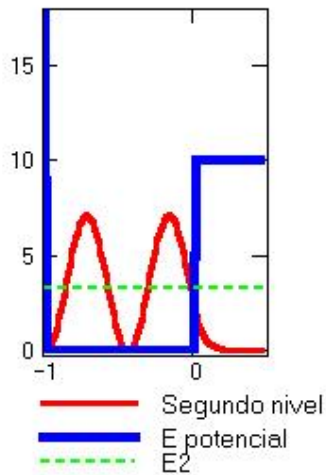
$j := 0 \dots 200$

$f1(x) := \text{if}(x \leq -1, 18, 0)$

$f2(x) := \text{if}(x \leq 0, f1(x), U_0)$

$r_j := -1.5 + \frac{j}{100}$

$V_j := f2(r_j)$



PARTÍCULA EN UNA CAJA DE POTENCIALES BIDIMENSIONAL DE PAREDES INFINITAS

Tamaño de la caja de potenciales

$$a := 1$$

$$b := 1$$

Función de onda

$$f(nx, ny, x, y) := \frac{2}{\sqrt{a \cdot b}} \cdot \sin\left(\frac{nx \cdot \pi \cdot x}{a}\right) \cdot \sin\left(\frac{ny \cdot \pi \cdot y}{b}\right)$$

Numero de puntos a calcular en cada eje

$$i := 0..50$$

$$j := 0..50$$

Cálculo de las coordenadas x-y

$$X_i := \frac{i}{50} \cdot a$$

$$Y_j := \frac{j}{50} \cdot b$$

Asignación de números cuánticos

$$nx := 1$$

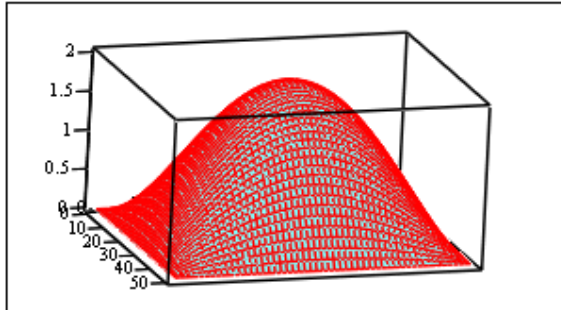
$$ny := 1$$

Cálculo de la función de onda

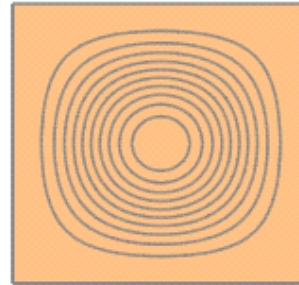
$$M_{i,j} := f(nx, ny, X_i, Y_j)$$

y de su cuadrado

$$N_{i,j} := f(nx, ny, X_i, Y_j)^2$$



M



N

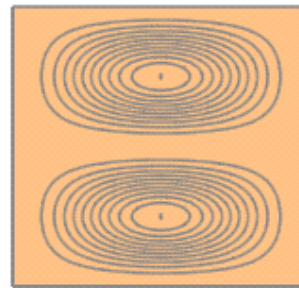
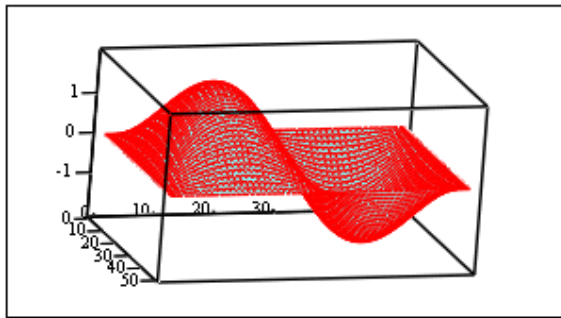
A continuación se repiten los cálculos para diferentes valores de números cuánticos:

$$nx := 1$$

$$ny := 2$$

$$M_{i,j} := f(nx, ny, X_i, Y_j)$$

$$N_{i,j} := f(nx, ny, X_i, Y_j)^2$$



N

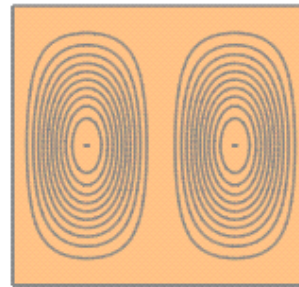
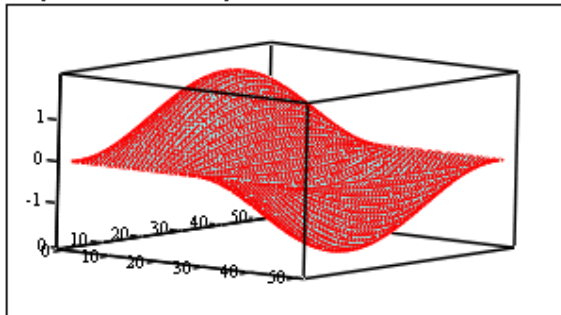
M

$nx := 2$

$ny := 1$

$$M_{i,j} := f(nx, ny, X_1, Y_j)$$

$$N_{i,j} := f(nx, ny, X_1, Y_j)^2$$



N

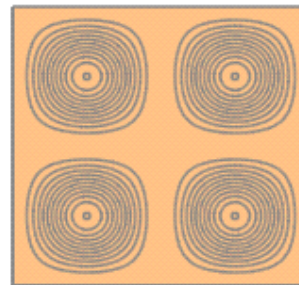
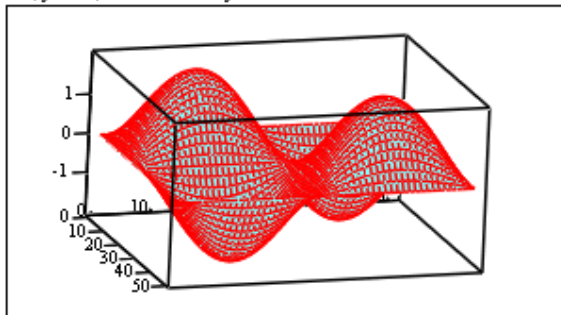
M

$nx := 2$

$ny := 2$

$$M_{i,j} := f(nx, ny, X_1, Y_j)$$

$$N_{i,j} := f(nx, ny, X_1, Y_j)^2$$



N

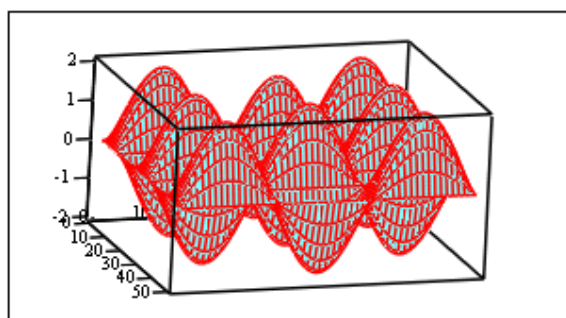
M

$nx := 5$

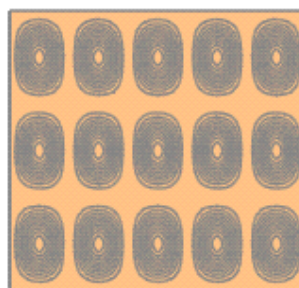
$ny := 3$

$$M_{i,j} := f(nx, ny, X_1, Y_j)$$

$$N_{i,j} := f(nx, ny, X_1, Y_j)^2$$



M



N

EL OSCILADOR ARMÓNICO

$$\beta = \frac{\sqrt{km}}{\hbar} = \frac{2\pi \cdot \nu \cdot m}{\hbar}$$

Para resolver el sistema correspondiente al Oscilador Armónico, se efectúa el siguiente cambio de variable:

La solución general, para $\nu > 0$, puede expresarse mediante las relaciones:

$$C(\nu, \beta) := \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2^{\nu} \cdot \nu!}}$$

$$H(\nu, q) := (-1)^{\nu} \cdot e^{q^2} \cdot \frac{d^{\nu}}{dq^{\nu}} e^{-q^2}$$

$$\Psi(\nu, q, \beta) := C(\nu, \beta) \cdot H(\nu, q) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}}$$

Para $\nu=0$

$$\Psi_0(q, \beta) := C(0, \beta) \cdot e^{-\frac{q^2}{2}}$$

Las diferentes funciones de onda pueden ser obtenidas de forma simbólica:

$$\Psi_0(q, \beta) \text{ simplify} \rightarrow \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \cdot \beta^{\frac{1}{4}} \cdot \exp\left(\frac{-1}{2} \cdot q^2\right)$$

$$\Psi(1, q, \beta) \text{ simplify} \rightarrow \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \cdot \beta^{\frac{1}{4}} \cdot 2^{\frac{1}{2}} \cdot q \cdot \exp\left(\frac{-1}{2} \cdot q^2\right)$$

$$\Psi(2, q, \beta) \text{ simplify} \rightarrow \frac{1}{2 \cdot \pi^{\frac{1}{4}}} \cdot \beta^{\frac{1}{4}} \cdot 2^{\frac{1}{2}} \cdot (-1 + 2 \cdot q^2) \cdot \exp\left(\frac{-1}{2} \cdot q^2\right)$$

$$\Psi(3, q, \beta) \text{ simplify} \rightarrow \frac{1}{3 \cdot \pi^{\frac{1}{4}}} \cdot \beta^{\frac{1}{4}} \cdot 3^{\frac{1}{2}} \cdot q \cdot (-3 + 2 \cdot q^2) \cdot \exp\left(\frac{-1}{2} \cdot q^2\right)$$

$$\Psi(4, q, \beta) \text{ simplify} \rightarrow \frac{1}{12 \cdot \pi^{\frac{1}{4}}} \cdot \beta^{\frac{1}{4}} \cdot 6^{\frac{1}{2}} \cdot (3 - 12 \cdot q^2 + 4 \cdot q^4) \cdot \exp\left(\frac{-1}{2} \cdot q^2\right)$$

$$\Psi(10, q, \beta) \text{ simplify} \rightarrow \frac{1}{5040 \cdot \pi^{\frac{1}{4}}} \cdot \beta^{\frac{1}{4}} \cdot 7^{\frac{1}{2}} \cdot (-945 + 9450 \cdot q^2 - 12600 \cdot q^4 + 5040 \cdot q^6 - 720 \cdot q^8 + 32 \cdot q^{10}) \cdot \exp\left(\frac{-1}{2} \cdot q^2\right)$$

Las funciones de onda están relacionadas entre sí de forma que conocidas dos consecutivas puede obtenerse la siguiente, dicha relación de recurrencia es:

$$\psi_{v+1} = \sqrt{\frac{2}{v+1}} \cdot q \cdot \psi_v - \sqrt{\frac{v}{v+1}} \cdot \psi_{v-1}$$

Simbólicamente puede calcularse a partir de las definiciones anteriores que

$$\sqrt{\frac{2}{3}} \cdot q \cdot \Psi(2, q, \beta) - \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \Psi(1, q, \beta) \text{ simplify } \rightarrow \frac{1}{3 \cdot \pi^{\frac{1}{4}}} \cdot \beta^{\frac{1}{4}} \cdot 3^{\frac{1}{2}} \cdot q \cdot (-3 + 2 \cdot q^2) \cdot \exp\left(\frac{-1}{2} \cdot q^2\right)$$

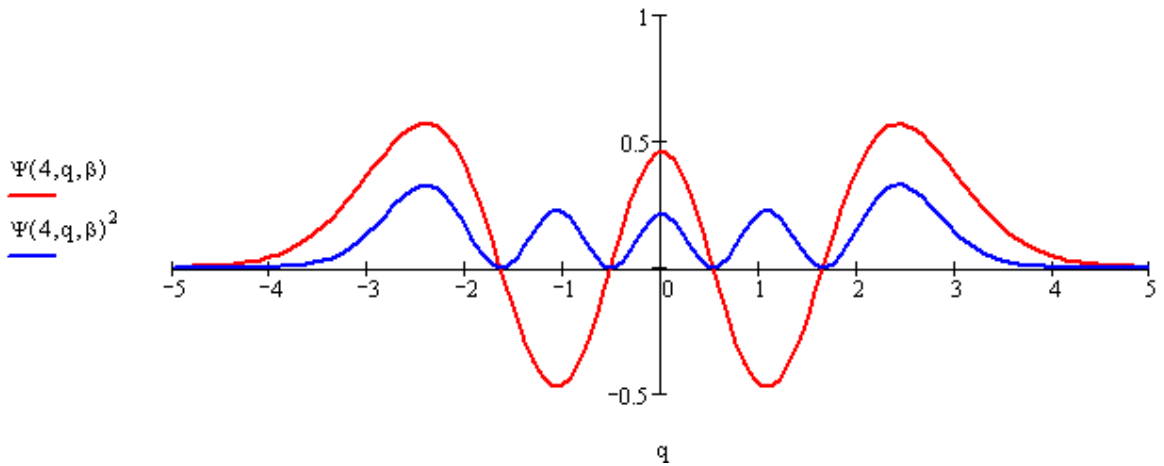
Coincidiendo el resultado con el determinado previamente para $\Psi(3, q, \beta)$

Para representar estas funciones vamos a dar arbitrariamente un valor a la constante β

$\beta := 1$

y un rango a la variable q

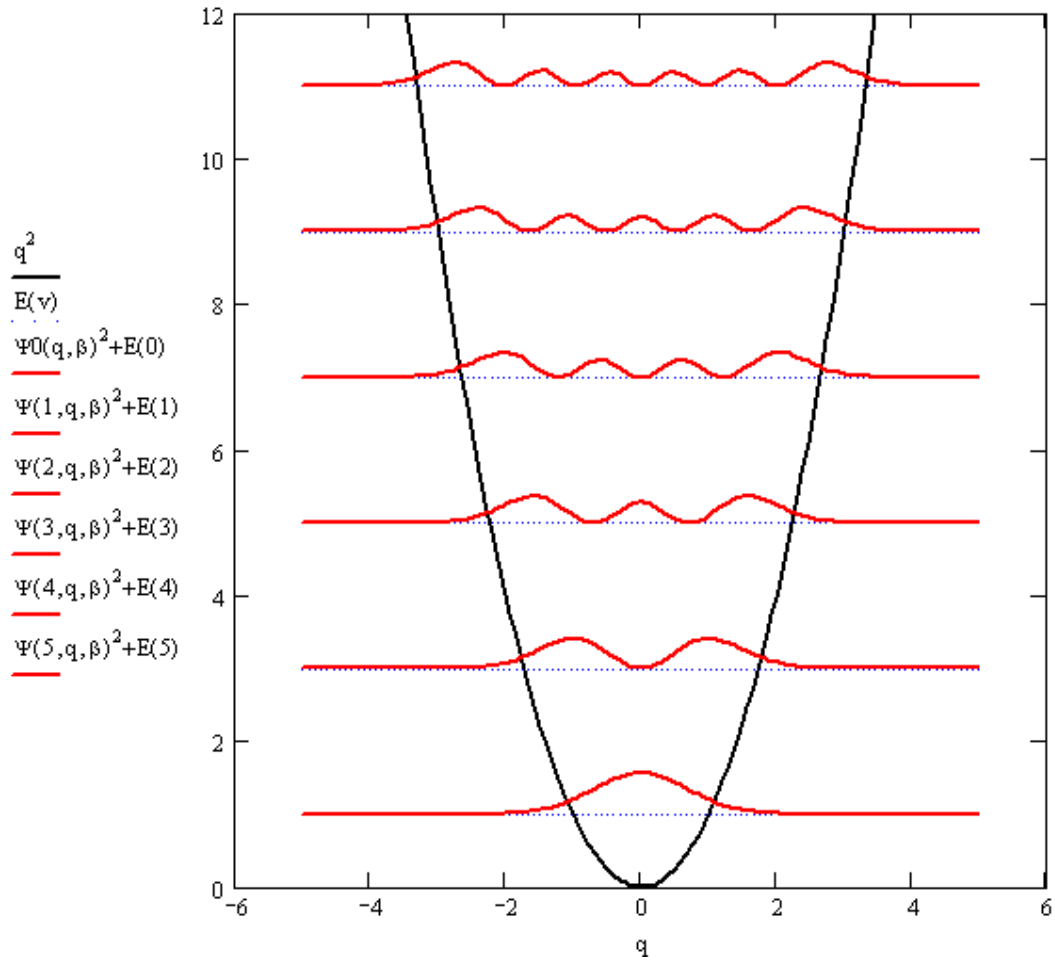
$q := -5, -4.91 \dots 5$



Otra forma de representar la probabilidad es en un gráfico en el que simultáneamente se represente la energía potencial, $U=q^2$, y la energía de cada estado $E(v) = 1+2v$. En este gráfico a la probabilidad de cada estado se le suma su energía, solo con objeto de facilitar su visualización.

$E(v) := 1 + 2 \cdot v$

$v := 0, 1 \dots 5$



En esta figura, los valores de q (distancia) correspondientes a los puntos de cruce entre la línea negra (energía potencial) y las líneas azules (energía total a cada nivel v) representa el máximo desplazamiento de la partícula, según la mecánica clásica.

Sin embargo, las probabilidades (líneas rojas) se extienden más allá de dicha distancia

REPRESENTACION GRAFICA DE ARMONICOS ESFERICOS

El armónico esférico a representar, será designado por r (vector r en coordenadas polares el cual solo toma valores positivos). En realidad, el signo del armónico esférico puede ser positivo o negativo, aunque gráficamente solo puede representarse su valor absoluto. Supongamos que la función a representar es un armónico esférico con números cuánticos $l=2$ y $m=0$. En este caso:

$$r(\theta) := \sqrt{\frac{5}{8} \cdot (3 \cdot \cos(\theta)^2 - 1)}$$

$$x(\theta, \phi) := |r(\theta)| \cdot \sin(\theta) \cdot \cos(\phi)$$

Donde r varia entre 0 y ∞

θ varia entre 0 y π

y ϕ varia entre 0 y 2π

<--- Conversión a coordenadas cartesianas

$$y(\theta, \phi) := |r(\theta)| \cdot \sin(\theta) \cdot \sin(\phi)$$

$$z(\theta, \phi) := |r(\theta)| \cdot \cos(\theta)$$

Tomaremos 25 valores para θ (comprendidos entre 0 y π). y 50 para ϕ .

$$i := 0..24$$

$$\theta_i := \pi \cdot \frac{i}{24}$$

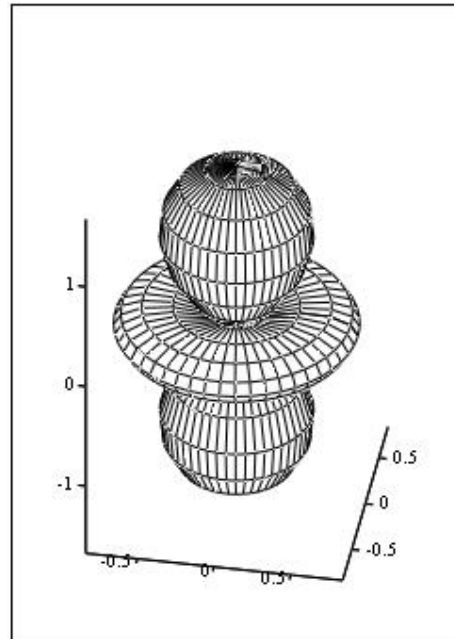
$$j := 0..49$$

$$\phi_j := 2 \cdot \pi \cdot \frac{j}{49}$$

$$X_{i,j} := x(\theta_i, \phi_j)$$

$$Y_{i,j} := y(\theta_i, \phi_j)$$

$$Z_{i,j} := z(\theta_i, \phi_j)$$



(X,Y,Z)

Representar como ejercicio otros armónicos esféricos. A continuación se dan las expresiones, sin normalizar, de los 5 correspondientes a los orbitales d:

$$Dz^2(\theta, \phi) := (3 \cdot \cos(\theta)^2 - 1)$$

$$Dxz(\theta, \phi) := \sin(\theta) \cdot \cos(\theta) \cdot \cos(\phi)$$

$$Dyz(\theta, \phi) := \sin(\theta) \cdot \cos(\theta) \cdot \sin(\phi)$$

$$Dx^2 - y^2(\theta, \phi) := \sin(\theta)^2 \cdot \cos(2 \cdot \phi)$$

$$Dxy(\theta, \phi) := \sin(\theta)^2 \cdot \sin(2 \cdot \phi)$$

Armónicos Esféricos

Página realizada por Olga Carabaño Castro

Vamos a representar los diferentes armónicos

Los armónicos esféricos son autofunciones comunes del operador

$$L^2$$

*y la componente del
del momento angular*

$$L_z$$

Para ello definimos en primer lugar los polinomios de Legendre

$$P(l, m, p) := \frac{1}{2^l \cdot l!} \cdot \left(\frac{d}{dp} \right)^{l+m} \left(p^2 - 1 \right)^l$$

donde $p = \cos \theta$

$$\theta$$

Donde l toma valores enteros positivos y m toma valores desde $-l$ hasta $+l$

Definimos seguidamente los armónicos esféricos como función de los polinomios de Legendre

$$Y(l, m, \phi, \theta) := \sqrt{\frac{2 \cdot l + 1}{4 \cdot \pi} \cdot \frac{(1 - |m|)!}{(1 + |m|)!}} \cdot e^{i \cdot m \cdot \phi} \cdot P(l, m, \cos(\theta))$$

Realizamos la conversión a coordenadas cartesianas

$$x(l, m, \theta, \phi) := |Y(l, m, \phi, \theta)| \cdot \sin(\theta) \cdot \cos(\phi)$$

$$y(l, m, \theta, \phi) := |Y(l, m, \phi, \theta)| \cdot \sin(\theta) \cdot \sin(\phi)$$

$$z(l, m, \theta, \phi) := |Y(l, m, \phi, \theta)| \cdot \cos(\theta)$$

Tomamos 50 valores para

$$\theta$$

entre 0 y

$$\pi$$

y otros 50 para

$$\phi$$

$$a := 0 \dots 49$$

$$b := 0 \dots 49$$

$$\theta_a := \pi \cdot \frac{a}{49}$$

$$\phi_b := 2 \cdot \pi \cdot \frac{b}{49}$$

Definimos las siguientes matrices para hacer la representación

$$X_{a,b} = x(l, m, \theta_a, \phi_b)$$

$$Y_{a,b} = y(l, m, \theta_a, \phi_b)$$

$$Z_{a,b} = z(l, m, \theta_a, \phi_b)$$

Ahora para representar los diferentes armónicos basta con ir variando los valores de l y m recordando siempre que m toma valores entre $-l$ y $+l$.

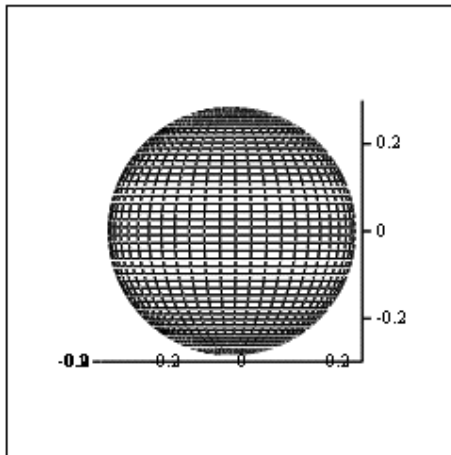
** Para $l=0$*

** $m=0$*

$$X_{a,b} := x(0, 0, \theta_a, \phi_b)$$

$$Y_{a,b} := y(0, 0, \theta_a, \phi_b)$$

$$Z_{a,b} := z(0, 0, \theta_a, \phi_b)$$



(X,Y,Z)

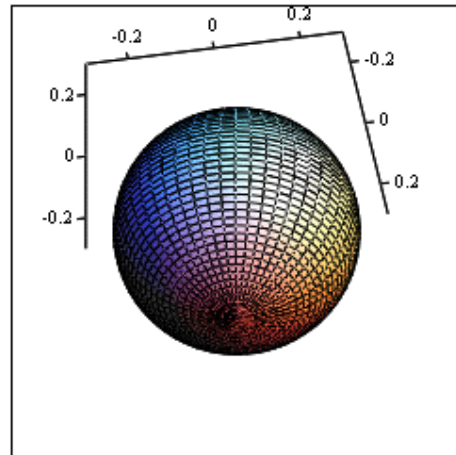
* Para $l=1$

* $m=0$

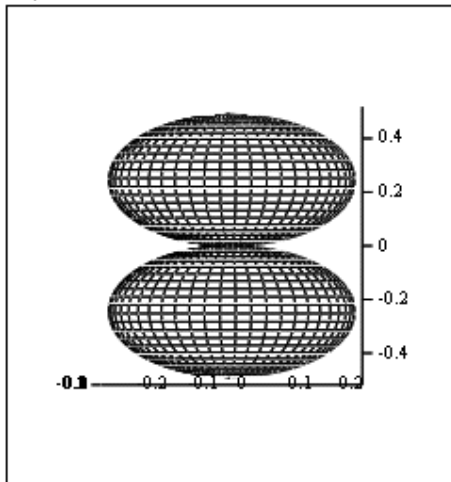
$$X_{a,b} := x(1,0,\theta_a,\phi_b)$$

$$Y_{a,b} := y(1,0,\theta_a,\phi_b)$$

$$Z_{a,b} := z(1,0,\theta_a,\phi_b)$$



(X,Y,Z)



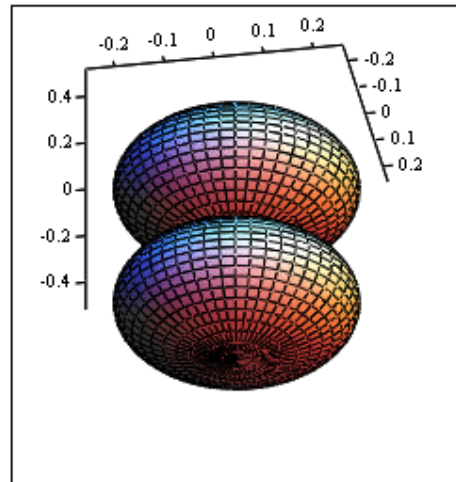
(X,Y,Z)

* $m=1$ y -1 (notemos que la representación es la misma puesto que representamos el valor absoluto)

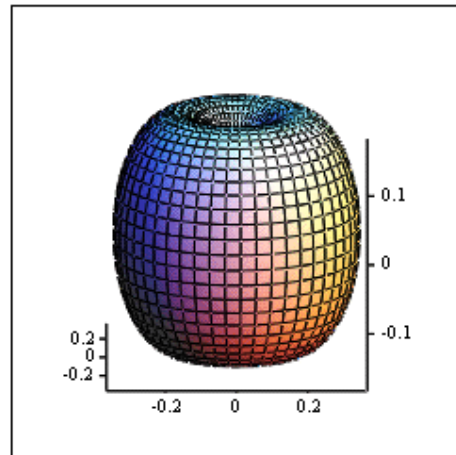
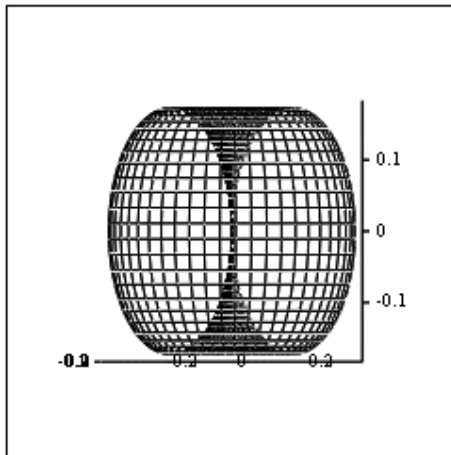
$$X_{a,b} := x(1,1,\theta_a,\phi_b)$$

$$Y_{a,b} := y(1,1,\theta_a,\phi_b)$$

$$Z_{a,b} := z(1,1,\theta_a,\phi_b)$$



(X,Y,Z)



(X,Y,Z)

* Para $l=2$

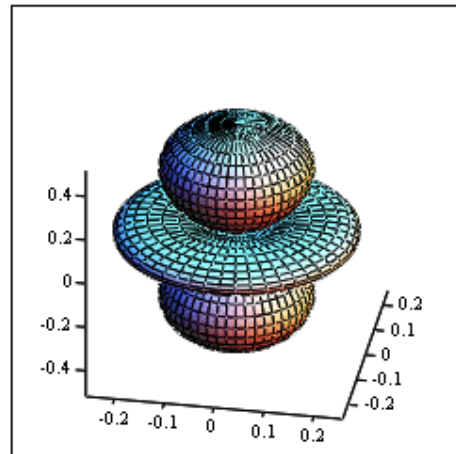
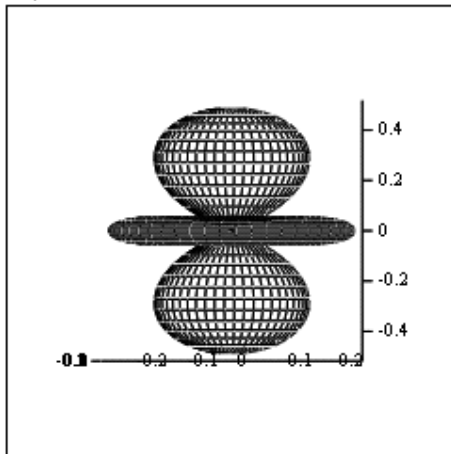
* $m=0$

$X_{a,b} := x(2,0,\theta_a,\phi_b)$

$Y_{a,b} := y(2,0,\theta_a,\phi_b)$

$Z_{a,b} := z(2,0,\theta_a,\phi_b)$

(X,Y,Z)



(X,Y,Z)

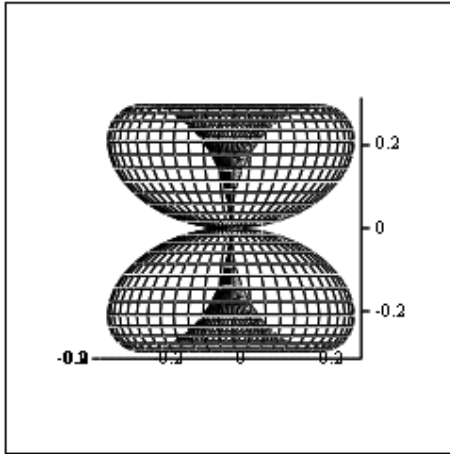
* $m=1$ y -1

$X_{a,b} := x(2,1,\theta_a,\phi_b)$

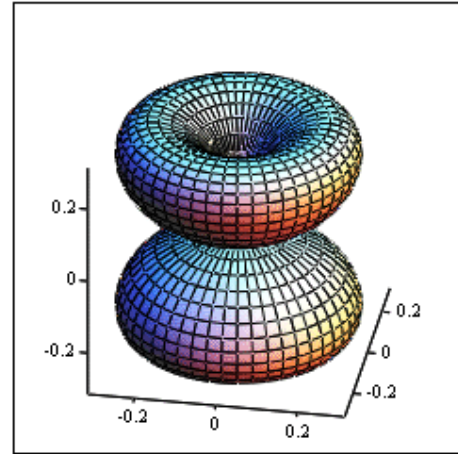
$Y_{a,b} := y(2,1,\theta_a,\phi_b)$

$Z_{a,b} := z(2,1,\theta_a,\phi_b)$

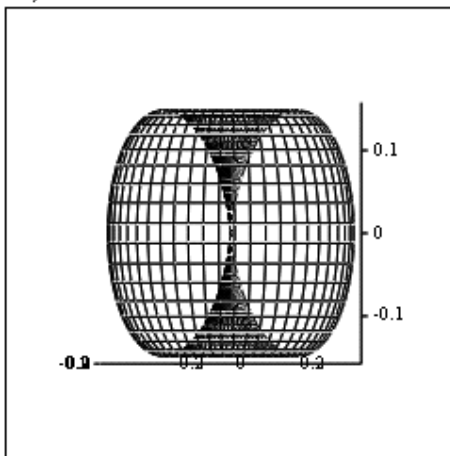
(X,Y,Z)



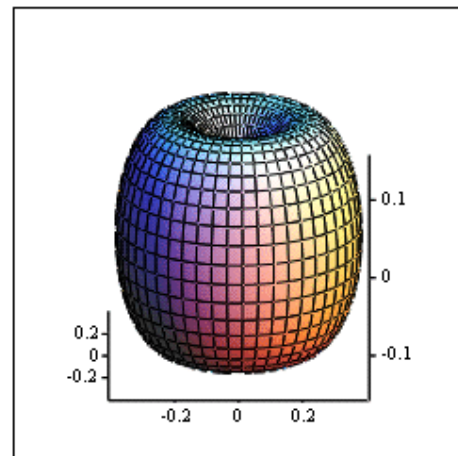
(X,Y,Z)
 * $m=2$ y -2
 $X_{a,b} := x(2,2,\theta_a,\phi_b)$
 $Y_{a,b} := y(2,2,\theta_a,\phi_b)$
 $Z_{a,b} := z(2,2,\theta_a,\phi_b)$



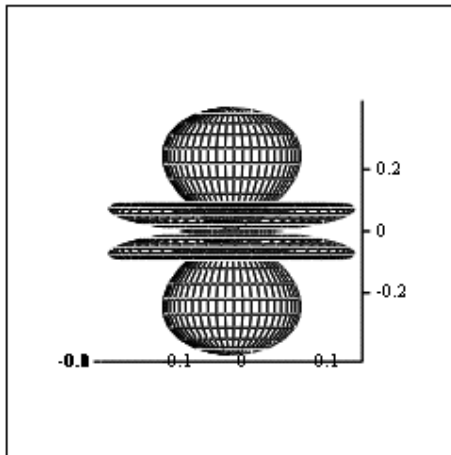
(X,Y,Z)



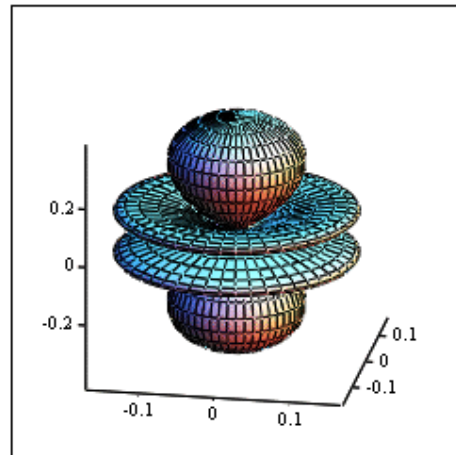
(X,Y,Z)
 * Para $l=3$
 * $m=0$
 $X_{a,b} := x(3,0,\theta_a,\phi_b)$
 $Y_{a,b} := y(3,0,\theta_a,\phi_b)$
 $Z_{a,b} := z(3,0,\theta_a,\phi_b)$



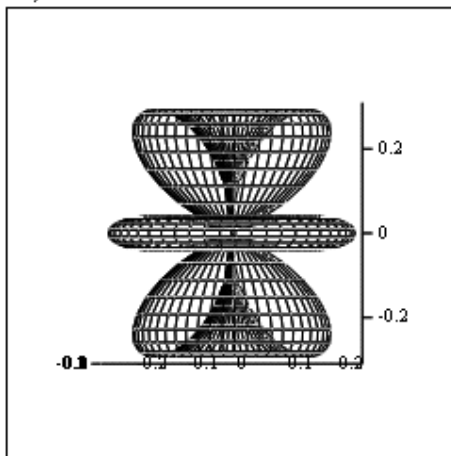
(X,Y,Z)



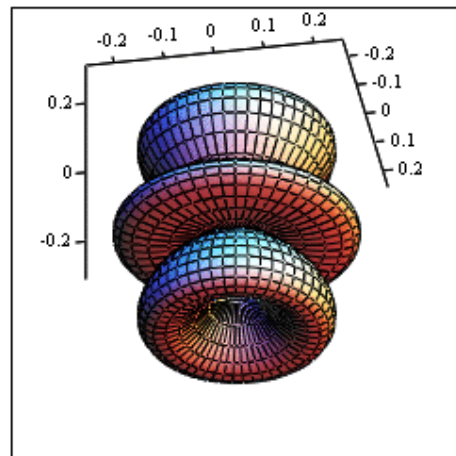
(X,Y,Z)
 * $m=1$ y -1
 $X_{a,b} := x(3,1,\theta_a,\phi_b)$
 $Y_{a,b} := y(3,1,\theta_a,\phi_b)$
 $Z_{a,b} := z(3,1,\theta_a,\phi_b)$



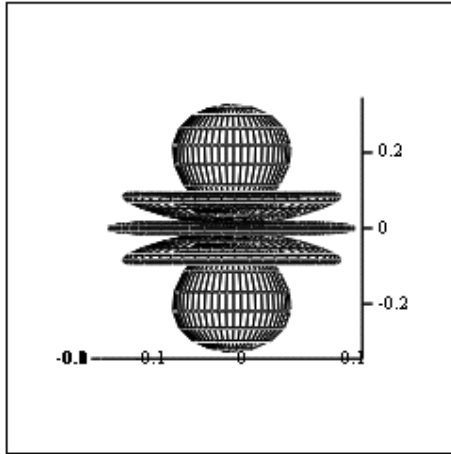
(X,Y,Z)



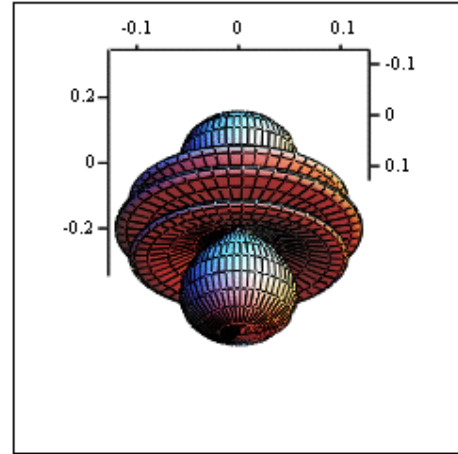
(X,Y,Z)
 * Para $l=4$
 * $m=0$
 $X_{a,b} := x(4,0,\theta_a,\phi_b)$
 $Y_{a,b} := y(4,0,\theta_a,\phi_b)$
 $Z_{a,b} := z(4,0,\theta_a,\phi_b)$



(X,Y,Z)



(X,Y,Z)



(X,Y,Z)

Notemos que para $l=3$ y $l=4$ tendríamos más representaciones; para $l=3$ las correspondientes a $m=2$ y -2 , y $m=3$ y -3 y para $l=4$ las correspondientes a $m=1$ y -1 , $m=2$ y -2 , $m=3$ y -3 y $m=4$ y -4 . Pero no podemos representarlos con este programa puesto que nos permite hacer derivadas de orden superior a $l+m=4$.

Representación de los orbitales 3d

La representación de un orbital atómico no es posible, tal cual, ya que dicho orbital depende de tres coordenadas (r , θ y ϕ), por lo que necesitaríamos una cuarta coordenada para representar el orbital. Por lo tanto solo podremos representar proyecciones del orbital sobre diferentes planos.

Vamos a definir los ejes de coordenadas (en cartesianas)

$i := 0..40$

$x_i := -20.01 + i$

$j := 0..40$

$y_j := -20 + j$

$z_j := -20 + j$

Su conversión a coordenadas esféricas será:

$$R(x,y,z) := \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$\phi_{i,j} := \arg\{x_i + i \cdot y_j\}$$

$$\theta_{i,j} := \arg\{z_j + i \cdot x_i\}$$

Radio de atómico de Bohr:

$a := 0.529$

Orbital 3d z^2

$$\Psi_{3dz^2}(r,\theta,\phi) := \frac{1}{81 \cdot \sqrt{6} \cdot \pi} \cdot \frac{r^2 \cdot (3 \cdot \cos(\theta)^2 - 1)}{a^{3.5}} \cdot e^{-\frac{r}{a}}$$

$$r_{i,j} := R(x_i, 0, z_j)$$

Representación en el Plano xz ----> $y = 0$

En el plano XZ, se cumple que $\phi=0$ y $\phi=\pi$.

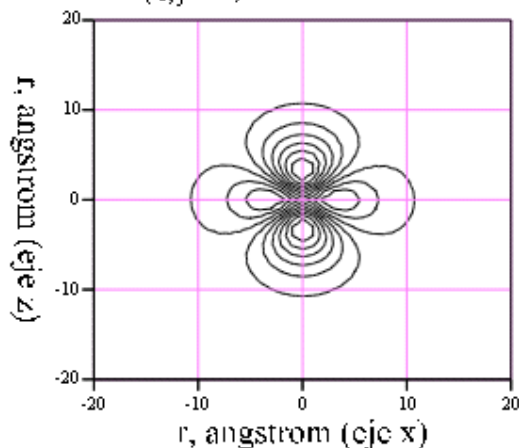
En vez de trabajar con estos dos valores de ϕ , es mejor permitir que θ tome valores entre 0 y 2π .

Por esta razón, en la función probabilidad, para evitar el signo del $\sin(\theta)$, se añade $|\sin(\theta)|$.

Orbital

$$\psi_{3dz^2}(r,\theta) := \Psi_{3dz^2}(r,\theta,0)$$

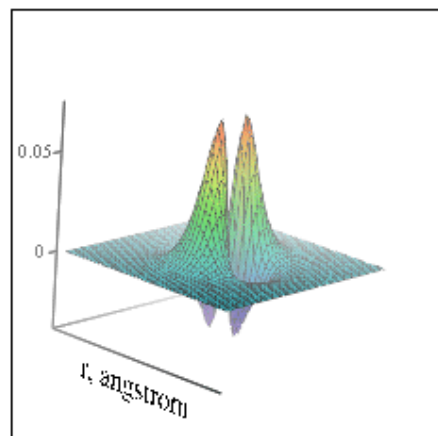
$$\Psi_{i,j} := \psi_{3dz^2}(r_{i,j}, \theta_{i,j})$$



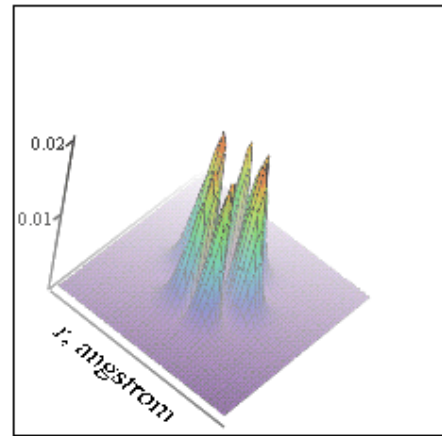
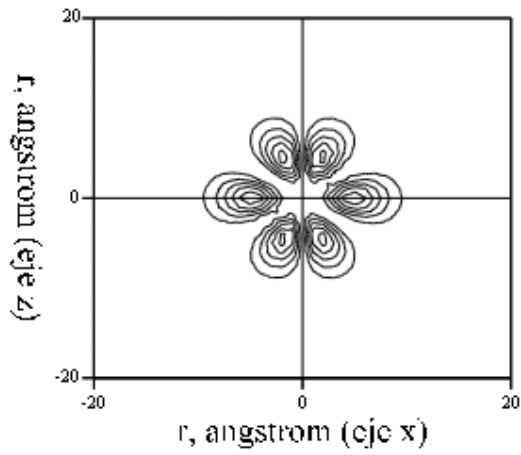
Ψ

Probabilidad

$$P_{i,j} := \psi_{3dz^2}(r_{i,j}, \theta_{i,j})^2 \cdot \{r_{i,j}\}^2 \cdot |\sin(\theta_{i,j})|$$



Ψ



P

P

Orbital 3dxy

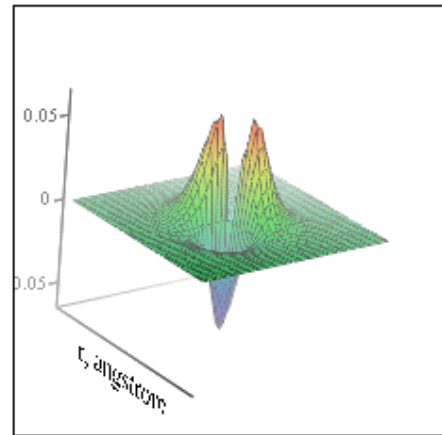
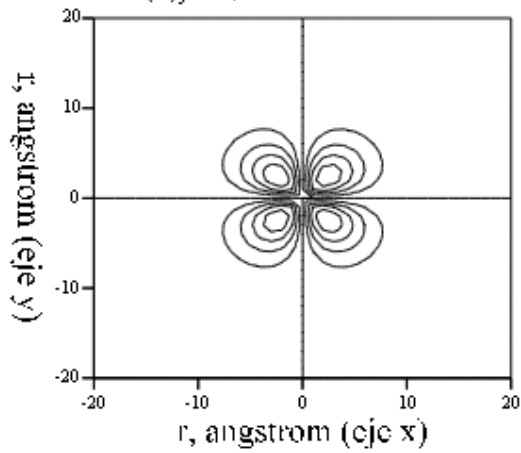
$$\Psi_{3dxy}(r, \theta, \phi) := \frac{1}{81 \cdot \sqrt{2} \cdot \pi} \cdot \frac{r^2 \cdot \sin(\theta)^2 \cdot \sin(2 \cdot \phi)}{a^{3.5}} \cdot e^{-\frac{r}{3 \cdot a}}$$

Representación en el Plano xy ----> $\theta = \pi/2$

$$\psi_{3dxy}(r, \phi) := \Psi_{3dxy}\left(r, \frac{\pi}{2}, \phi\right)$$

orbital

$$\Psi_{i,j} := \psi_{3dxy}(r_{i,j}, \phi_{i,j})$$

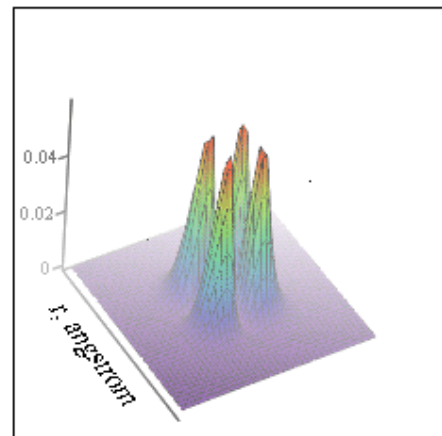
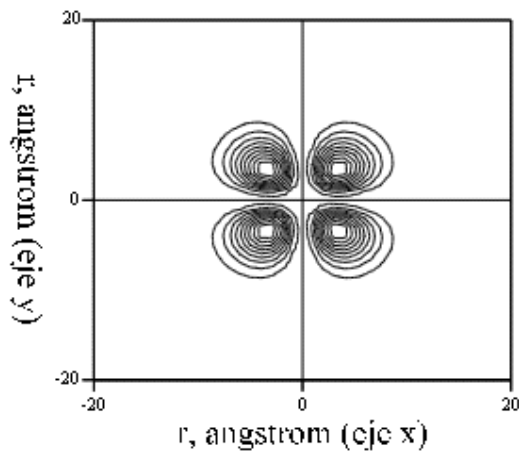


Ψ

Ψ

Probabilidad

$$P_{i,j} := \psi_{3dxy}(r_{i,j}, \phi_{i,j})^2 \cdot (r_{i,j})^2$$



P

Orbital $3dx^2y^2$

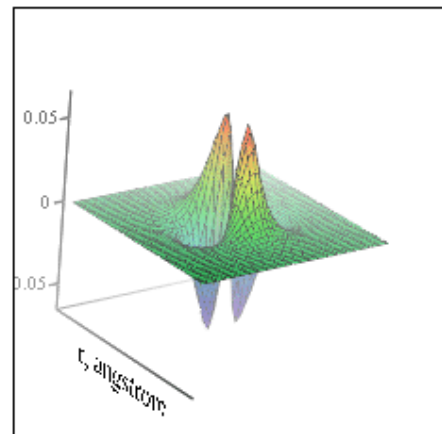
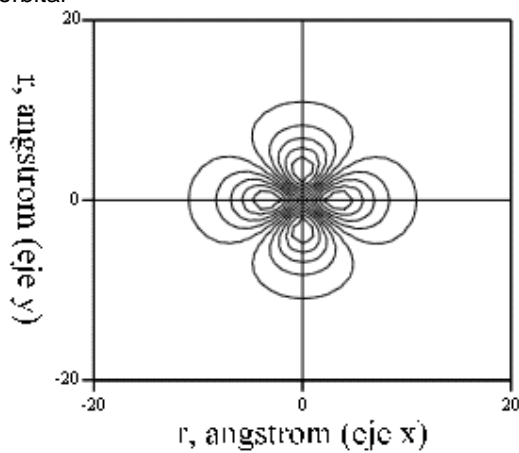
$$\Psi_{3dx^2y^2}(r, \theta, \phi) := \frac{1}{81 \cdot \sqrt{2} \cdot \pi} \cdot \frac{r^2 \cdot \sin(\theta)^2 \cdot \cos(2 \cdot \phi)}{a^{3.5}} \cdot e^{-\frac{r}{3 \cdot a}}$$

$$\psi_{3dx^2y^2}(r, \phi) := \Psi_{3dx^2y^2}\left(r, \frac{\pi}{2}, \phi\right)$$

Representación en el Plano xy ----> $\theta = \pi/2$

$$\Psi_{i,j} := \psi_{3dx^2y^2}(r_{i,j}, \phi_{i,j})$$

orbital

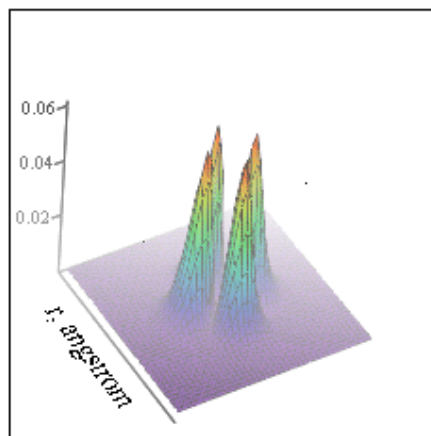
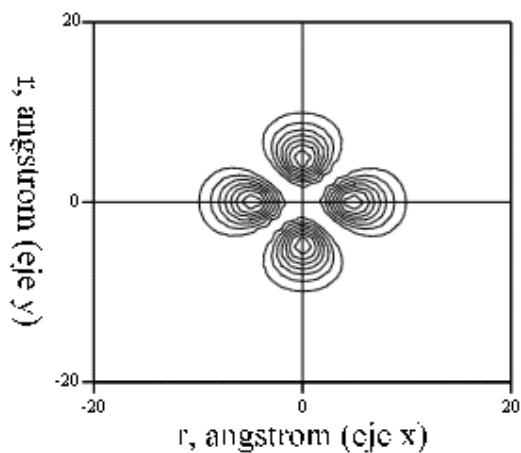


Ψ

Probabilidad

$$P_{i,j} := \psi_{3dx^2y^2}(r_{i,j}, \phi_{i,j})^2 \cdot (r_{i,j})^2$$

Ψ



P

P

Las representaciones de las funciones dxz y dyz, son formalmente idénticas a la del orbital dxy

Orbital 3dxz

$$\Psi_{3dxz}(r, \theta, \phi) := \frac{\sqrt{2}}{81 \cdot \sqrt{\pi}} \cdot \frac{r^2 \cdot \sin(\theta) \cdot \cos(\theta) \cdot \cos(\phi)}{a^{3.5}} \cdot e^{-\frac{r}{3 \cdot a}}$$

Orbital 3dyz

$$\Psi_{3dyz}(r, \theta, \phi) := \frac{\sqrt{2}}{81 \cdot \sqrt{\pi}} \cdot \frac{r^2 \cdot \sin(\theta) \cdot \cos(\theta) \cdot \sin(\phi)}{a^{3.5}} \cdot e^{-\frac{r}{3 \cdot a}}$$

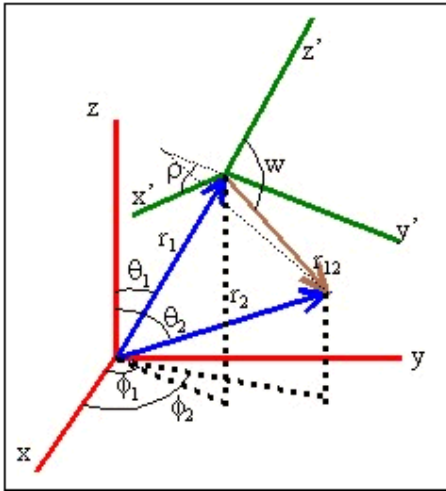
Integrales de Coulomb: Integrales bielectrónicas

La integral de Coulomb da cuenta de la energía de repulsión entre dos electrones de un átomo polielectrónico. Esta integral es compleja de resolver, si bien tiene solución analítica. Se va a analizar su solución para dos electrones situados en orbitales 1s.

$$\phi_{1s}(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}} \cdot e^{-Z \cdot r}$$

La integral de Coulomb tiene la forma

$$\int \frac{\phi_{1s}(r_1)^2 \cdot \phi_{1s}(r_2)^2}{|r_1 - r_2|} d\tau = \frac{Z^6}{\pi^2} \int \frac{e^{-2 \cdot Z \cdot (r_1 + r_2)}}{|r_1 - r_2|} \cdot r_1^2 dr_1 \cdot \sin(\theta_1) d\theta_1 \cdot d\phi_1 \cdot r_2^2 \cdot \sin(\theta_2) d\theta_2 d\phi_2$$



Un método para resolver esta integral consiste en referir la posición de la segunda partícula con respecto a la primera, definiendo un nuevo sistema de coordenadas (x', y', z'), centrado en la posición de la primera partícula (ver Figura, líneas verdes). En este sistema de coordenadas la dirección del eje z', se elige de forma que coincide en todo momento con la r1. Las coordenadas esféricas de la segunda partícula serán por lo tanto r12, w (ángulo con z') y rho (ángulo de la proyección de r12 sobre el plano x'-y' con el eje x'). Por lo tanto el elemento de volumen será

$$d\tau = r_1^2 dr_1 \cdot \sin(\theta_1) d\theta_1 \cdot d\phi_1 \cdot r_{12}^2 \cdot dr_{12} \cdot \sin(w) dw \cdot d\rho$$

De todas las coordenadas definidas, el sistema debe expresarse en función de 6 cualesquiera. Así, interesa seguir usando r2 y eliminar w. Trigonómicamente se sabe

$$r_2^2 = r_1^2 + r_{12}^2 - 2 \cdot r_1 \cdot r_{12} \cdot \cos(w)$$

luego, como supondremos a r1 y a r12 como variables independientes y a r2 y w como variables dependientes, diferenciando

$$r_2 \cdot dr_2 = r_1 \cdot r_{12} \cdot \sin(w) \cdot dw$$

$$\sin(w) \cdot dw \cdot dr_2 = \frac{r_2 \cdot dr_2}{r_1 \cdot r_{12}}$$

luego

$$d\tau = r_1 dr_1 \cdot \sin(\theta_1) d\theta_1 \cdot d\phi_1 \cdot r_2 \cdot dr_2 \cdot r_{12} \cdot dr_{12} \cdot d\rho$$

$$\int \frac{\phi_{1s}(r_1, Z)^2 \cdot \phi_{1s}(r_2, Z)^2}{|r_1 - r_2|} d\tau = \frac{Z^6}{\pi^2} \int_0^\infty e^{-2 \cdot Z \cdot r_1} \cdot r_1 dr_1 \cdot \int_0^\infty e^{-2 \cdot Z \cdot r_2} \cdot r_2 dr_2 \cdot \int_{|r_1 - r_2|}^{r_1 + r_2} \frac{1}{|r_1 - r_2|} dr_{12} \cdot \int_0^\pi \sin(\theta_1) d\theta_1 \cdot \int_0^{2\pi} 1 d\phi_1 \cdot \int_0^{2\pi} 1 d\rho$$

Las tres últimas integrales son inmediatas, por lo que

$$\int \frac{\phi_1 s(r_1, Z)^2 \cdot \phi_1 s(r_2, Z)^2}{|r_1 - r_2|} d\tau = 8 \cdot Z^6 \cdot \int_0^\infty e^{-2 \cdot Z \cdot r_1} \cdot r_1 dr_1 \cdot \int_0^\infty e^{-2 \cdot Z \cdot r_2} \cdot r_2 dr_2 \cdot \int_{|r_1 - r_2|}^{r_1 + r_2} 1 dr_2$$

Estas integrales pueden dividirse en dos de igual valor. En un caso $r_2 \leq r_1$, y en el otro caso $r_1 \leq r_2$. Luego podemos multiplicar por 2 y quedamos con el caso $r_2 \leq r_1$.

$$\int \frac{\phi_1 s(r_1, Z)^2 \cdot \phi_1 s(r_2, Z)^2}{r_2 - r_1} d\tau = 16 \cdot Z^6 \cdot \int_0^\infty e^{-2 \cdot Z \cdot r_1} \cdot r_1 dr_1 \cdot \int_{r_1}^\infty e^{-2 \cdot Z \cdot r_2} \cdot r_2 dr_2 \cdot \int_{r_2 - r_1}^{r_1 + r_2} 1 dr_2$$

Notese que el límite inferior de la segunda integral es ahora r_1 , ya que por definición $r_2 \leq r_1$. La última integral es inmediata y vale $(r_1 + r_2) - (r_2 - r_1) = 2r_1$, luego

$$\int \frac{\phi_1 s(r_1, Z)^2 \cdot \phi_1 s(r_2, Z)^2}{r_1 - r_2} d\tau = 32 \cdot Z^6 \cdot \int_0^\infty e^{-2 \cdot Z \cdot r_1} \cdot r_1^2 dr_1 \cdot \int_{r_1}^\infty e^{-2 \cdot Z \cdot r_2} \cdot r_2 dr_2$$

La solución de la segunda integral es

$$\int_{r_1}^\infty e^{-Z \cdot 2 \cdot r_2} \cdot r_2 dr_2 \text{ assume } Z > 0 \rightarrow \frac{\left(\frac{1}{2} \cdot r_1 \cdot Z + \frac{1}{4}\right)}{Z^2} \cdot \exp(-2 \cdot r_1 \cdot Z)$$

Por lo tanto, substituyendo:

$$\int \phi_1 s(r_1)^2 \cdot \phi_1 s(r_2)^2 d\tau = 32 \cdot Z^6 \cdot \left(\frac{1}{2 \cdot Z} \cdot \int_0^\infty e^{-4 \cdot Z \cdot r_1} \cdot r_1^3 dr_1 + \frac{1}{4 \cdot Z^2} \cdot \int_0^\infty e^{-4 \cdot Z \cdot r_1} \cdot r_1^2 dr_1 \right)$$

$$\int_0^\infty e^{-4 \cdot Z \cdot r_1} \cdot r_1^3 dr_1 \text{ assume } Z > 0 \rightarrow \frac{3}{128 \cdot Z^4}$$

$$\int_0^\infty e^{-4 \cdot Z \cdot r_1} \cdot r_1^2 dr_1 \text{ assume } Z > 0 \rightarrow \frac{1}{32 \cdot Z^3}$$

Por lo tanto

$$32 \cdot Z^6 \cdot \left(\frac{1}{2 \cdot Z} \cdot \frac{3}{128 \cdot Z^4} + \frac{1}{4 \cdot Z^2} \cdot \frac{1}{32 \cdot Z^3} \right) \text{ simplify } \rightarrow \frac{5}{8} \cdot Z$$

$$\int \frac{\phi_1 s(r_1)^2 \cdot \phi_1 s(r_2)^2}{|r_1 - r_2|} d\tau = \frac{5}{8} \cdot Z$$

El Huevo de Fermi

Supóngase un átomo de He en una configuración $1s^1 2s^1$

Vamos a construir las funciones de onda antisimétricas correspondientes a esta configuración, suponiendo la aproximación de electrones independientes

Carga Nuclear

$$Z := 2$$

Orbitales 1s y 2s

$$\phi 1s(r) := \frac{Z^{1.5} \cdot e^{-Z \cdot r}}{\sqrt{\pi}}$$

$$\phi 2s(r) := \frac{Z^{1.5} \cdot (2 - Z \cdot r) \cdot e^{-Z \cdot \frac{r}{2}}}{4 \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}}$$

Orbital atómico con la parte espacial simétrica

$$\psi S(r1, r2) := \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (\phi 1s(r1) \cdot \phi 2s(r2) + \phi 1s(r2) \cdot \phi 2s(r1))$$

En este orbital la parte de espín tiene que ser antisimétrica, lo que implica que $\mathbf{S} = 0$.

La parte de espín no la escribimos ya que energía y probabilidad no viene afectada por ella

La otra opción es que la parte espacial del orbital atómico sea antisimétrica

$$\psi A(r1, r2) := \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (\phi 1s(r1) \cdot \phi 2s(r2) - \phi 1s(r2) \cdot \phi 2s(r1))$$

En este orbital la parte de espín tiene que ser simétrica, lo que implica que $\mathbf{S} = 1$.

La función probabilidad se define como el cuadrado de estas funciones por el elemento de volumen. Si se integra con respecto a todas las orientaciones posibles, se puede expresar la probabilidad mediante una relación semejante a la obtenida para el átomo de hidrógeno, cuando se dedujo la función de distribución radial. Esto implica multiplicar por $4\pi r^2$ para cada electrón.

$$PS(r1, r2) := 4 \cdot \pi \cdot r1^2 \cdot 4 \cdot \pi \cdot r2^2 \cdot \psi S(r1, r2)^2$$

$$PA(r1, r2) := 4 \cdot \pi \cdot r1^2 \cdot 4 \cdot \pi \cdot r2^2 \cdot \psi A(r1, r2)^2$$

Definamos un rango de distancias entre 0 y 5 angstrom para cada una de las distancias

$$i := 0..25$$

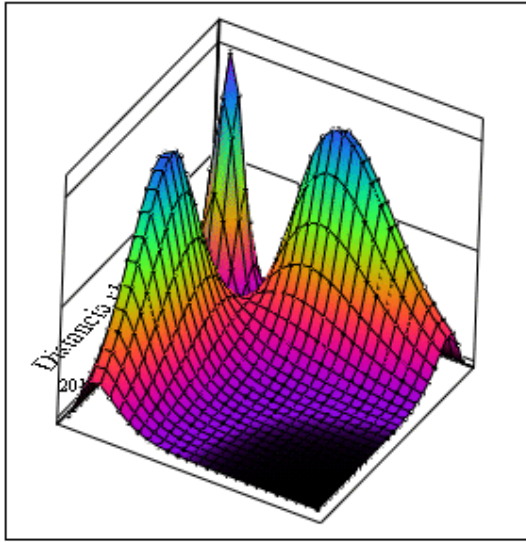
$$j := 0..25$$

$$r1_i := \frac{i}{5}$$

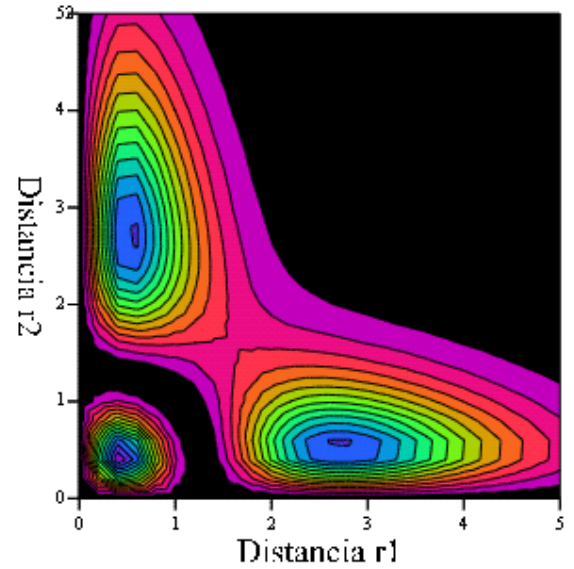
$$r2_j := \frac{j}{5}$$

$$Ps_{i,j} := PS(r1_i, r2_j)$$

$$Pa_{i,j} := PA(r1_i, r2_j)$$

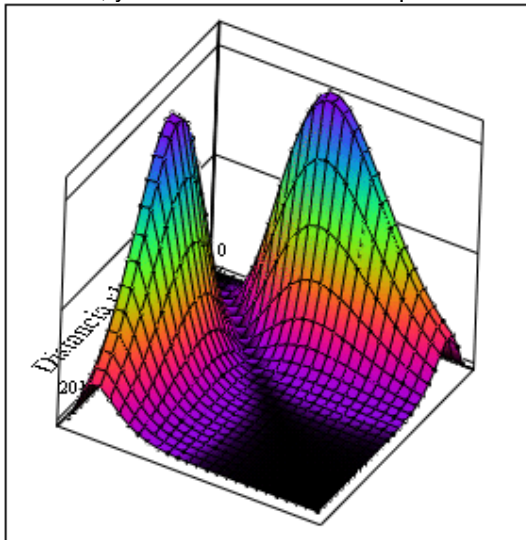


P_s

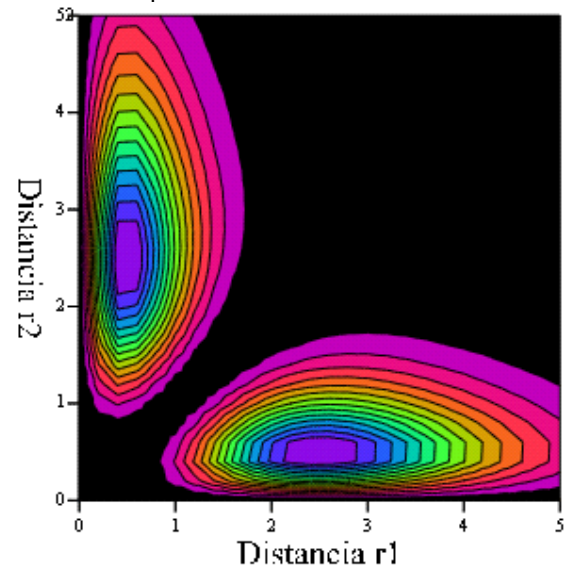


P_s

La diagonal de estas representaciones nos da la probabilidad de encontrar a los electrones a la misma distancia, y como se observa dicha probabilidad no es cero cuando el spin $S = 0$.



P_a



P_a

Cuando la parte espacial es antisimétrica, $S = 1$. En este caso, la probabilidad es cero cuando r_1 y r_2 son aproximadamente iguales, como se aprecia en las figuras superiores. Se dice entonces que existe un **hueco de Fermi** alrededor de cada electrón, indicando la existencia de una región en la que la probabilidad de encontrar otro electrón con el mismo espín es cero.

La Molécula H_2^+

Orbital atómico 1s

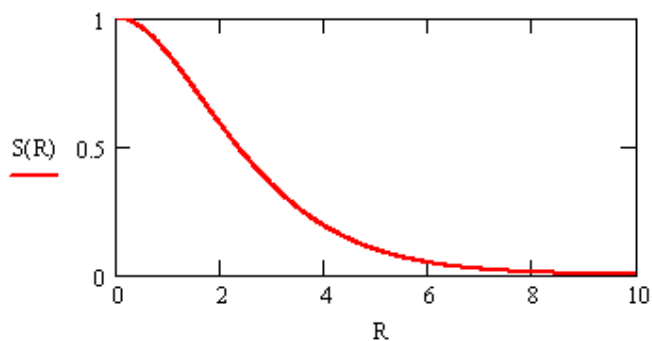
$$\phi_{1s}(r) := \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{-r}$$

$$E_{1s} := \frac{-1}{2}$$

Integral de solapamiento:

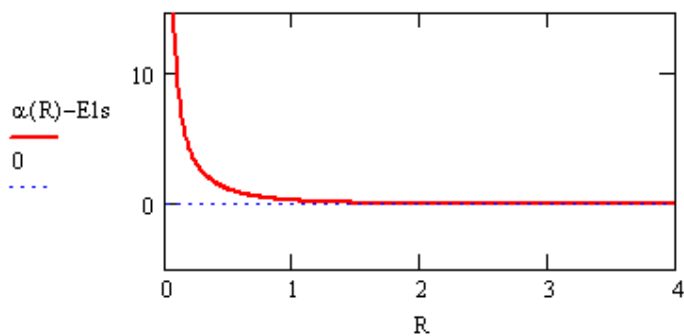
$$R := 0.01, 0.02 \dots 10$$

$$S(R) := e^{-R} \cdot \left(1 + R + \frac{R^2}{3} \right)$$



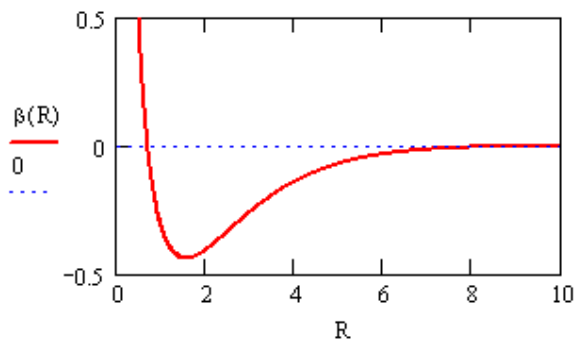
Integral de Coulomb

$$\alpha(R) := E_{1s} + e^{-2R} \cdot \frac{1+R}{R}$$



Integral de resonancia

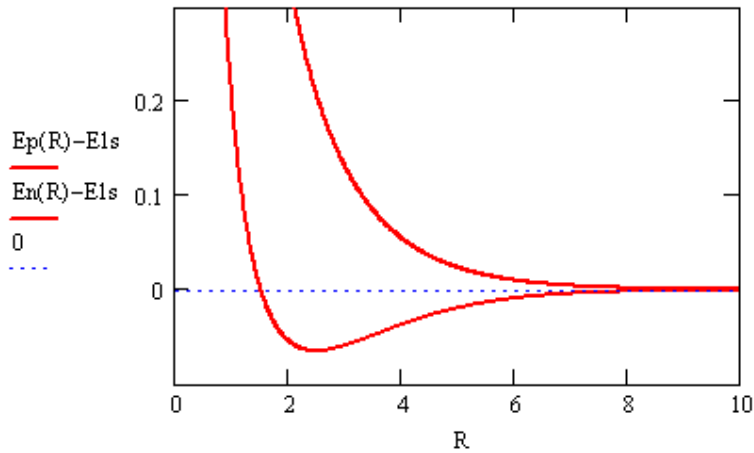
$$\beta(R) := \left(E_{1s} + \frac{1}{R} \right) \cdot S(R) - e^{-R} \cdot (1 + R)$$



Se obtienen dos soluciones

$$E_p(R) := \frac{\alpha(R) + \beta(R)}{1 + S(R)}$$

$$E_n(R) := \frac{\alpha(R) - \beta(R)}{1 - S(R)}$$



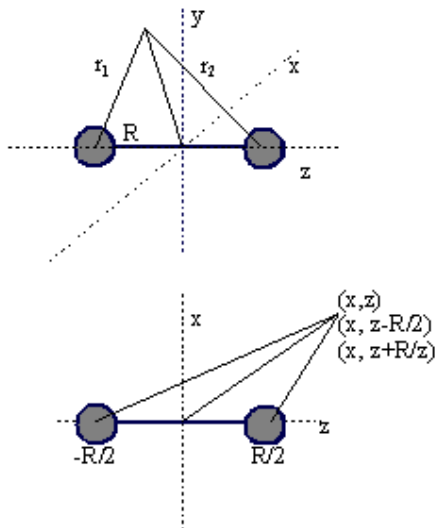
Construcción de los Orbitales Moleculares

OM enlazante

$$\sigma_{g1} s(r1, r2) := \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (\phi_1 s(r1) + \phi_1 s(r2))$$

OM antienlazante

$$\sigma_{u1} s(r1, r2) := \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (\phi_1 s(r1) - \phi_1 s(r2))$$



Con objeto de representar estos orbitales hay que tener en cuenta que estamos usando coordenadas esféricas y debemos hacer la transformación a cartesianas. Además situaremos nuestro centro de coordenadas en un punto situado sobre la línea que une a los núcleos y equidistante a ellos (ver Figura).

La representación se efectuará en el plano x-z

Las distancias r_1 y r_2 están referidas a las posiciones de cada núcleo en dicho plano x-z serán:

$$R_d(x, z, R) := \sqrt{x^2 + \left(z + \frac{R}{2}\right)^2}$$

Vamos a crear una matriz de puntos x,z, de forma que tengamos 120 puntos a lo largo de eje z (12 unidades atómicas de distancia) y 60 puntos a lo largo del eje x (6 unidades atómicas de distancia)

$$j := 0..60$$

$$z_j := -6 + \frac{j}{5}$$

$$i := 0..30$$

$$x_i := -3 + \frac{i}{5}$$

Si la distancia internuclear es

$$R := 2$$

Las posiciones $r1$ y $r2$ del electrón sobre el plano x-z serán;

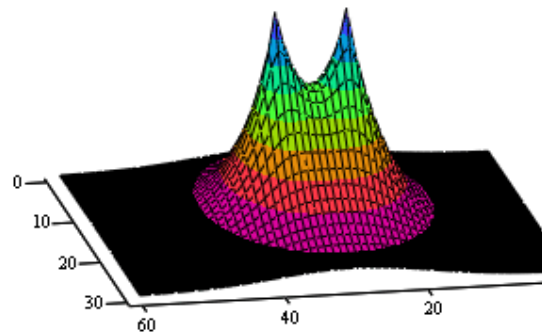
$$r1_{i,j} := Rd(x_i, z_j, R)$$

$$r2_{i,j} := Rd(x_i, z_j, -R)$$

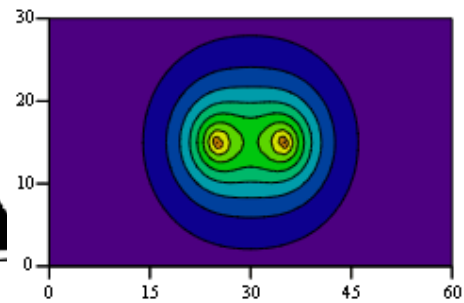
y por último los Orbitales Moleculares

$$\Psi_{\sigma g, i} := \sigma g1s(r1_{i,j}, r2_{i,j})$$

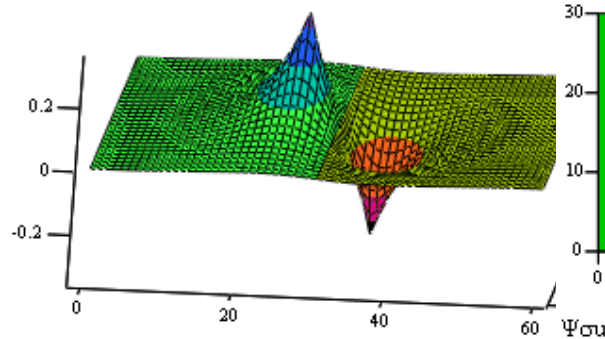
$$\Psi_{\sigma u, i} := \sigma u1s(r1_{i,j}, r2_{i,j})$$



$\Psi_{\sigma g}$



$\Psi_{\sigma g}$

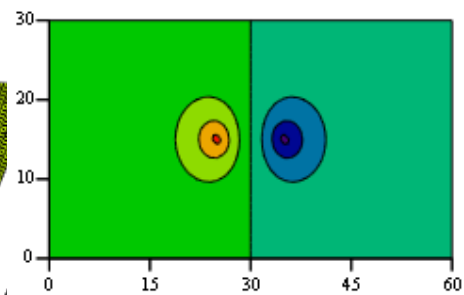


$\Psi_{\sigma u}$

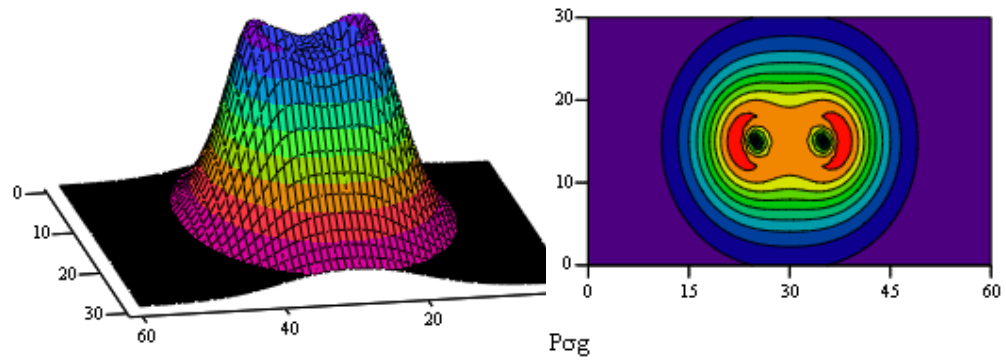
La probabilidad será

$$P_{\sigma g, i} := \sigma g1s(r1_{i,j}, r2_{i,j})^2 \cdot r1_{i,j} \cdot r2_{i,j}$$

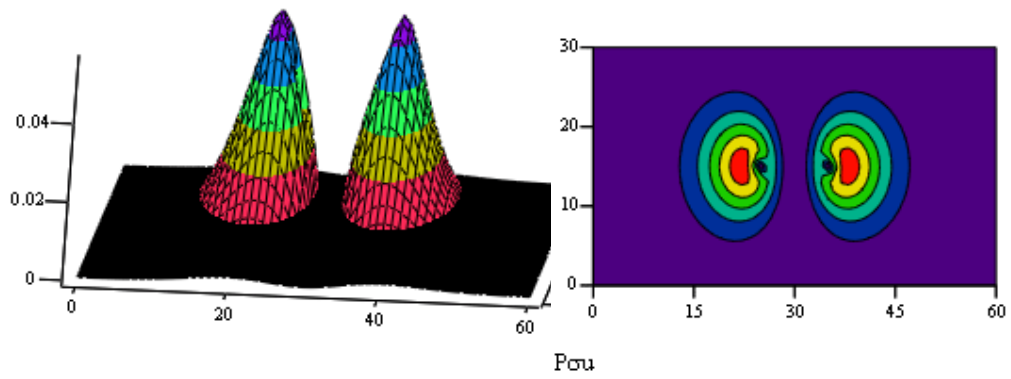
$$P_{\sigma u, i} := \sigma u1s(r1_{i,j}, r2_{i,j})^2 \cdot (r1_{i,j} \cdot r2_{i,j})$$



$\Psi_{\sigma u}$

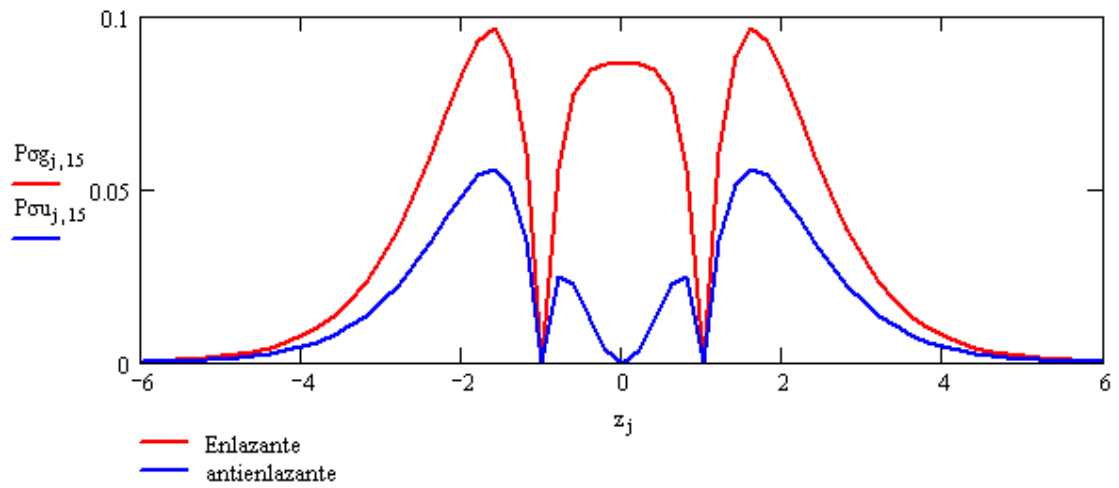


$P\sigma_g$



$P\sigma_u$

Vamos a representar la función probabilidad a lo larfo del eje z , (hacieno $x=0$).



Funciones de interpolación de spline cúbico

Este ejemplo permite demostrar como funcionan las funciones de **spline** y **interp** de MathCad.

En primer lugar necesitamos introducir un conjunto de datos X-Y:

$i := 0..13$

$X_i :=$

0
1
3
4
5
6
8
11
12
13
14
16
17
19

$Y_i :=$

0
2.6
23.16
27.57
24.26
16.63
30.41
47.2
50.03
60.33
59.89
71.18
84.27
77.69

Las funciones de spline cúbico suponen que dos puntos consecutivos estan conectados por un polinomio de tercer grado. Por lo tanto se necesitan 4 coeficientes para construir dicho polinomio entre cada pareja de datos. Dos de los coeficientes se obtienen de los propios puntos, los otros dos obligando a que las dos primeras derivadas sean continuas en dichos puntos. Sin embargo, los coeficientes de los puntos extremos quedan indeterminados, por lo que se requiere una condición adicional.

$S1 := \text{lspline}(X, Y)$

Condición lineal en los puntos extremos

$S2 := \text{pspline}(X, Y)$

Condición parabólica en los puntos extremos

$S3 := \text{cspline}(X, Y)$

Condición cúbica en los puntos extremos

S1, S2, S3 recogen los coeficientes de los polinomios de spline. Necesitamos definir las funciones de interpolación

$f1(x) := \text{interp}(S1, X, Y, x)$

$f2(x) := \text{interp}(S2, X, Y, x)$

$f3(x) := \text{interp}(S3, X, Y, x)$

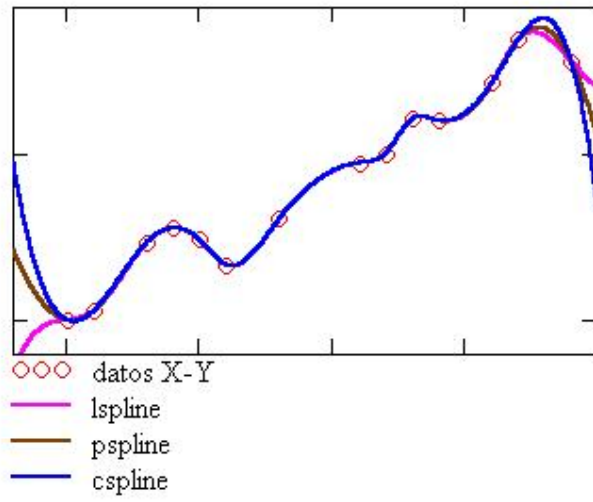
Estas funciones pueden utilizarse para efectuar cálculos puntuales:

$f1(9.5) = 42.36$

$f2(9.5) = 42.361$

$f3(9.5) = 42.361$

o para representarlas graficamente, como funciones continuas



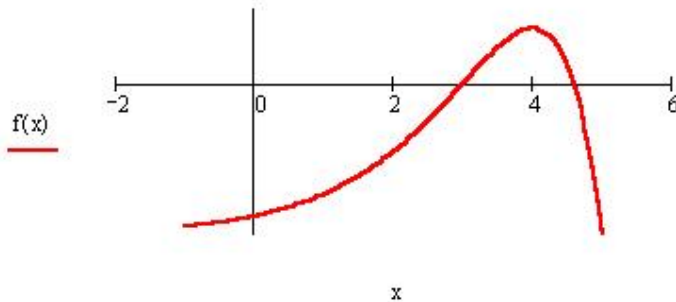
Las funciones difieren solo en los extremos.

Estas funciones son de interpolación, y no de extrapolación

La función root (Cálculo numérico de las raíces de una función)

Supongamos una función como la siguiente:

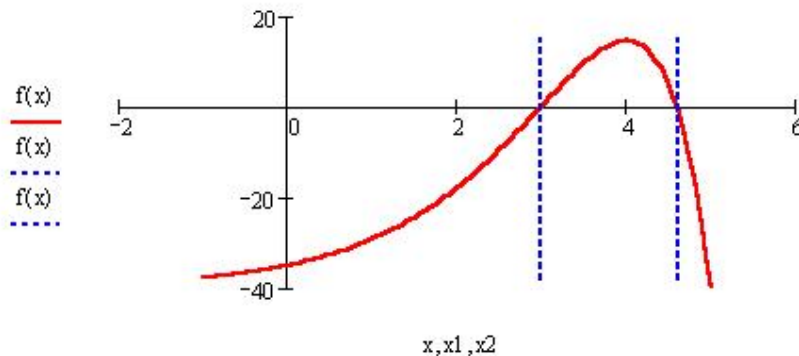
$$f(x) := (5 - x) \cdot e^x - 40$$
$$x := -1, -0.95 \dots 5$$



Vamos a calcular las raíces de esta función, es decir, los valores de x que hacen $f(x) = 0$. MathCad dispone de varios métodos para calcular esto. Uno de ellos, el más sencillo, es el método de Newton, en el cual se basa la función **root** de MathCad

El método de Newton es un método iterativo. El método consiste en partir de un valor aproximado a una de las raíces, por ejemplo:

```
xapro := 3
x1 := root(f(xapro), xapro)
x1 = 2.991
xapro := 4.6
x2 := root(f(xapro), xapro)
x2 = 4.597
```



Siendo por lo tanto $x1$ y $x2$ las soluciones buscadas.

El método de Newton no siempre converge, o, a veces la solución no es muy precisa, por lo que se hace necesario una comprobación de la solución obtenida, ya sea grafica o numéricamente

$$f(x1) = 1.803 \times 10^{-6}$$
$$f(x2) = -1.018 \times 10^{-5}$$

Supongamos que necesitamos una solución más precisa. Esto puede controlarse con la función TOL, que por defecto tiene un valor de 0.001. Esta función determina el límite de convergencia entre interacciones sucesivas y por lo tanto el cese del cálculo numérico. Por ejemplo:

```
xapro := 5
x2 := root(f(xapro), xapro)
x2 = 4.5965338624
```

$$f(x2) = -3.323 \times 10^{-4}$$

Notese que el resultado de $f(x2)$ difiere del anterior, ya que se ha partido de un valor de prueba diferente. Hagamos:

$TOL := 10^{-11}$

y repitamos el cálculo

$x2 := \text{root}(f(xapro), xapro)$

$x2 = 4.5965282431$

$f(x2) = -1.585 \times 10^{-12}$

La solución $x2$, difiere solo en la quinta cifra decimal, pero $f(x2)$ es mucho más próximo a cero que en el caso anterior, es decir, la solución numérica es más precisa.

Si el valor inicial esta muy alejado del real, la función root no siempre permite obtener soluciones válidas.

Por ejemplo:

$xapro1 := -3$

$xapro2 := 40$

$\text{root}(f(xapro1), xapro1) = 2.991$

$\text{root}(f(xapro2), xapro2) = \blacksquare$

El método de Newton utiliza el siguiente algoritmo:

$$df(x) := \frac{d}{dx} f(x)$$

Se define la derivada de la función

$x_0 := 8$

Se propone un valor inicial

$i := 0..11$

y un rango

Algoritmo

iterativo

$$x_{i+1} := x_i - \frac{f(x_i)}{df(x_i)}$$

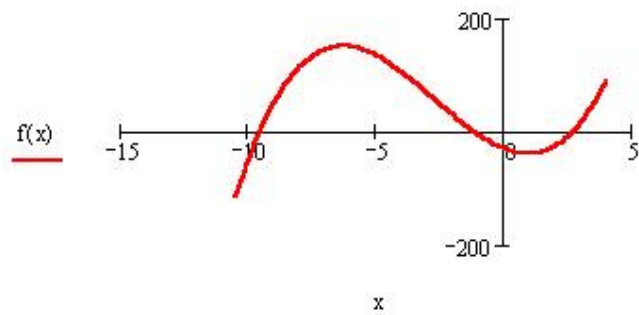
$x_1 =$

8
7.247
6.546
5.916
5.382
4.972
4.716
4.613
4.597
4.597
4.597
4.597

Veamos otro ejemplo. Sea la función

$$f(x) := x^3 + 8 \cdot x^2 - 18 \cdot x - 30$$

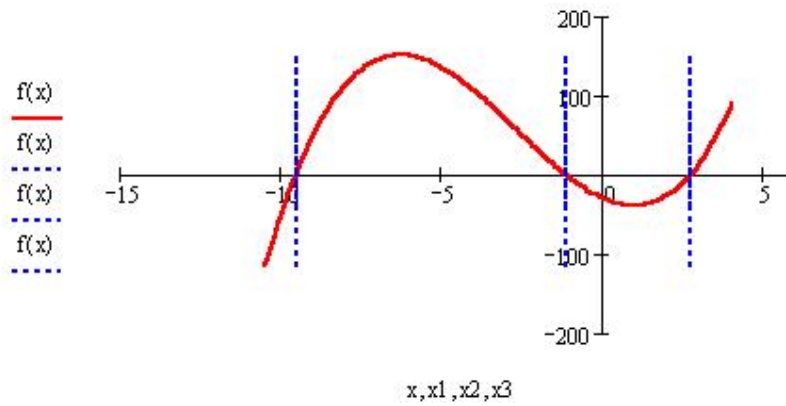
$x := -10.5, -10.4..4$



```

xapro := -3
x1 := root(f(xapro), xapro)
x1 = -1.157
x2 := root[ f(xapro) / (xapro - x1), xapro ]
x2 = 2.713
x3 := root[ f(xapro) / ((xapro - x1) * (xapro - x2)), xapro ]
x3 = -9.555

```



La función gamma de Euler

La función gamma de Euler define la integral siguiente

$$\Gamma(z) := \int_0^{\infty} t^{z-1} \cdot e^{-t} dt$$

Esta función está implementada en MathCad

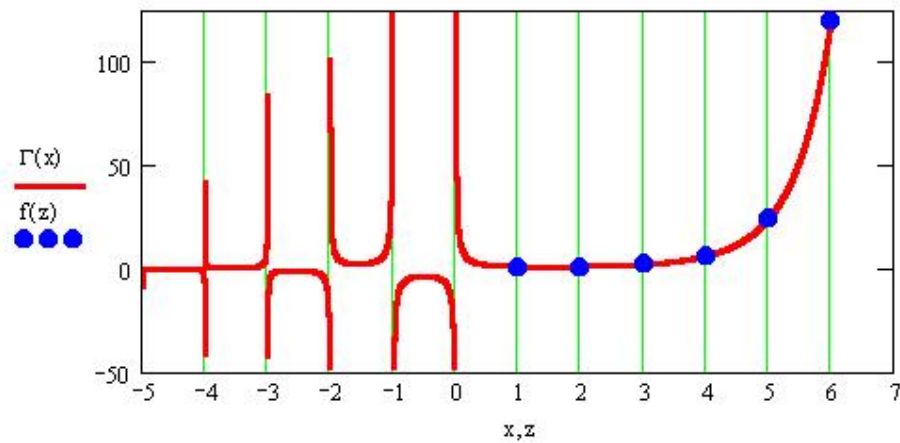
$$\Gamma(3.2) = 2.424$$

La función gamma no está definida para enteros negativos. Para argumentos enteros se cumple que $\Gamma(x) = (x-1)!$

$$x := -5, -4.999 \dots 6$$

$$f(z) := (z-1)!$$

$$z := 1, 2 \dots 6$$



Una relación interesante de estas funciones, que la relacionan con la función factorial es:

$$\Gamma(x) := (x-1) \cdot \Gamma(x-1)$$

Por ejemplo:

$$\Gamma(5.3) = 38.078$$

$$4.3 \cdot \Gamma(4.3) = 38.078$$

También:

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) := \sqrt{\pi}$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = 1.772$$

$$\sqrt{\pi} = 1.772$$

La función if. Funciones discontinuas o con indeterminaciones

Con frecuencia es necesario utilizar funciones discontinuas o que presentan indeterminaciones para ciertos valores de coordenadas. Esto sucede con la función $\sin(x)/x$ en $x = 0$.

Esta función está indefinida para $x=0$, si bien tiende a 1 cuando x tiende a cero. Una forma de asignar el valor 1 a dicha función en $x = 0$ es mediante la función **if**.

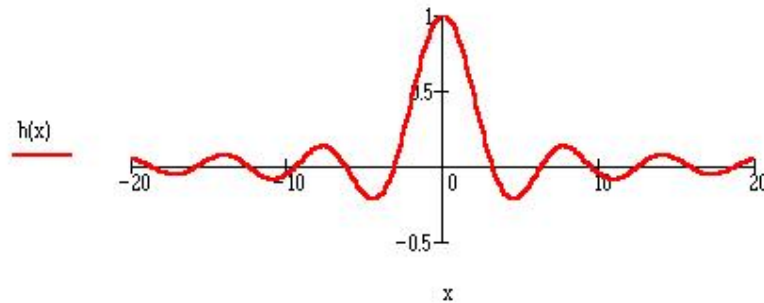
La función **if** tiene 3 argumentos separados por comas, el primer argumento es una condición, en este caso una igualdad lógica (Ctrl+).

Si dicha igualdad se cumple la función toma el valor del segundo argumento, en caso contrario el del tercer argumento.

$$h(x) := \text{if} \left(x = 0, 1, \frac{\sin(x)}{x} \right)$$

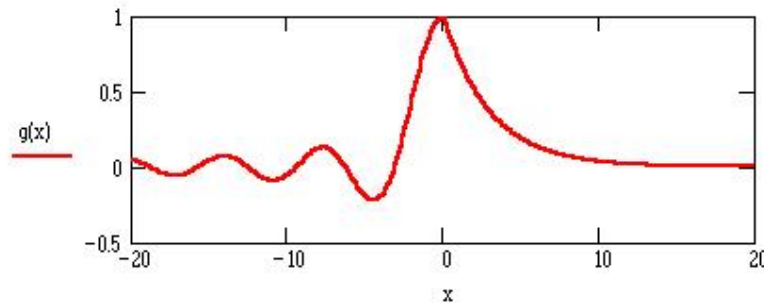
$$h(0) = 1$$

$$x := -20, -19.9 \dots 20$$



Supongamos que queremos construir una función $g(x)$, que para $x < 0$, tiene la forma de $h(x)$, pero que para $x > 0$, adopta la forma $\exp(-x/3)$.

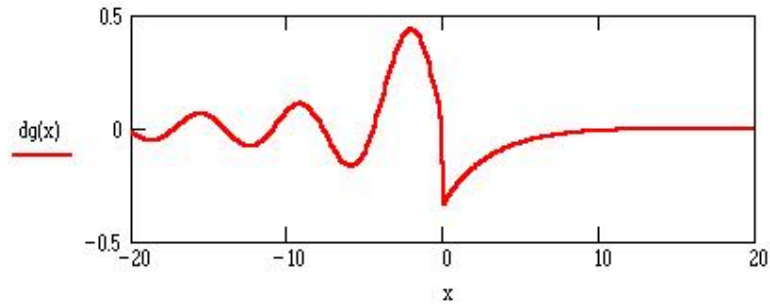
$$g(x) := \text{if} \left(x \leq 0, h(x), e^{-\frac{x}{3}} \right)$$



Esta función puede ser integrada o diferenciada como cualquier otra función

$$\int_{-20}^{20} g(x) \, dx = 4.544$$

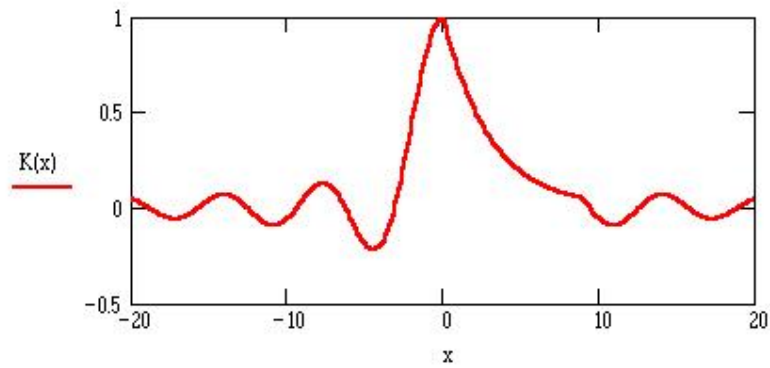
$$dg(x) := \frac{d}{dx} g(x)$$



La función derivada tiene una discontinuidad en $x=0$, como es de esperar

La función if puede ser aplicada reiteradamente. Supongamos que de nuevo, para $x > 9$, la función tiene la forma $h(x)$

$K(x) := \text{if}(x > 9, h(x), g(x))$



Ajuste de curvas polinómico

Este documento muestra cómo ajustar una función cuadrática a un conjunto de datos. Esta misma técnica sirve para otros tipos de ajuste de curvas y para la regresión múltiple (una regresión con varias variables independientes).

Primero lea los datos a partir de archivos externos:

```
x := READPRN("data1.prn")
```

```
y := READPRN("data2.prn")
```

Ambos archivos deben tener el mismo tamaño

```
length(x) = 100
```

```
length(y) = 100
```

```
N := length(x)
```

Ajuste lineal simple

```
corr(x, y) = 0.957
```

```
m := slope(x, y)
```

```
b := intercept(x, y)
```

```
lineal(x) := m · x + b
```

Calcule el error cuadrático medio:

$$ECS_L := \sum \left[(y - \text{lineal}(x))^2 \right]$$

$$ECM_L := \frac{ECS_L}{N - 2}$$

$$ECM_L = 1.914 \times 10^9$$

Ajuste cuadrático utilizando operaciones de matrices

Cree una segunda variable (x^2) y una matriz X :

```
x2 := (x^2)
```

```
i := 0.. N - 1
```

```
X[i, 0] := 1
```

```
X[i, 1] := x
```

```
X[i, 2] := x2
```

```
b := (X^T · X)^-1 · (X^T · y)
```

$$b = \begin{pmatrix} 3.753 \times 10^4 \\ 62.153 \\ 0.439 \end{pmatrix}$$

Curva ajustada:

```
quad(x) := b0 + b1 · x + b2 · x^2
```

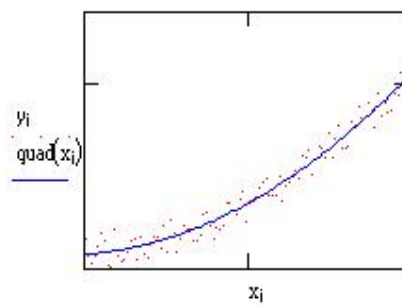
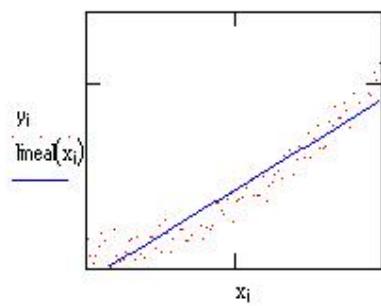
Calcule el error cuadrático medio:

$$ECS_Q := \sum \left[(y - \text{quad}(x))^2 \right]$$

$$ECM_Q := \frac{ECS_Q}{N - 3}$$

$$ECM_Q = 8.294 \times 10^8$$

Trazado de las curvas respecto a los datos

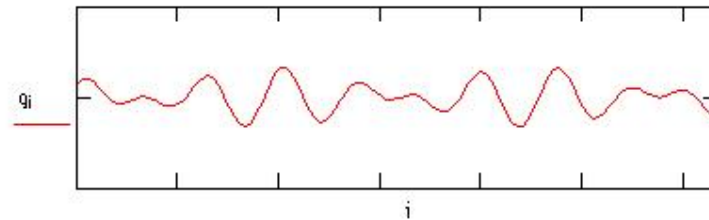


Filtrado de una señal con una FFT

Defina la señal:

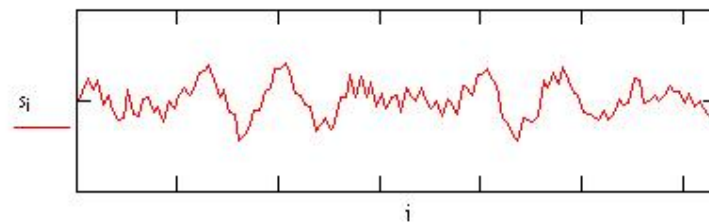
$i := 0..127$

$$q_i := \sin\left(\frac{i}{128} \cdot 14 \cdot \pi\right) + \cos\left(\frac{i}{128} \cdot 19 \cdot \pi\right)$$



Añada algo de ruido:

$$s_i := q_i + \text{rnd}(2) - 1$$



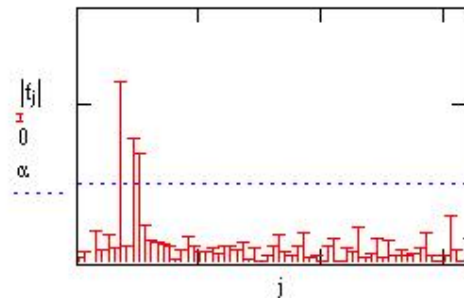
Tome la transformación discreta de Fourier:

$$f := \text{fft}(s)$$

$$j := 0..64$$

$$\alpha := 2.5$$

... Defina el umbral de supresión de ruido espectral.



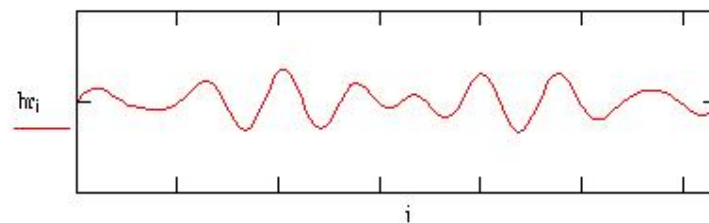
← Señal

← Ruido

Filtre y tome la transformación inversa:

$$g_j := f_j \cdot \mathbb{I}(|f_j| - \alpha)$$

$$h_i := \text{ifft}(g)$$



Trazado de histogramas -- Lanzamiento de una moneda al azar

Vamos a definir la siguiente función

La función `rnd(1)` retorna un número aleatorio entre 0 y 1.

La función de Heaviside $\Phi(x)$, retorna 1 si $x > 0$, o 0 si $x < 0$.

$\text{lanzamiento}(n) \equiv \Phi(\text{rnd}(1) - .5)$

Esta función retorna de forma aleatoria 0 o 1, y simula la cara o cruz en el lanzamiento de una moneda

$n := 0..5$

`lanzamiento(n)`

0
0
1
0
1
0

Si repite esta operación varias veces verá que el resultado siempre es diferente

Vamos a efectuar 200 jugadas en las que realizaremos 6 lanzamientos por jugada

`jugadas := 200`

... 200 jugadas, con 6 lanzamientos de moneda cada una.

`lanzamientos := 6`

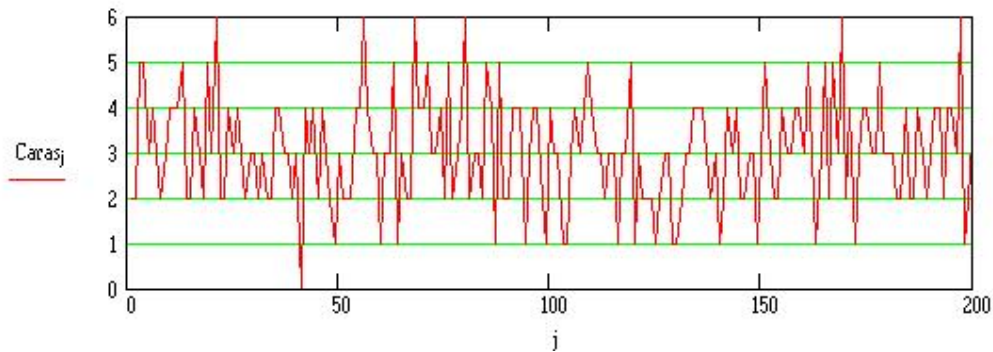
`j := 1..jugadas`

`k := 1..lanzamientos`

$\text{Caras}_j := \sum_k \text{lanzamiento}(1)$

... Número de "caras" por jugada

Los resultados tienen este aspecto:



Vamos a crear ahora un histograma:

`k1 := 0..lanzamientos + 1`

`intervalosk1 := k1`

... Límites del intervalo

`frec := hist(intervalos, Caras)`

`k := 0..lanzamientos`

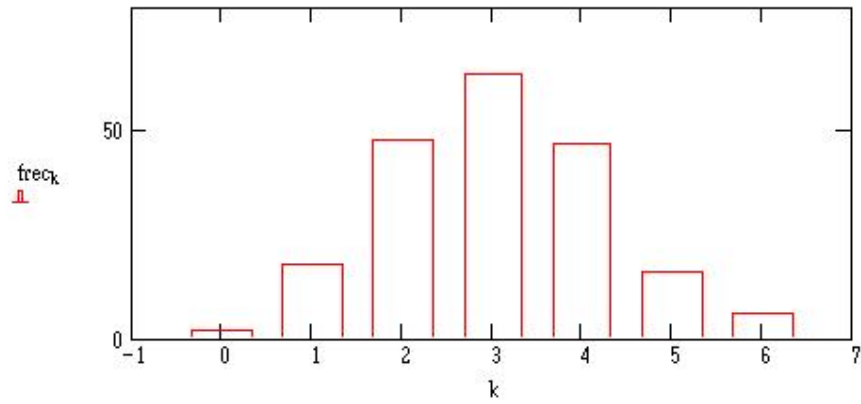


Tabla de frecuencias

frec =

2
18
48
64
47
16
6

El vector `frec` nos proporciona el número de veces que sale

0 caras por jugada (7 veces),

1 cara por jugada (10 veces)

2 caras por jugada (44 veces)

3 caras por jugada (64 veces)

4 caras por jugada (47 veces)

5 caras por jugada (27 veces) y

6 caras por jugada (2 veces)

Ajuste de curvas no polinómicas

Supongamos un conjunto de datos $x1, y1$

$$x1 := \begin{pmatrix} 2 \\ 6 \\ 8 \\ 11 \\ 14 \end{pmatrix}$$

$$y1 := \begin{pmatrix} 2.1 \\ 3.5 \\ 4.2 \\ 4.3 \\ 4.6 \end{pmatrix}$$

$$N := \text{length}(x1)$$

$$N = 5$$

y supongamos además, que estos datos se adaptan al modelo representado por la función

$$f(x, A, B) := \frac{A \cdot x}{(B + x)}$$

Siendo A y B parámetros desconocidos, los cuales serán obtenidos por ajuste numérico. La desviación cuadrática media se define

$$S(A, B) := \sum_{i=0}^{N-1} \left(y1_i - f(x1_i, A, B) \right)^2$$

Es necesario introducir valores de A y B aproximados

$$A := 6$$

$$B := 4$$

$$S(A, B) = 0.0744$$

Given

Se necesitan también tantas relaciones como constantes de ajusta. La relación $A > 0$ es arbitraria y podría haberse utilizado, por ejemplo $B > 0$ o $A > B$ etc.

$$A > 0$$

$$S(A, B) = 0$$

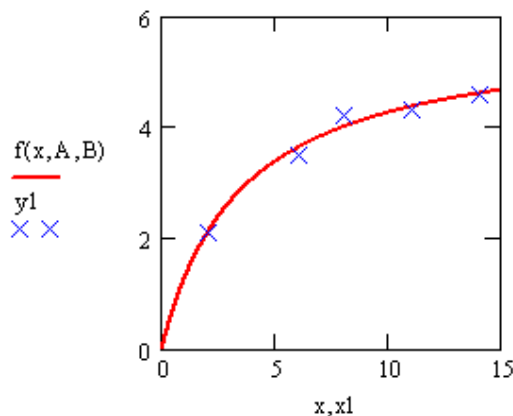
$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} := \text{Minerr}(A, B)$$

$$A = 5.768$$

Valores ajustados

$$B = 3.526$$

$$S(A, B) = 0.0611$$



Estimación del error en la determinación de las constantes A y B

$$CA := \sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{d}{dA} f(x1_i, A, B) \right)^2$$

$$CB := \sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{d}{dB} f(x1_i, A, B) \right)^2$$

$$CAB := \sum_{i=0}^{N-1} \left[\left(\frac{d}{dA} f(x1_i, A, B) \right) \cdot \left(\frac{d}{dB} f(x1_i, A, B) \right) \right]$$

$$C := \begin{pmatrix} CA & CAB \\ CAB & CB \end{pmatrix}$$

$$D := C^{-1}$$

Parámetros

$$p := 2$$

$$\sigma := \sqrt{\frac{S(A, B)}{N - p}}$$

Coefficientes

$$\sigma A := \sigma \sqrt{D_{0,0}}$$

$$\sigma B := \sigma \sqrt{D_{1,1}}$$

$$\rho := \frac{D_{1,0}}{\sqrt{D_{0,0} \cdot D_{1,1}}}$$

$$A = 5.768$$

$$\sigma A = 0.28$$

$$\text{Luego } A = 5.768 \pm 0.28$$

$$B = 3.526$$

$$\sigma B = 0.554$$

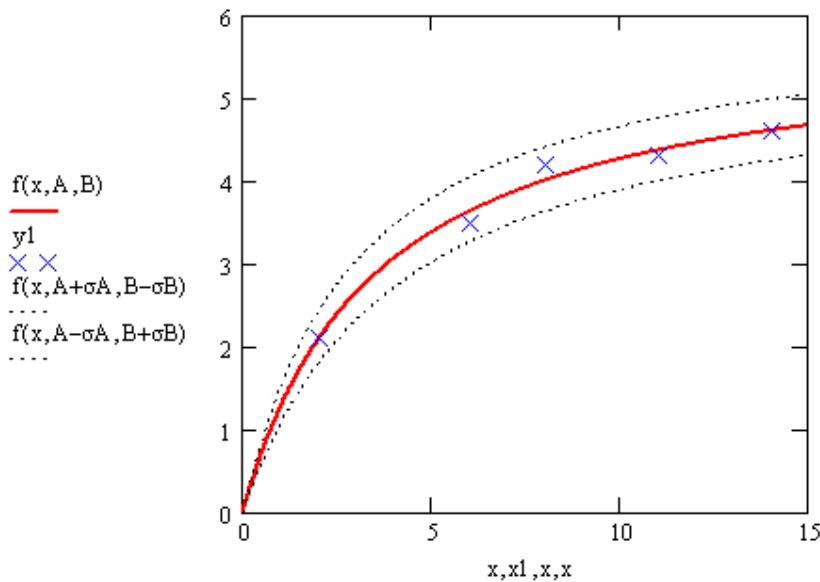
$$\text{Luego } B = 3.526 \pm 0.554$$

$$\rho = 0.9397$$

Dependencia entre los parámetros.

Un valor igual a 1 indica que los parámetros son dependientes y por lo tanto no pueden ser calculados

$i := 0..N - 1$



Funciones de distribución de datos

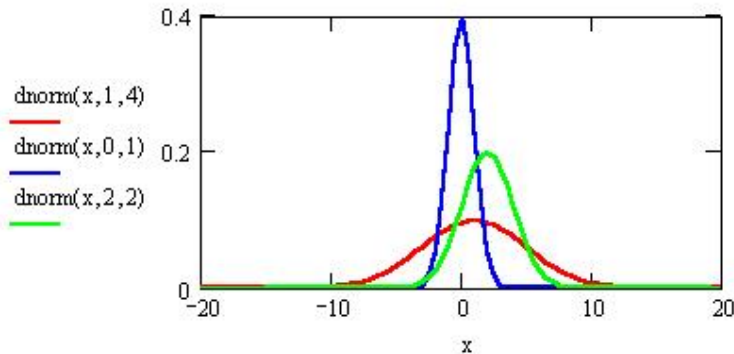
Distribución Gaussiana:

La función **Gaussiana** o **función de distribución normal** viene dada por:

$$\text{dnorm}(x, \mu, \sigma) := \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \sigma^2}} \cdot \exp\left[-\frac{(x - \mu)^2}{2 \cdot \sigma^2}\right]$$

Donde μ es el valor medio y σ la desviación standard. El caso especial en el que $\mu=0$ and $\sigma=1$ (**dnorm(x,0,1)**) se conoce como **Gaussiana standard**. Cualquier distribución Gaussiana puede expresarse de acuerdo a una Gaussiana standard mediante el cambio de variable $z = (x-\mu)/\sigma$.

$x := -20, -19.5 \dots 20$



La probabilidad de encontrar un valor x , comprendido en el intervalo $[x, x+dx]$, viene dada por: $\text{dnorm}(x, \mu, \sigma)dx$.

Lo anterior es rigurosamente cierto solo en el límite $dx \rightarrow 0$, aunque es también una buena aproximación para dx finito, siempre que $dx \ll \sigma$.

Una propiedad de esta función es su carácter simétrico, es decir **dnorm(x,μ,σ) = dnorm(2μ-x,μ,σ)**

$$\text{dnorm}(4, 2, 3) = 0.106$$

$$\text{dnorm}(2 \cdot 2 - 4, 2, 3) = 0.106$$

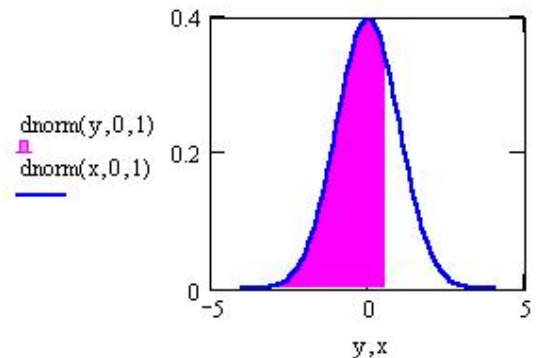
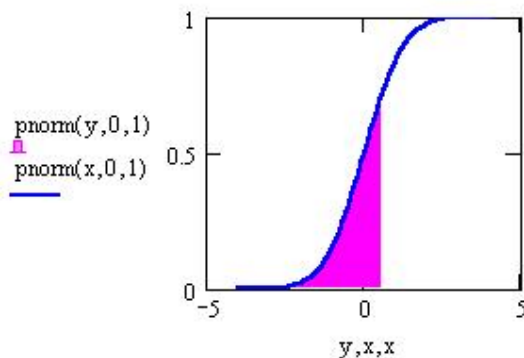
La probabilidad de que x sea menor que a , según una distribución Gaussiana viene dada por:

$$\text{pnorm}(a, \mu, \sigma) := \int_{-\infty}^a \text{dnorm}(x, \mu, \sigma) dx$$

$$\text{pnorm}(0.5, 0, 1) = 0.691$$

$$y := -4, -3.98 \dots 0.5$$

$$x := -4, -3.9 \dots 4$$



A esta función se le conoce como función Gaussiana acumulada. La probabilidad total será:

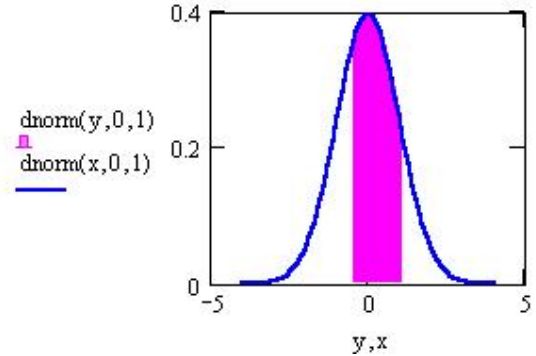
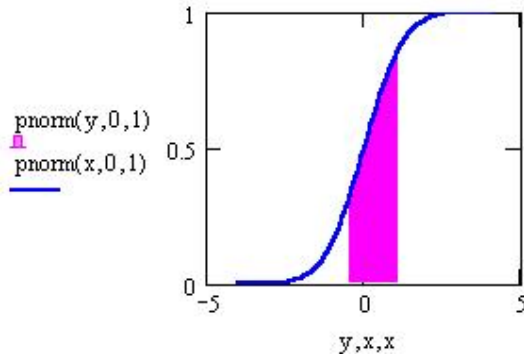
$\text{pnorm}(\infty, 4, 3) = 1$
 $\text{pnorm}(\infty, 0, 1) = 1$

Podemos expresar la probabilidad de encontrar el valor de x comprendido en el intervalo $[a, b]$ ($a < b$) como:

$\Delta P(a, b, \mu, \sigma) := \text{pnorm}(b, \mu, \sigma) - \text{pnorm}(a, \mu, \sigma)$

$\Delta P(-0.5, 1, 0, 1) = 0.533$

$y := -0.5, -0.49 \dots 1$



A menudo, es necesario determinar la inversa de la función pnorm , es decir, el valor de a , tal que la probabilidad de que $x < a$, tenga un valor concreto p .

$\text{apro} := .5$

$\text{TOL} := 10^{-11}$

$\text{qnorm}(p, \mu, \sigma) := \text{root}(\text{pnorm}(\text{apro}, \mu, \sigma) - p, \text{apro})$

La función **root** necesita de un valor de prueba, que llamamos apro (valor aproximado de a), la función qnorm , retorna el valor correcto de a aunque esta es una función numérica que en ocasiones necesita de un cálculo refinado. La función $\text{TOL} := 10^{-11}$, controla la precisión del cálculo.

Veamos como funciona. Imaginemos una distribución standar, para la que queremos calcular el valor de a , tal que la probabilidad acumulada sea del 95% ($p=0.95$). Vamos a empezar con $\text{ap} = 0.5$

$\text{qnorm}(0.95, 0, 1) = 1.645$

Podemos ahora calcular que efectivamente, para esta distribución, la probabilidad de que $x < a$ es del 95%

$\text{pnorm}(1.645, 0, 1) = 0.95$

Las funciones $\text{pnorm}(x, \mu, \sigma) := a$ y $\text{qnorm}(a, \mu, \sigma) := x$, son por lo tanto funciones inversas.

Generación de un conjunto de datos de acuerdo a una distribución Gaussiana.

Existen muchas situaciones en la que se necesita generar puntos distribuidos de acuerdo a una Gaussiana.

El método de Box-Muller permite generar desviaciones normales con media y desviación estándar aplicando la fórmula siguiente

La función $\text{rnd}(x)$ genera un número aleatorio comprendido entre 0 y 1

$\text{anorm}(\mu, \sigma) := \mu + \sigma \cdot \sqrt{-2 \cdot \ln(\text{rnd}(1))} \cdot \cos(2 \cdot \pi \cdot \text{rnd}(1))$

Veamos un ejemplo:

$\mu := 10$

$\sigma := 8$

$N := 10000$

Número de datos

$i := 0 \dots N$

$z_1 := \text{anorm}(\mu, \sigma)$

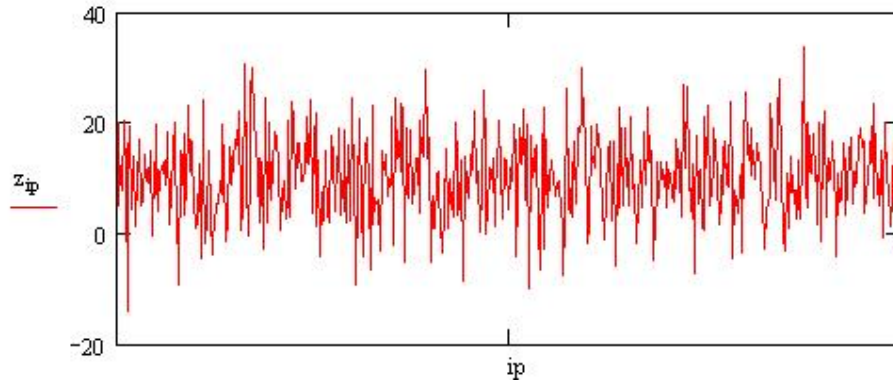
Si chequeamos nuestros datos

$\text{mean}(z) = 10.09$

$\text{stdev}(z) = 8.014$

Estos valores no son los exactos debido a fluctuaciones, lo que se debe a que el número de datos de que se dispone es finito. Vamos a representar una fracción de nuestros datos:

$ip := 0, 1 \dots 500$



Esta representación se parece mucho a lo que se ve en un osciloscopio cuando se dispone de un buen amplificador. Este tipo de curva está afectada por lo que se denomina *ruido*, y consta de una banda centrada en μ , con anchura de $\sim 5\sigma$. Vamos a comparar estos datos con una distribución Gaussiana

$i := 0 \dots 99$

$x_0 := -5 \cdot \sigma + \mu$

$\delta x := 0.1 \cdot \sigma$

$x_{i+1} := x_i + \delta x$

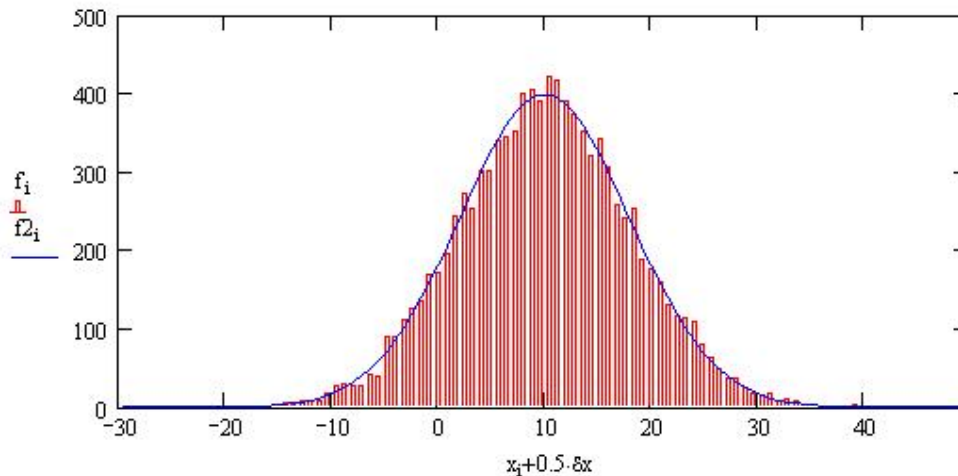
x representa una cierta anchura de banda. Nuestros datos los vamos a dividir en 100 grupos o intervalos ($i := 0 \dots 99$) distribuidos desde $\mu + 5\sigma$ hasta $\mu - 5\sigma$. Dicho agrupamiento se hace con la función $\text{hist}(x, z)$ (histograma de x, z). Esta función crea un vector de 100 puntos, en el que en cada elemento representa la frecuencia con la que aparece cada valor de z .

$f := \text{hist}(x, z)$

La distribución Gaussiana teórica será

$$f2_i := N \cdot \delta x \cdot \text{dnorm}\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}, \mu, \sigma\right)$$

Si representamos f y $f2$



Intervalo de Confianza

Una medida científica no esta completa si no se estima el error que conlleva. Si se conoce la desviación standar, la función **qnorm** nos permite realizar una estimación de esta cantidad.

Vamos a definir la función:

Esta función nos da el Intervalo de confianza para una distribución normal, donde p es el nivel de probabilidad.

$$\text{Intervalo}(p, \mu, \sigma) := \begin{pmatrix} \text{qnorm}\left(\frac{1-p}{2}, \mu, \sigma\right) \\ \text{qnorm}\left(\frac{1+p}{2}, \mu, \sigma\right) \end{pmatrix}$$

Notese que:

$$\frac{(1+p)}{2} - \frac{(1-p)}{2} = p$$

Luego esta función nos da los valores de x (superior e inferior) que encierran una cierta probabilidad de encontrar un resultado.

Calculemos el intervalo de probabilidad para un límite de confianza del 95%

Recuerdese que apro y bpro son valores de prueba, y necesitamos modificarlos hasta que se obtiene una solución convergente

$$\text{Intervalo}(0.95, 0, 1) = \begin{pmatrix} -1.96 \\ 1.96 \end{pmatrix}$$

Es decir, el 95% de los datos estan situados en el intervalo de x que va de $\mu - 1.96\sigma$ a $\mu + 1.96\sigma$.

Para nuestros datos

$$\mu - 1.96 \cdot \sigma = -5.68$$

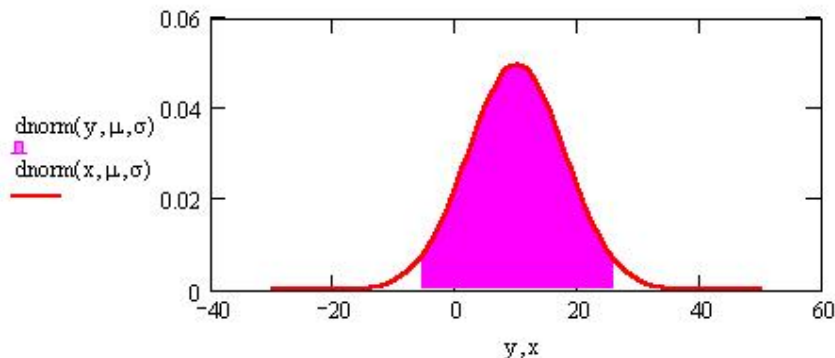
$$\mu + 1.96 \cdot \sigma = 25.68$$

$$\begin{pmatrix} \text{bajo} \\ \text{alto} \end{pmatrix} := \text{Intervalo}(0.95, \mu, \sigma)$$

$$\begin{pmatrix} \text{bajo} \\ \text{alto} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5.68 \\ 25.68 \end{pmatrix}$$

$$x := \text{floor}(\mu - 5 \cdot \sigma), \text{floor}(\mu - 5 \cdot \sigma) + 1 .. \text{floor}(\mu + 5 \cdot \sigma)$$

$$y := \frac{\text{floor}(\text{bajo} \cdot 10)}{10}, \frac{\text{floor}(\text{bajo} \cdot 10)}{10} + 0.1 .. \frac{\text{floor}(\text{alto} \cdot 10)}{10}$$



La región sombreada es la correspondiente a un intervalo de confianza del 95%

Con esta expresión calculamos la fracción de puntos experimentales que estan situados fuera del intervalo de confianza. El resultado debe ser próximo al 5% (0.05). $z_i < \text{bajo}$ da 1 si es verdad y cero si es falso.

$$\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \left[(z_i < \text{bajo}) + (z_i > \text{alto}) \right] = 0.0485$$

De esta forma se puede estimar el error (Confianza) si σ es conocida. **¿Pero como se determina esta magnitud?**

En muchas aplicaciones estadísticas se necesita conocer el valor de σ . Este valor no se puede medir experimentalmente, pero es posible estimarlo mediante un número finito de medidas.

Vamos a repartir nuestros datos en conjuntos de N_s datos.

$N_s := 4$

Numero de puntos por conjunto de datos

Numero de conjunto de datos. Es decir, nuestros 10000 datos lo vamos a transformar en 2500, de forma que cada punto es en realidad la media de 4 datos.

$$N_t := \left(\frac{N}{N_s} \right)$$

$N_t = 2500$

$k := 0..N_t - 1$

Creamos un vector, **promedio**, en el que cada dato es en realidad la media de 4 datos.

Para este vector:

$$\text{promedio}_k := \frac{1}{N_s} \cdot \left(\sum_{j=0}^{N_s-1} z_{N_t \cdot j + k} \right)$$

$\text{mean}(\text{promedio}) = 10.092$

$\text{stdev}(\text{promedio}) = 4.012$

Estimación de la desviación standard de una distribución a partir de un conjunto de datos

Primero estimaremos la varianza mediante la siguiente expresión:

Esta función determina la varianza de cada uno de los N_t conjuntos de datos

$$\text{var}_k := \frac{\sum_{j=0}^{N_s-1} \left(z_{N_t \cdot j + k} - \text{promedio}_k \right)^2}{N_s - 1}$$

El valor medio de la varianza es una buena estimación de σ^2

$\text{mean}(\text{var}) = 64.144$

$$\sigma^2 = 64$$

La función de distribución Chi al cuadrado, χ^2 :

Esta forma de calcular la desviación standard, σ , es correcta para otras funciones de distribución.

Sin embargo, para saber lo buena que es la estimación de σ , necesitamos conocer cual es la distribución de las varianzas de la muestra. En teoría estadística se comprueba que la función de distribución para la varianza de las muestras, puede ser expresada en términos de la función de distribución χ^2 (función chi al cuadrado) definida como:

En esta función $x \geq 0$ y d es un entero > 0 , llamado grados de libertad.

El símbolo $\Gamma(d/2)$ representa la [función gamma de Euler](#) de argumento $d/2$.

$$\text{chi}(x, d) := \frac{e^{-\frac{x}{2}}}{2 \cdot \Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} \cdot \left(\frac{x}{2}\right)^{\frac{d}{2}-1}$$

Vamos a comparar la distribución observada de los valores de las varianzas de las muestras var_k , con las predicciones de la distribución χ^2 :

$m := 0..100$

$\delta x := 0.04$

$$x_m := 5x \cdot m \cdot \sigma^2$$

Esto nos permite crear segmentos espaciados $0.04\sigma^2$

$$F := \text{hist}(x, \text{var})$$

Introducimos las varianzas en dichos segmentos

Creamos una variable de intervalo m, cuyo tamaño es uno menos que el número de segmentos.

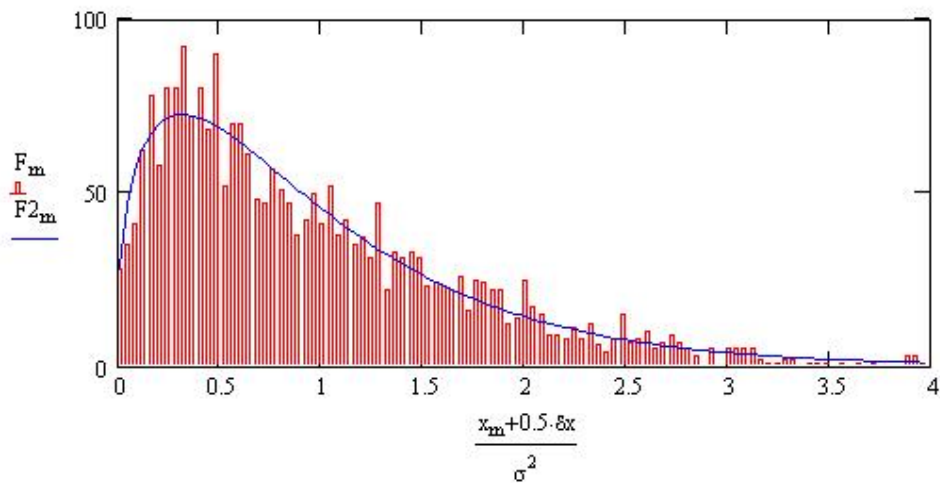
$$m := 0..99$$

$$d := Ns - 1$$

Grados de libertad

Esta expresión nos permite predecir, de acuerdo a la distribución χ^2 , el número de puntos en cada segmento centrado en el valor $(x_m + x_{m+1})/2$

$$F2_m := Nt \cdot 0.04 \cdot d \cdot \chi^2 \left[\frac{0.5 \cdot (x_m + x_{m+1})}{\sigma^2} \cdot d, d \right]$$



Esta gráfica nos enseña que si el tamaño de la muestra de datos es pequeño, el valor de la desviación standard calculado puede ser muy diferente del real. Lo normal es que el valor σ calculado sea inferior al real. Este error es bastante frecuente.

Para comprobar este efecto, vamos a calcular con que frecuencia nuestros valores medios (avg) difieren una cantidad superior a 2σ del valor σ .

Cantidad superior al 5% (13.8%) que es lo que cabe esperar para una distribución normal.

$$\frac{1}{Nt} \cdot \sum_k \left(\left| \text{promedio}_k - \mu \right| > 2 \cdot \sqrt{\frac{\text{var}_k}{Ns}} \right) = 0.141$$

Si usamos el valor verdadero de σ

Lo que es proximo al 5%, como cabe esperar para una distribución Gaussiana.

$$\frac{1}{Nt} \cdot \sum_k \left(\left| \text{promedio}_k - \mu \right| > 2 \cdot \sqrt{\frac{\sigma^2}{Ns}} \right) = 0.0508$$

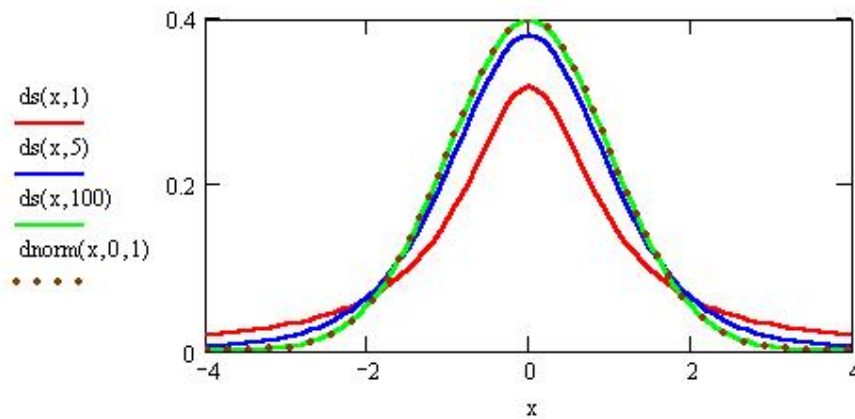
Por lo tanto el problema sigue existiendo, ya que no es posible estimar el error, si además tenemos que calcular también σ a partir de los datos experimentales. Para resolver este problema suele utilizarse la distribución t de student.

Distribución de Student:

La distribución de Student se define como la relación:

$$ds(x, d) := \frac{\Gamma\left(\frac{d+1}{2}\right)}{\sqrt{d \cdot \pi} \cdot \Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} \cdot \left(1 + \frac{x^2}{d}\right)^{-\frac{d+1}{2}}$$

$x := -4, -3.9 \dots 4$



La distribución de student tiende a la distribución Gaussiana normal cuando d tiende a infinito. Podemos definir las funciones acumulada y acumulada inversa de Student, de forma similar a como se hizo con la Gaussiana

$$ps(a, d) := \int_{-\infty}^a ds(x, d) dx$$

$$qs(p, d) := \text{root}(ps(\text{apro}, d) - p, \text{apro})$$

$$ps(3.18, Ns - 1) = 0.975$$

$$qs(0.975, Ns - 1) = 3.182$$

Podemos también definir el intervalo de confianza como

$$\text{InterS}(p, d) := \left(qs\left(\frac{1-p}{2}, d\right), qs\left(\frac{1+p}{2}, d\right) \right)$$

Por ejemplo, los valores de x para un intervalo de confianza del 95% son, como el de nuestro ejemplo son:

$$\text{InterS}(0.95, Ns - 1) = \left(-3.182, 3.182 \right)$$

Llamaremos

$$\text{rango} := 3.182$$

Vamos a chequear la fracción de medias de muestras que difieren de μ más que el rango predicho por la distribución de student.

$$\frac{1}{Nt} \sum_k \left(\left| \text{promedio}_k - \mu \right| > \text{rango} \cdot \sqrt{\frac{\text{var}_k}{Ns}} \right) = 0.0524$$

Muy proximo al 5% que cabe esperar

Integración y diferenciación numérica de datos

En primer lugar, vamos a generar un conjunto que datos que simulen los obtenidos en un experimento. Así, a partir de una [curva Gaussiana](#),

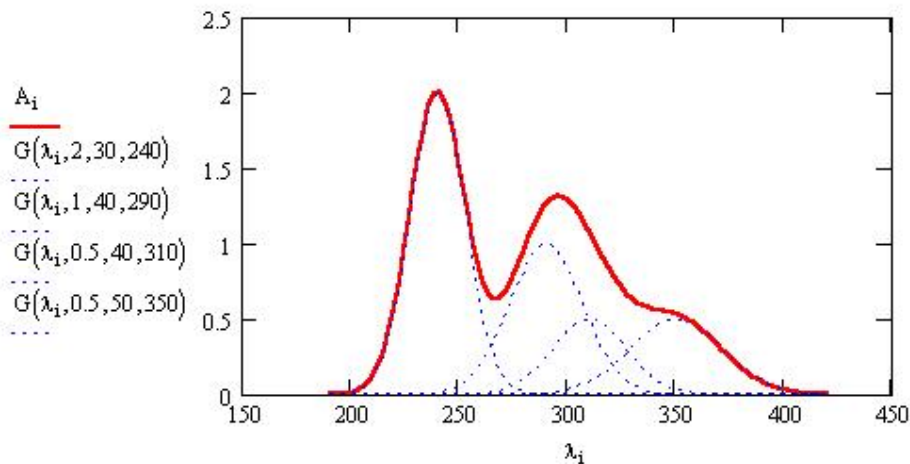
$$G(x, I, h, x_m) := I \cdot e^{-2.773 \cdot \left(\frac{x - x_m}{h} \right)^2}$$

vamos a simular un espectro

$$i := 0..100$$

$$\lambda_i := 190 + \frac{(420 - 190) \cdot i}{100}$$

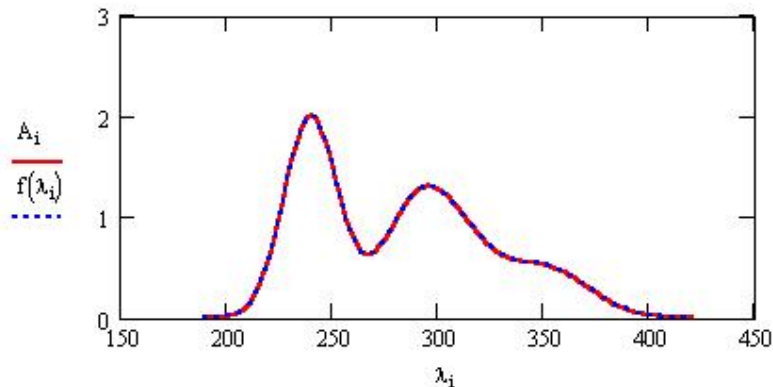
$$A_i := G(\lambda_i, 2, 30, 240) + G(\lambda_i, 1, 40, 290) + G(\lambda_i, 0.5, 40, 310) + G(\lambda_i, 0.5, 50, 350)$$



La función de spline cúbico, nos permite transformar este conjunto de datos en una función de interpolación, que a todos los efectos se comporta como una función analítica

$$V := \text{lspline}(\lambda, A)$$

$$f(x) := \text{interp}(V, \lambda, A, x)$$



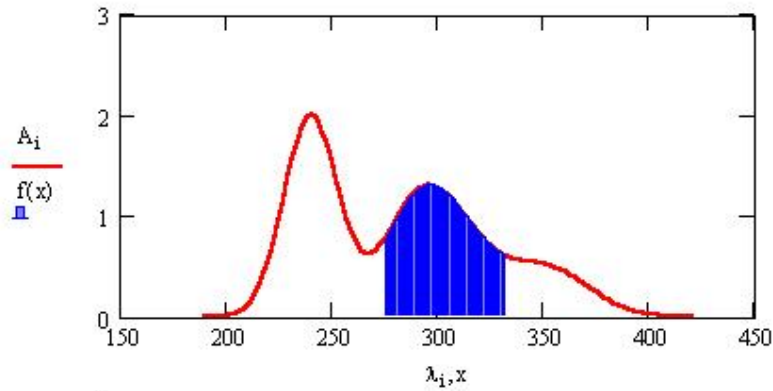
La función $f(x)$ puede ser integrada o diferenciada, utilizando los algoritmos que MathCad utiliza para diferenciar e integrar funciones analíticas

$$\text{Integral}(x1, x2) := \int_{x1}^{x2} f(\lambda) d\lambda$$

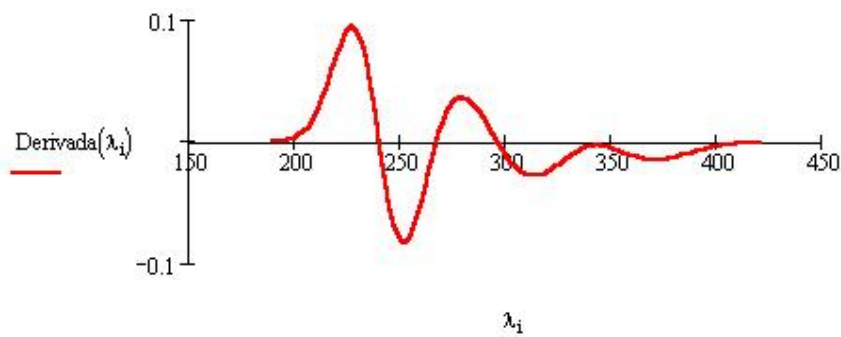
$$\text{Integral}(\lambda_0, \lambda_{\text{last}}(\lambda)) = 154.321$$

$$x := 275, 276..330$$

$$\text{Integral}(275, 330) = 57.27$$



$$\text{Derivada}(\lambda) := \frac{d}{d\lambda} f(\lambda)$$



La derivada nos permite calcular los máximos y mínimos de la curva

$x_a := 300$

$x_1 := \text{root}(\text{Derivada}(x_a), x_a)$

$x_1 = 296.048$

$x_a := 265$

$x_2 := \text{root}\left(\frac{\text{Derivada}(x_a)}{x_a - x_1}, x_a\right)$

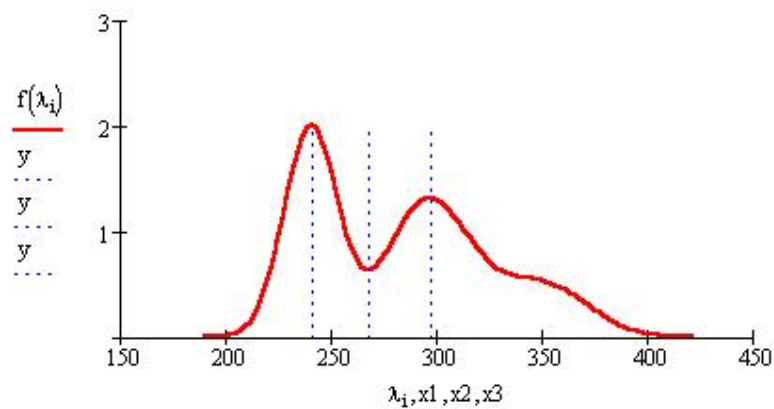
$x_2 = 267.07$

$x_a := 244$

$x_3 := \text{root}\left[\frac{\text{Derivada}(x_a)}{(x_a - x_1) \cdot (x_a - x_2)}, x_a\right]$

$x_3 = 240.633$

$y := 0, 0.1 \dots 2$



Ajuste de datos a una recta

Supongamos que tenemos una serie de datos X-Y los cuales queremos ajustar a la ecuación de una recta. Sean 10 los datos experimentales.

$i := 0 \dots 9$

Nuestros datos experimentales pueden corresponder, por ejemplo, a absorbancias (A) y a concentraciones (C).

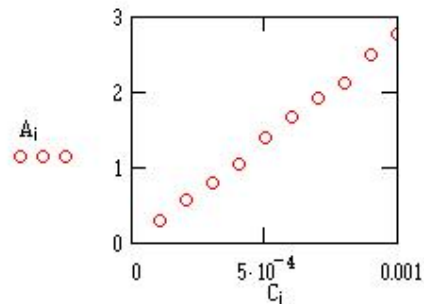
$A_i :=$

0.29
0.57
0.8
1.05
1.4
1.66
1.92
2.1
2.5
2.77

$C_i :=$

0.0001
0.0002
0.0003
0.0004
0.0005
0.0006
0.0007
0.0008
0.0009
0.001

Representación de los datos



En **formato de gráfica**, seleccionar tipo=puntos y simbolos=circulos

Pendiente del ajuste lineal

$m := \text{slope}(C, A)$

$m = 2.739 \times 10^3$

Ordenada en el origen

$b := \text{intercept}(C, A)$

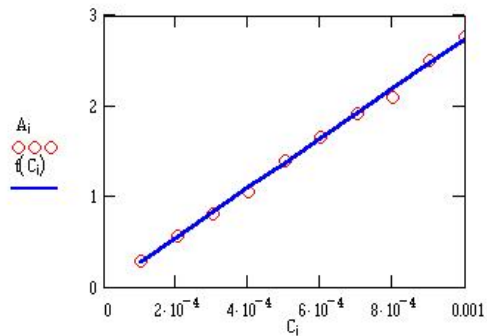
$b = -6.667 \times 10^{-4}$

Coefficiente de correlación

$\text{corr}(C, A) = 0.999$

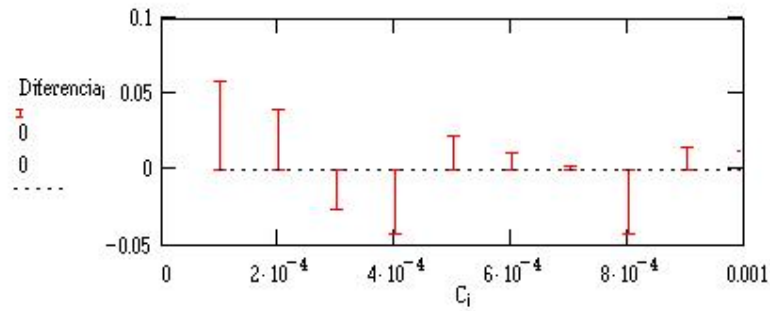
Construcción de la recta teórica

$f(x) := b + m \cdot x$



Vamos a calcular las diferencias entre cada punto teórico y el experimental en tanto por ciento:

$$\text{Diferencia}_i := \frac{A_i - f(C_i)}{A_i}$$



En **formato de gráfica**, seleccionar tipo=error para las dos primeras representaciones. Esto dibuja la diferencia entre ellas

Valor medio de las diferencias

$$\mu := \text{mean}(\text{Diferencia})$$

$$\mu = 4.438 \times 10^{-3}$$

Desviación standard

$$\sigma := \text{stdev}(\text{Diferencia})$$

$$\sigma = 0.032$$

Gaussianas y Lorencianas

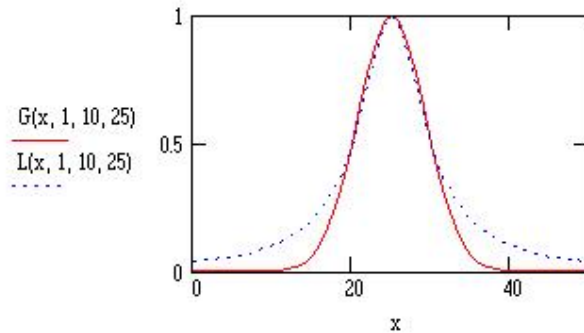
Las curvas $G(x)$ y $L(x)$ que se muestran a continuación definen las denominadas curvas Gaussianas y Lorencianas, respectivamente. Estas curvas tienen forma de picos.

$$G(x, I, w, xm) := I \cdot e^{-2.773 \cdot \left(\frac{x-xm}{w}\right)^2}$$

$$L(x, I, w, xm) := \frac{I}{1 + 4 \cdot \left(\frac{x - xm}{w}\right)^2}$$

Donde I , w y xm representan, la altura, anchura y posición, respectivamente, del pico.

$x := 0, 1.. 50$



Estas funciones pueden ser utilizadas para construir curvas más complejas.

Supongamos que tenemos una serie de 26 Gaussianas separadas entre si 10 unidades de x

$i := 0.. 25$

$xm_i := 10 \cdot (i + 1)$

Supondremos las alturas de estos se rigen por una función del tipo: (Maxwell-Boltzman)

$$I_i := (2 \cdot i + 1) \cdot e^{\frac{-i \cdot (i+1)}{100}}$$

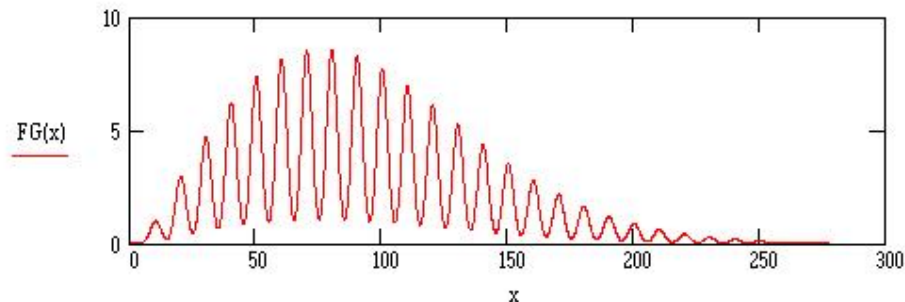
Por último supondremos que las anchuras de todos estos picos son iguales

$w := 5$

La curva total será

$$FG(x) := \sum_i G(x, I_i, w, xm_i)$$

$x := 0, 0.1.. 300$



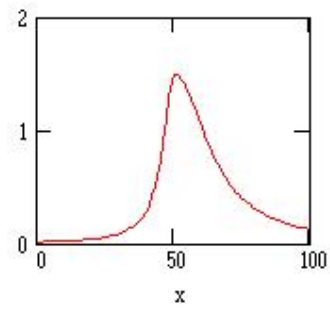
Los espectros de microondas de moléculas en estado gaseoso se adaptan bien a este tipo de curvas

Para picos asimétricos, es posible construir curvas como trozos de otras curvas. Ver la [función if](#)

$LA(x, I, w1, w2, xm) := \text{if}(x < xm, L(x, I, w1, xm), L(x, I, w2, xm))$

$x := 0, 1.. 100$

LA(x, 15, 10, 30, 50)



Alisado de curvas

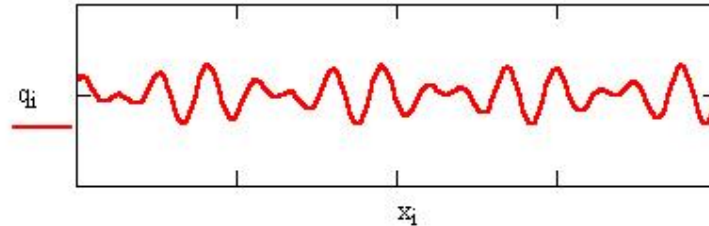
Defina la señal:

$n := 200$

$i := 0..n$

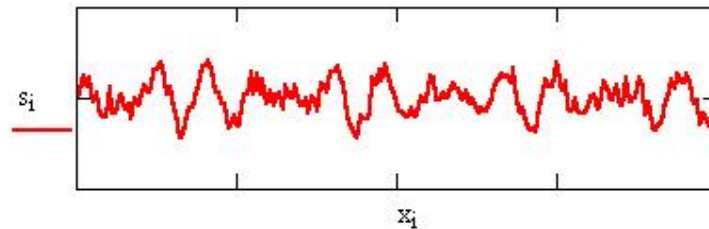
$x_i := i$

$$q_i := \sin\left(\frac{x_i}{128} \cdot 14 \cdot \pi\right) + \cos\left(\frac{x_i}{128} \cdot 19 \cdot \pi\right)$$



Añada algo de ruido:

$$s_i := q_i + \text{rnd}(2) - 1$$



Existen diferentes métodos de alisado o smooth de una curva, dependiendo del tipo de ruido que afecta a la señal. Una opción es utilizar filtros del tipo **TTF**. Otra opción, quizás de las más utilizadas y descrita en este ejemplo es utilizar un nucleo Gaussiano, que consiste en lo siguiente:

Se define la siguiente función de tipo Guassiana

$$K(t) := \frac{1}{0.37 \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot e^{\frac{-t^2}{2 \cdot 0.37^2}}$$

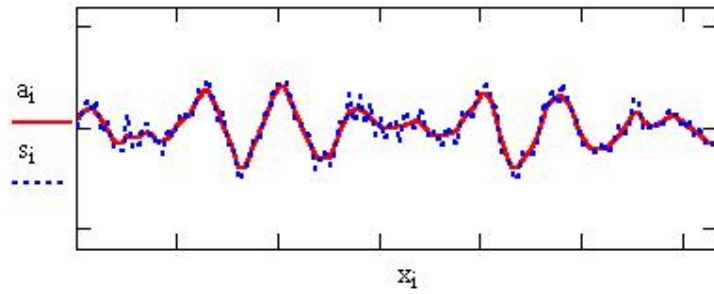
Se define una anchura de banda, b.

El valor de $b > 0$, debe abarcar varias veces el espaciado de x , y su modificación nos permite controlar la magnitud del alisado

$$b := 3$$

Por último se calcula el vector de datos alisados mediante:

$$a_i := \frac{\sum_{j=0}^n K\left(\frac{x_i - x_j}{b}\right) \cdot s_j}{\sum_{j=0}^n K\left(\frac{x_i - x_j}{b}\right)}$$



En versiones superiores del MathCad, este algoritmo se encuentra implimentado como función de usuario

Manejo de datos y trazado de histogramas

Supongamos que en cuatro localizaciones (A, B, C y D) se realizan 6 medidas de determinada variable espaciadas temporalmente. Los valores obtenidos se introducen en 4 vectores que llamaremos A, B, C y D

$i := 0 \dots 5$

<----- Variable de intervalo para el número de medidas

$A_i :=$

2
4
5
7
8
3

$B_i :=$

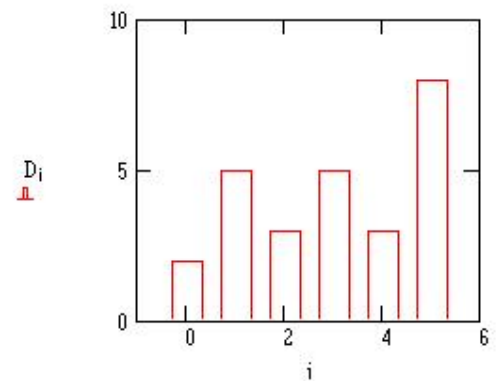
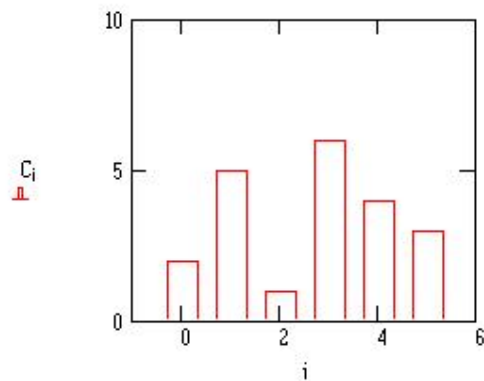
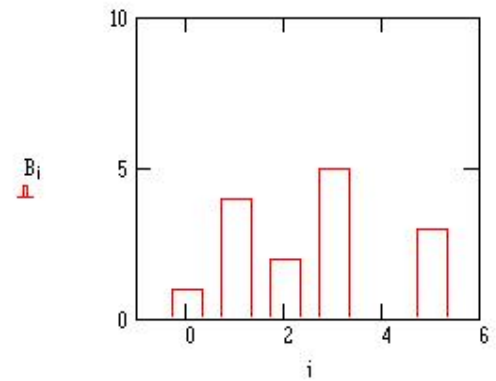
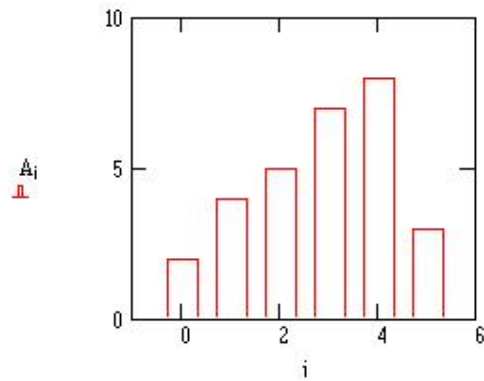
1
4
2
5
0
3

$C_i :=$

2
5
1
6
4
3

$D_i :=$

2
5
3
5
3
8



Vamos a unir estos vectores en una sola matriz

$M2 := \text{augment}(A, B)$

$M3 := \text{augment}(M2, C)$

$M := \text{augment}(M3, D)$

La variable i representa ahora el número de filas, necesitamos definir una nueva variable de intervalo para las columnas

$$M = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 2 & 2 \\ 4 & 4 & 5 & 5 \\ 5 & 2 & 1 & 3 \\ 7 & 5 & 6 & 5 \\ 8 & 0 & 4 & 3 \\ 3 & 3 & 3 & 8 \end{pmatrix}$$

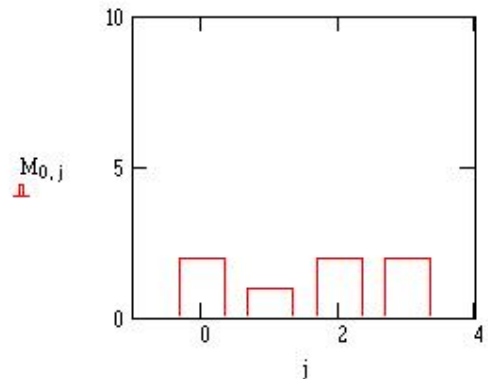
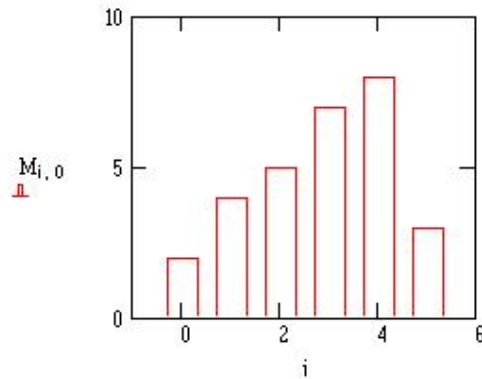
$j := 0..3$

Cualquier término de la matriz puede visualizarse en base a los índices i y j

$M_{\text{filas}, \text{columnas}}$

$M_{2,3} = 3$

La matriz M nos permite representar las columnas, como se ha hecho antes o las filas



La función $\text{mean}(x)$ nos da el valor medio de un vector

$\text{mean}(A) = 4.833$

$\text{mean}(B) = 2.5$

$\text{mean}(C) = 3.5$

$\text{mean}(D) = 4.333$

Esta función también nos permite calcular el valor medio de la columna de cualquier matriz. Una columna de una matriz puede extraerse mediante:

Que evidentemente es igual al vector B .

Además

$\text{mean}(M^{(1)}) = 2.5$

$$M^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 2 \\ 5 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Imaginemos que queremos calcular los valores medios de las filas, y no de las columnas de la matriz M . Para ello calculamos la matriz traspuesta de M

$T := M^T$

$\text{mean}(T^{(0)}) = 1.75$

$\text{mean}(T^{(1)}) = 4.5$

$$T = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 5 & 7 & 8 & 3 \\ 1 & 4 & 2 & 5 & 0 & 3 \\ 2 & 5 & 1 & 6 & 4 & 3 \\ 2 & 5 & 3 & 5 & 3 & 8 \end{pmatrix}$$

$$\text{mean}(T^{(2)}) = 2.75$$

$$\text{mean}(T^{(3)}) = 5.75$$

Vamos a unir ahora todos los datos de los vectores A, B, C y D en una sola columna, que llamaremos Y

$Y := A$

$Y_{i+6} := B_i$

$Y_{i+12} := C_i$

$Y_{i+18} := D_i$

El índice del último dato de Y será

$$\text{last}(Y) = 23$$

y el número de datos

$$\text{length}(Y) = 24$$

Luego vamos a crear una nueva variable de intervalo que abarque los 24 datos disponibles

$$k := 0..23$$

El programa permite obtener información directa del vector Y, como por ejemplo:

La media:

$$\text{mean}(Y) = 3.792$$

La desviación standard:

$$\text{Stdev}(Y) = 2.126$$

La varianza:

$$\text{var}(Y) = 4.332$$

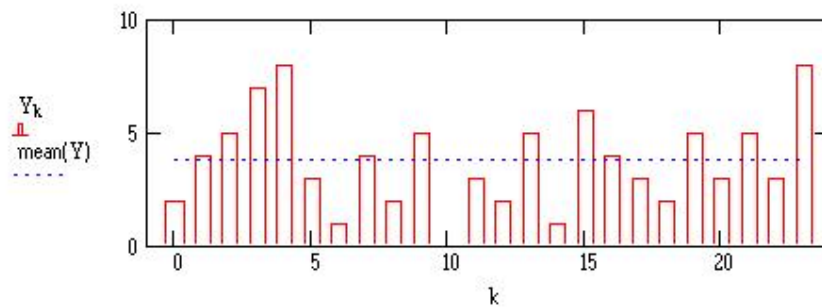
Valor máximo:

$$\text{max}(Y) = 8$$

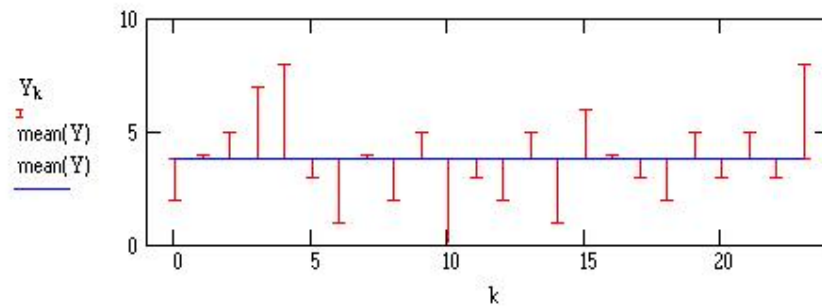
Valor mínimo:

$$\text{min}(Y) = 0$$

Podemos, además representar graficamente los datos:



o también como barras de error



Vamos a agrupar los datos por frecuencias

$$n := 8$$

Sea n el número de intervalos a utilizar

$j := 0..n + 1$

La variable de intervalo requiere un dato más

Vamos a crear los intervalos, mediante la función

$$\text{Inter}_j := \min(Y) + \frac{j}{n} \cdot (\max(Y) - \min(Y))$$

Los intervalos entre los que queremos clasificar nuestros datos serán

$$\text{Inter} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \\ 8 \\ 9 \end{pmatrix} \quad \text{Fre} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 4 \\ 5 \\ 3 \\ 5 \\ 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Y a continuación podemos crear el histograma

$\text{Fre} := \text{hist}(\text{Inter}, Y)$

Que representa el número de veces que aparece cada dato

El significado de los vectores Inter y Fre es el siguiente:

Inter Fre

el valor 0 aparece 1 vez

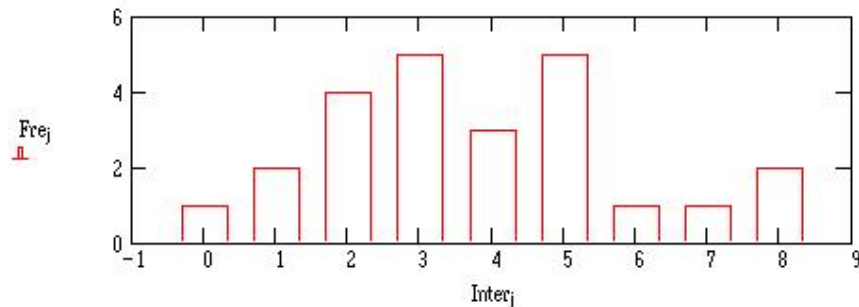
el valor 1 aparece 2 veces

el valor 2 aparece 4 veces

etc.

El vector Fre tiene un dato menos que el Inter, luego:

$j := 0..n$



Vamos a comparar esta distribución con una [función de distribución normal o Gaussiana](#) que viene dada por:

$$\text{dnorm}(x, \mu, \sigma) := \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \sigma^2}} \cdot \exp\left[\frac{-(x - \mu)^2}{2 \cdot \sigma^2}\right]$$

Donde μ es el valor medio y σ la desviación standard.

$\sigma := \text{Stdev}(Y)$

$\mu := \text{mean}(Y)$

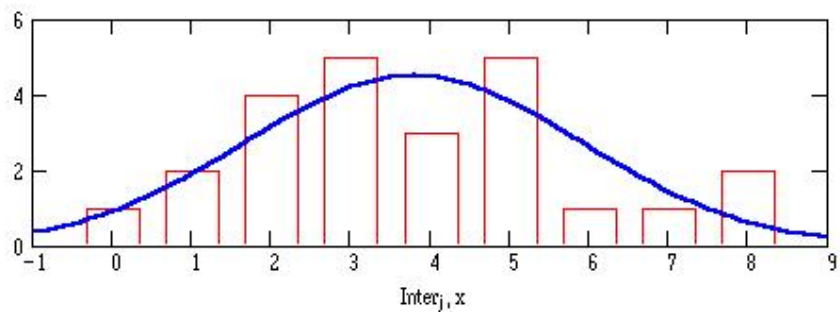
Para obtener la altura adecuada de la función Gaussiana tenemos que multiplicarla por el número de datos (24 en nuestro caso) y por Δx , es decir, por el rango del intervalo, que no es sino la separación entre dos valores consecutivos del vector Inter, que en nuestro caso vale 1

```

N := length(Y)
Δx := Inter1 - Inter0
x := -1, -0.9.. 9

```

Frej
 $\frac{1}{N \cdot \Delta x} \cdot \text{dnorm}(x, \mu, \sigma)$



El poder emisor de un cuerpo negro

Velocidad de la luz

$$c := 2.998 \cdot 10^8 \cdot \frac{\text{m}}{\text{sec}}$$

Constante de Planck

$$h := 6.626 \cdot 10^{-34} \cdot \text{joule} \cdot \text{sec}$$

Constante de Boltzmann

$$k := 1.38 \cdot 10^{-23} \cdot \frac{\text{joule}}{\text{K}}$$

Constante de Stefan-Boltzmann

$$\sigma := \frac{2 \cdot \pi^5 \cdot k^4}{15 \cdot c^2 \cdot h^3}$$

$$\sigma = 5.66 \times 10^{-8} \frac{\text{watt}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}^4}$$

El poder emisor total de un cuerpo viene dado por la relación:

$$FT(T) := \sigma \cdot T^4$$

Un cuerpo a 2000 K emitirá:

$$FT(2000 \cdot \text{K}) = 90.554 \frac{\text{watt}}{\text{cm}^2}$$

En función de la longitud de onda λ (en nm) y de la temperatura, el poder emisor de un cuerpo viene dado por la ecuación de Planck de emisión de un cuerpo negro:

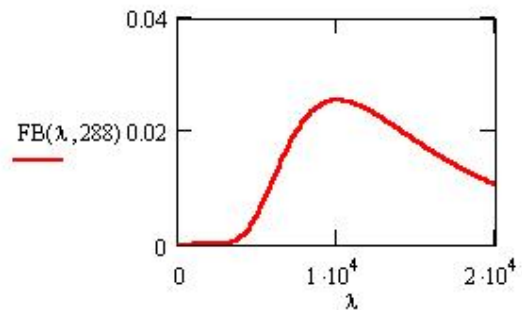
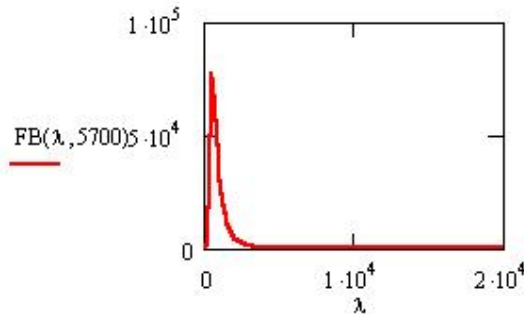
$$FB(\lambda, T) := \frac{2 \cdot \pi \cdot c^2 \cdot h \cdot 10^{36}}{\lambda^5 \cdot \left(e^{\frac{c \cdot h \cdot 10^9}{\lambda \cdot k \cdot T}} - 1 \right)}$$

Donde los factores 10^{36} y 10^9 transforman λ en nm a m.

Esta ecuación tiene unidades de vatios $\text{m}^{-2} \text{nm}^{-1}$.

A continuación se representa la anterior función para dos temperaturas, 5700 K (Sol) y 288 K (Tierra), en el rango de 100 a 20000 nm

$\lambda := 100, 200 \dots 20000$

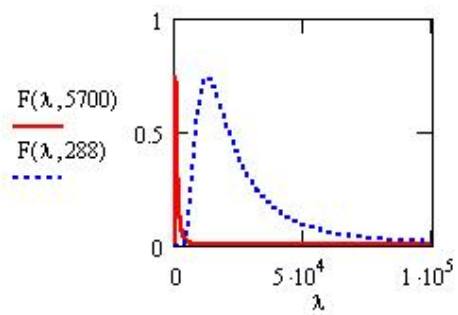


Como puede apreciarse estas curvas difícilmente pueden representarse en un mismo gráfico.

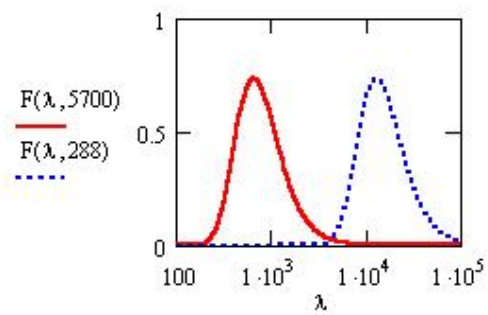
Para compararlas vamos a normalizarlas dividiendo por el poder emisor total a cada temperatura

$$F(\lambda, T) := \frac{FB(\lambda, T) \cdot \lambda}{FT(T)}$$

$\lambda := 100, 150 \dots 100000$



Escala
logarítmica
en el eje X ----->



Capa de Chapman

Por "capa de Chapman" se conoce la región de la atmósfera en la que una especie determinada, en nuestro caso

O₂, extingue (absorbe) la radiación solar. Para definir este fenómeno, necesitamos conocer:

- El flujo solar sobre la Tierra: $F(\lambda)$
- La capacidad de absorción del O₂ (su sección eficaz) $\sigma(\lambda)$
- La densidad molecular a ras de suelo, n_t
- La relación de mezcla de O₂, x
- La escala neperiana de altura, H_e
- El zenit solar, θ

Flujo Solar

Velocidad de la luz

$$c := 2.998 \cdot 10^8$$

Constante de Planck

$$h := 6.626 \cdot 10^{-34}$$

Constante de Boltzmann

$$k := 1.38 \cdot 10^{-23}$$

Constante Solar

$$S_0 := 1373$$

watios m⁻²

El poder emisor total de un cuerpo

$$FT(T) := \frac{2 \cdot \pi^5 \cdot k^4}{15 \cdot c^2 \cdot h^3} \cdot T^4$$

$$FB(\lambda, T) := \frac{2 \cdot \pi \cdot c^2 \cdot h \cdot 10^{36}}{\lambda^5 \cdot \left(e^{\frac{c \cdot h \cdot 10^9}{\lambda \cdot k \cdot T}} - 1 \right)}$$

Ecuación de Planck

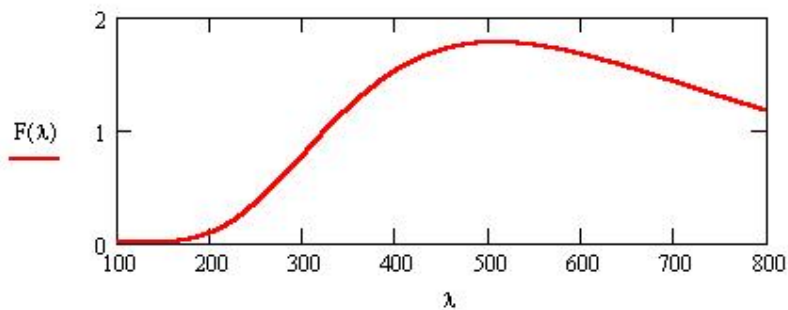
La energía que llega a la tierra procedente del sol en watios m⁻² nm⁻¹ será:

La integración de esta ecuación a todas las longitudes de onda da como resultado la constante solar

$$F(\lambda) := \frac{FB(\lambda, 5700)}{FT(5700)} \cdot S_0$$

Vamos a representar la región del visible-UV

$$\lambda := 100, 101 \dots 800$$



Sección eficaz del O₂

La banda de absorción del O₂ (banda de Shumann-Runge) puede ser representada de forma aproximada mediante una curva Gaussiana

Absorción máxima en cm²

$$S_m := 10^{-17}$$

Longitud de onda máxima en nm

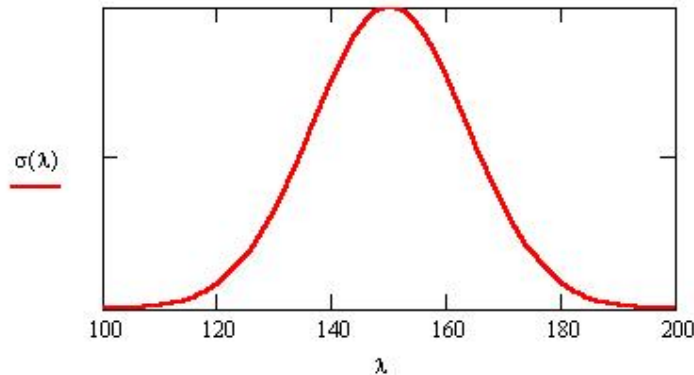
$$\lambda_m := 150$$

Anchura de la banda

$$w := 32$$

$$\sigma(\lambda) := S_m \cdot e^{-2.773 \cdot \left(\frac{\lambda - \lambda_m}{w} \right)^2}$$

Banda de absorción



$$\frac{\text{moléculas}}{\text{cm}^3}$$

Densidad molecular a ras de suelo

$$n_t := 2.689 \cdot 10^{19}$$

Relación de mezcla del oxígeno

$$x := 0.29$$

Escala neperiana de altura

La escala neperiana de altura se define como $H_e = RT/gP_m$, donde como promedio puede considerarse que $T = 250$ K y $P_m = 29$ g/mol.

Aproximadamente se obtiene que:

$$H_e := 7.295$$

km

Zenit solar

$$\theta := 0$$

Capa de Chapman

Altura de máxima absorción

$$h_m(\lambda) := H_e \cdot \ln \left(\frac{H_e \cdot \sigma(\lambda) \cdot x \cdot n_t}{\cos(\theta)} \cdot 10^5 \right)$$

El factor 10^5 es el paso de km a cm

Flujo de radiación en función de la altura y la longitud de onda

$$F_r(h, \lambda) := F(\lambda) \cdot \exp \left(-e \frac{h_m(\lambda) - h}{H_e} \right)$$

Velocidad de absorción de radiación

$$P = dF/dh$$

$$P(h, \lambda) := \exp \left[1 - \frac{(h - h_m(\lambda))}{H_e} - e \frac{(h_m(\lambda) - h)}{H_e} \right]$$

La máxima capacidad de absorción de radiación solar por parte del O_2 es aproximadamente a $\lambda = 220$ nm.

Para $\lambda < 220$ nm, hay poca radiación, para $\lambda > 220$ nm, el O_2 absorbe poco.

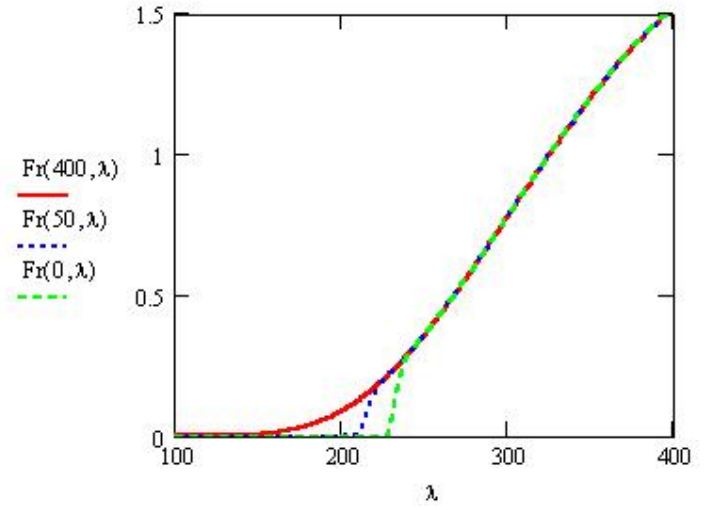
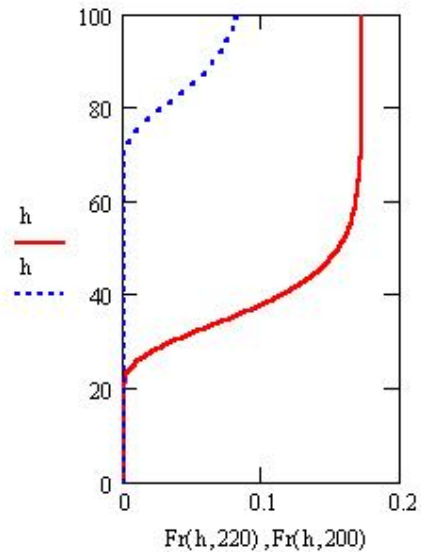
Rango de altura

$h := 0, 1 \dots 100$

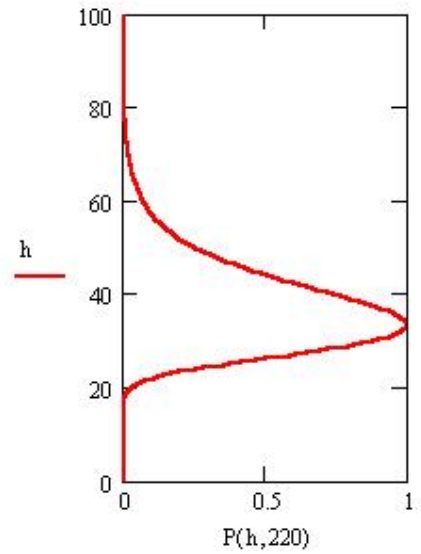
en km

Variación de F con h a $\lambda = \text{constante}$

Variación de F con λ a $h = \text{constante}$



Variación de P con h a $\lambda = \text{constante}$



<----- Punto de máxima velocidad de absorción, 35 km

Efecto Invernadero-CO₂

Para poder cuantificar el "Efecto Invernadero" de una especie necesitamos conocer:

- El flujo de radiación Terrestre: $F(\nu)$
- La capacidad de absorción del gas considerado, CO₂ (su sección eficaz) $\sigma(\nu)$
- La densidad molecular a ras de suelo, n_t
- La relación de mezcla, x , y , si fuera necesario, su dependencia con la altura $x = x(h)$
- La escala neperiana de altura, H_e
- La absorción de otras especies que absorban en la misma región del espectro.

Flujo de radiación

Terrestre

Velocidad de la luz

$$c := 2.998 \cdot 10^8$$

Constante de Planck

$$h := 6.62608 \cdot 10^{-34}$$

Constante de Boltzmann

$$k := 1.38066 \cdot 10^{-23}$$

Temperatura media
de la tierra

$$T := 288$$

Flujo de radiación de un cuerpo negro
en función de ν (número de ondas cm⁻¹)

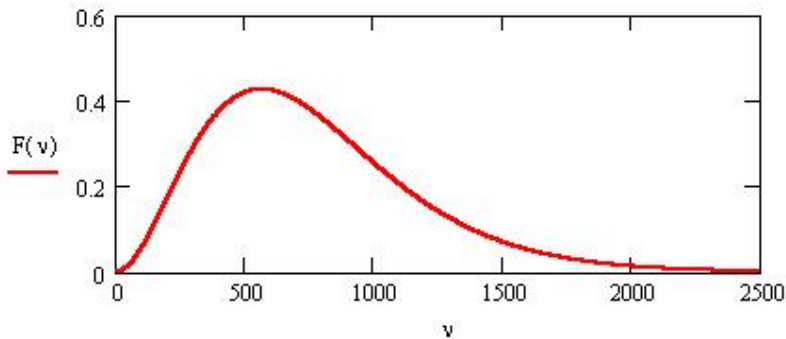
$$F(\nu) := \frac{2 \cdot \pi \cdot c^2 \cdot h \cdot \nu^3 \cdot 10^8}{\left(\frac{c \cdot h \cdot \nu \cdot 10^2}{k \cdot T} - 1 \right)}$$

en watios cm m⁻²

rango de número de ondas

$$\nu := 0,2..2500$$

en cm⁻¹



Espectro terrestre

Si queremos calcular el poder emisor total de la tierra

$$\int_{10}^{3000} F(\nu) d\nu = 390.017$$

en watios/m²

Sección eficaz del CO₂

La banda de absorción del CO₂ puede ser representada en una primera aproximación mediante dos curvas Gausianas. En realidad la curva es mucho más compleja

Absorción máxima en cm²

$$S_m := 1.6 \cdot 10^{-22}$$

Número de onda máxima en cm^{-1}

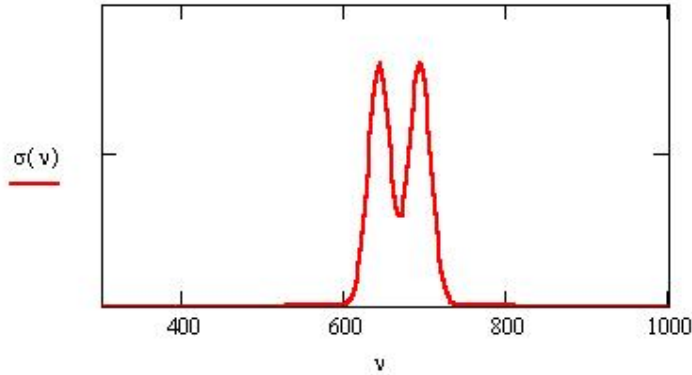
$$v_m := 667$$

Anchura de la banda

$$w := 32$$

Banda de absorción

$$\sigma(v) := S_m \cdot e^{-2.773 \cdot \left(\frac{v-v_m+25}{w}\right)^2} + S_m \cdot e^{-2.773 \cdot \left(\frac{v-v_m-25}{w}\right)^2}$$



$$\frac{\text{moléculas}}{\text{cm}^3}$$

Densidad molecular a ras de suelo

$$n_t := 2.689 \cdot 10^{19}$$

La relación de mezcla del

CO_2 es constante con h.

En caso contrario sería necesario

añadir la dependencia real con h

Relación de mezcla del CO_2

$$x := 0.00036$$

360 ppm

Dado que queremos analizar el supuesto de que x aumente, vamos a utilizar la relación de mezcla como variable

Escala neperiana de altura

La escala neperiana de altura se define como $H_e = RT/gP_m$, donde como promedio puede considerarse que $T = 250 \text{ K}$ y $P_m = 29 \text{ g/mol}$.

Aproximadamente se obtiene que:

$$H_e := 7.295$$

km

Efecto Invernadero

El factor 10^5 es el paso de km a cm

y x es la relación de mezcla que se deja como variable

Máxima absorción

$$hm(v, x) := H_e \cdot \ln(H_e \cdot \sigma(v) \cdot x \cdot n_t \cdot 10^5)$$

Flujo de radiación en función de la altura,

número de onda, y relación de mezcla

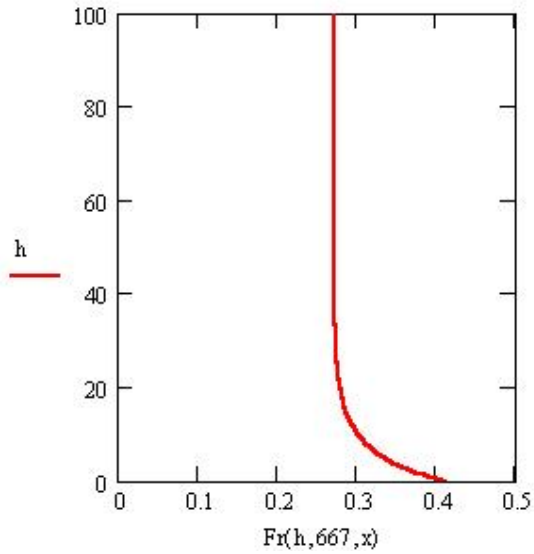
$$Fr(h, v, x) := F(v) \cdot \exp\left[-\frac{hm(v, x)}{H_e} \cdot \left(\frac{-h}{H_e} - 1\right)\right]$$

Rango de altura

$$h := 0, 1 \dots 100$$

en km

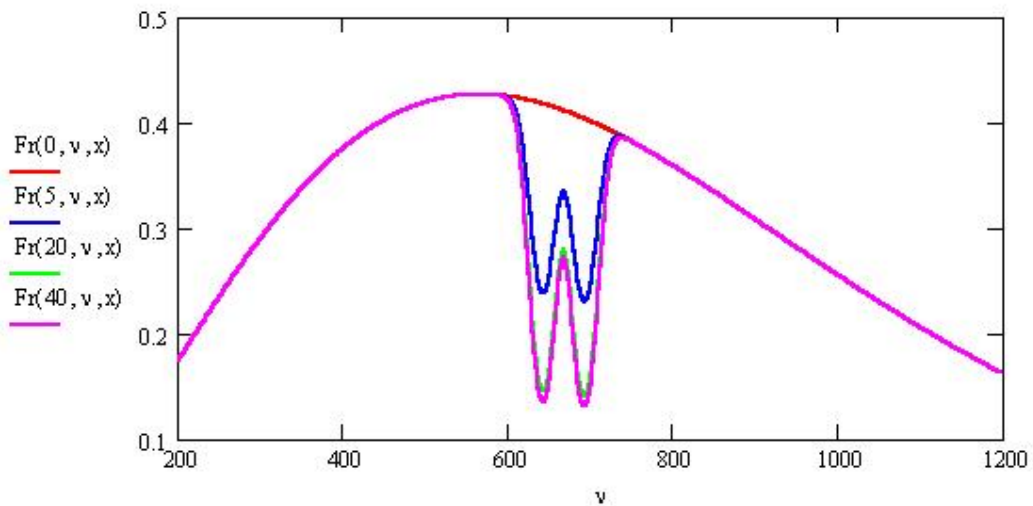
Variación de Fr con h a $v = \text{constante}$ y $x = \text{constante}$ (360ppm)



Por encima de 20 km, la densidad molecular es tan baja que la absorción se hace despreciable

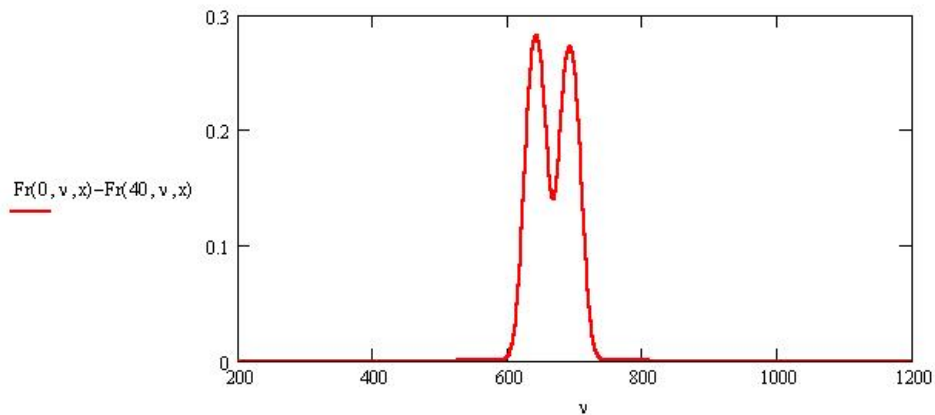
$v := 200, 201 \dots 2000$

Variación de Fr con v a diferentes valores de h y para $x = 360$ ppm



Si suponemos que por encima de 40 km ya no existe absorción de CO_2 , el efecto invernadero total de este gas será

el area (integral) de la siguiente curva :



$$W := \int_{500}^{900} (Fr(0, v, x) - Fr(40, v, x)) dv$$

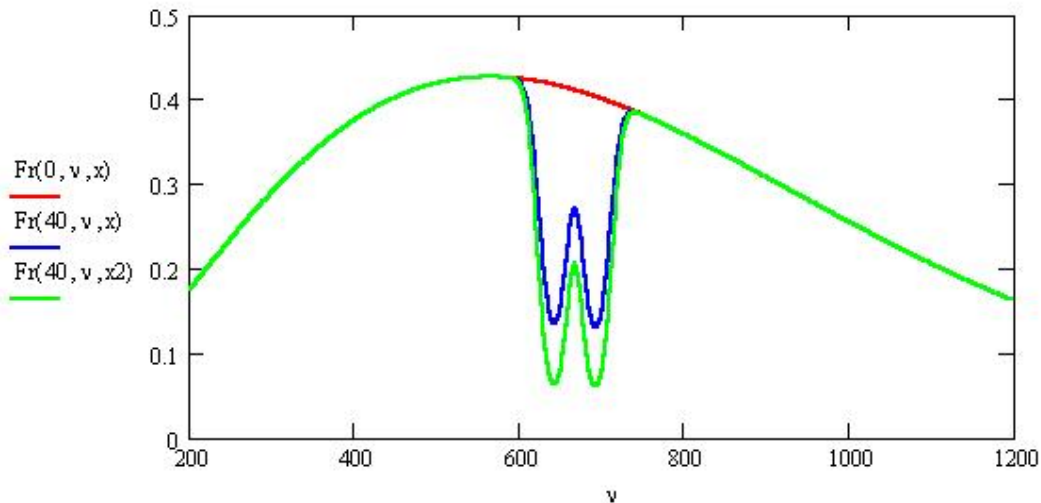
$$W = 21.676$$

watios m^{-2}

Vamos a suponer que la relación de mezcla del CO_2 aumenta hasta 600 ppm, como esta previsto que ocurra

para el año 2100

$$x2 := 600 \cdot 10^{-6}$$



A consecuencia de este fenómeno, el efecto invernadero del CO_2 deberá aumentar en:

$$\Delta W := \int_{500}^{900} (Fr(40, v, x) - Fr(40, v, x2)) dv$$

$$\Delta W = 7.636$$

watios m^{-2}

En realidad, el aumento del efecto invernadero del CO_2 debe ser más pequeño, debido a la absorción del agua y otras especies en la misma región del espectro (el efecto invernadero no es aditivo).

Acción combinada de CO_2 y H_2O

Relación de mezcla del H_2O

supondremos que existe un 1% de agua en la atmósfera

En realidad, la relación de mezcla del agua no se mantiene constante en la troposfera, ya que esta condensa a medida que aumenta la altura y disminuye la temperatura. Para simplificar despreciaremos este efecto.

$$x_a := 0.01$$

Sección eficaz del H_2O

El agua absorbe radiación en todas las regiones del espectro, mostrando una ventana de baja absorción entre 1200 y 600 cm^{-1} . Se considerara solo la absorción para $v < 1200 \text{ cm}^{-1}$

Absorción máxima en cm^2

$$S_m := 5 \cdot 10^{-22}$$

Número de onda máxima en cm^{-1}

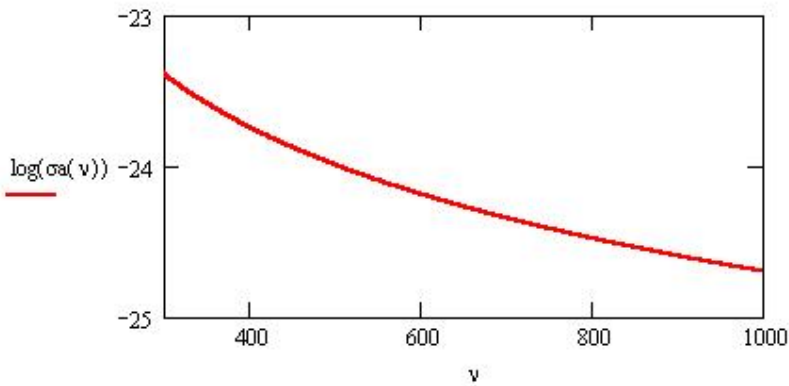
$$v_m := 100$$

Anchura de la banda

$$w := 18$$

$$\sigma_a(v) := \frac{S_m}{\left[1 + \left(\frac{v - v_m}{w} \right)^2 \right]}$$

La banda de absorción se considerara de forma Lorenciana



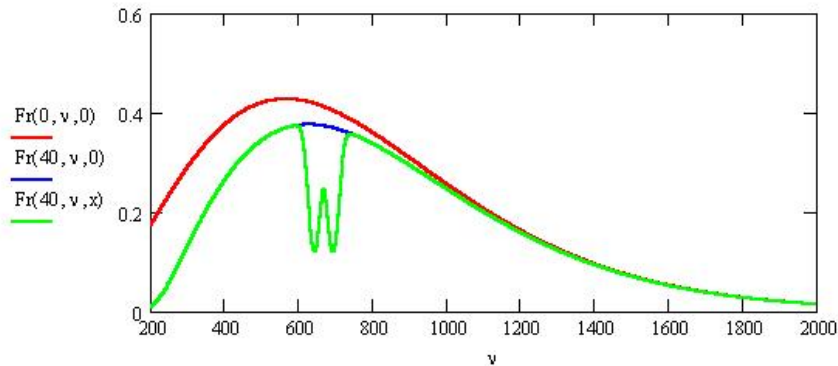
Efecto Invernadero combinado

Debemos corregir la máxima absorción, incluyendo las dos especies que absorben

$$hm(v, x) := He \cdot \ln \left[He \cdot (\sigma(v) \cdot x + \sigma_a(v) \cdot x_a) \cdot nt \cdot 10^5 \right]$$

Flujo de radiación en función de la altura, número de onda, y relación de mezcla

$$Fr(h, v, x) := F(v) \cdot \exp \left[e \frac{hm(v, x)}{He} \left(\frac{-h}{He} - 1 \right) \right]$$



La línea roja representa el espectro a ras de suelo. La línea azul el espectro en ausencia de CO₂, y por último la línea

verde, el espectro en presencia de los dos gases. El efecto invernadero del CO₂ será por lo tanto:

$$\mathbb{W} := \int_{500}^{900} (Fr(40, v, 0) - Fr(40, v, x)) dv$$

$$\mathbb{W} = 19.628$$

watios m⁻²

Si suponemos que la relación de mezcla del CO₂ aumenta hasta 600 ppm

Valor que aun sigue siendo algo

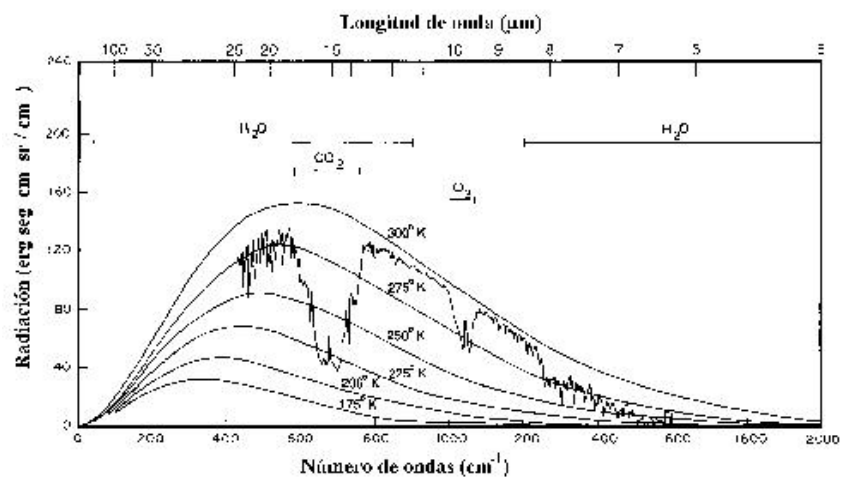
elevado.

$$\Delta \mathbb{W} := \int_{500}^{900} (Fr(40, v, x) - Fr(40, v, x_2)) dv$$

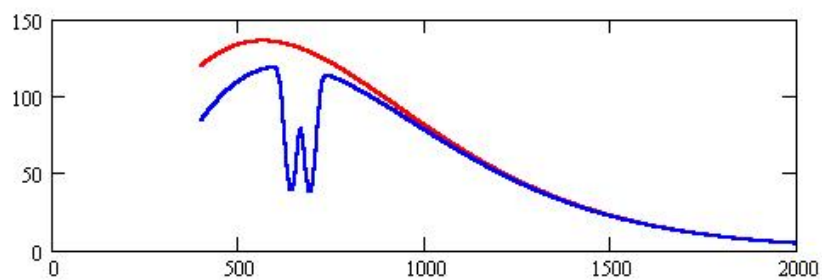
$$\Delta \mathbb{W} = 6.914$$

watios m⁻²

A continuación se comparan, el espectro real de la tierra medido desde un satélite, fuera de la atmósfera, con el espectro simulado



$\nu := 400, 401 \dots 2000$



Iteración simultánea -- Difusión de una epidemia

t := 0.. 20

Valores semilla

... infectados

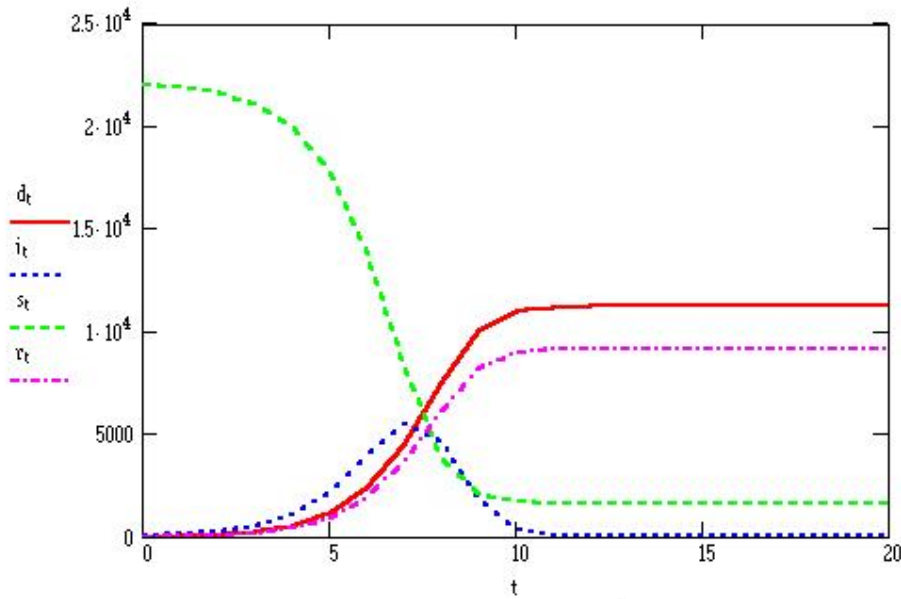
... amenazados

$$\begin{pmatrix} i_0 \\ s_0 \\ d_0 \\ r_0 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} 50 \\ 22000 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} i_{t+1} \\ s_{t+1} \\ d_{t+1} \\ r_{t+1} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} 0.0001 \cdot s_t \cdot i_t \\ s_t - 0.0001 \cdot s_t \cdot i_t \\ d_t + 0.55 \cdot i_t \\ r_t + 0.45 \cdot i_t \end{pmatrix}$$

... fallecidos

... sanados



t =

0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15

d_t =

0
27.5
88
220.435
507.145
1112.904
2326.029
4487.923
7490.824
10022.365
10991.317
11191.482
11225.547
11231.133
11232.044
11232.192

$i_t =$

50
110
240.79
521.291
1101.38
2205.683
3930.716
5459.819
4602.803
1761.731
363.936
61.936
10.157
1.655
0.27
0.044

$s_t =$

22000
21890
21649.21
21127.919
20026.539
17820.856
13890.14
8430.32
3827.518
2065.787
1701.851
1639.914
1629.757
1628.102
1627.832
1627.789

$r_t =$

0
22.5
72
180.356
414.937
910.558
1903.115
3671.937
6128.856
8200.117
8992.896
9156.667
9184.539
9189.109
9189.854
9189.975

Sistema predador-presa: Método de Runge-Kutta de 4º orden para la resolución de Ecuaciones diferenciales

En una isla abandonada del hombre, los Conejos (C) se alimentan de la vegetación (A), que se supone siempre constante

$C + A \rightarrow 2C$

k_1 es su constante de velocidad

Los Zorros (Z), a su vez se alimentan de Conejos (C):

$Z + C \rightarrow 2Z$

k_2 es su constante de velocidad

Por último, los Zorros (Z) pueden morir (M) de forma natural

$Z \rightarrow M$

k_3 es su constante de velocidad

El sistema de ecuaciones diferenciales correspondiente a este esquema puede ser expresado en forma matricial mediante:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} C \\ Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k_1 & -k_2 & 0 \\ 0 & k_2 & -k_3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C \\ C \cdot Z \\ Z \end{pmatrix}$$

Definición de Parámetros:

$k_1 := 100$

$k_2 := 250$

$k_3 := 200$

$$K := \begin{pmatrix} k_1 & -k_2 & 0 \\ 0 & k_2 & -k_3 \end{pmatrix}$$

$TK := K^T$

$$TK = \begin{pmatrix} 100 & 0 \\ -250 & 250 \\ 0 & -200 \end{pmatrix}$$

Definición del tiempo final y número de iteraciones

$t_{\text{final}} := 0.2$

$n := 200$

$i := 0..n$

$$\delta t := \frac{t_{\text{final}}}{n}$$

$$t_i := i \cdot \delta t$$

Definición de las condiciones iniciales y del vector concentración

$C_0 := 1$

$Z_0 := 0.5$

$$V(C, Z) := \begin{pmatrix} C \\ C \cdot Z \\ Z \end{pmatrix}$$

Método de Runge-Kutta de 4º orden

$$C1(C, Z) := \delta t \cdot TK^{(0)} \cdot V(C, Z)$$

$$Z1(C, Z) := \delta t \cdot TK^{(1)} \cdot V(C, Z)$$

$$C2(C, Z) := \delta t \cdot TK^{(0)} \cdot V\left(C + \frac{C1(C, Z)}{2}, Z + \frac{Z1(C, Z)}{2}\right)$$

$$Z2(C, Z) := \delta t \cdot TK^{(1)} \cdot V\left(C + \frac{C1(C, Z)}{2}, Z + \frac{Z1(C, Z)}{2}\right)$$

$$C3(C,Z) := \delta t \cdot TK^{(0)} \cdot v \left(C + \frac{C2(C,Z)}{2}, Z + \frac{Z2(C,Z)}{2} \right)$$

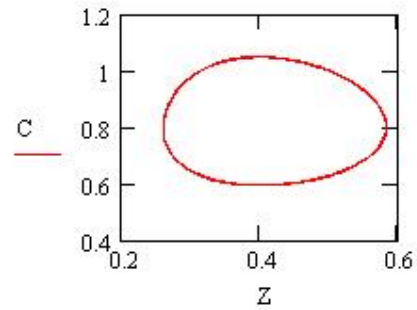
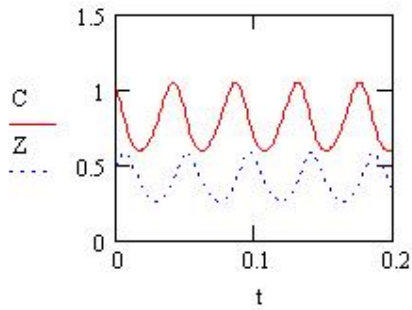
$$Z3(C,Z) := \delta t \cdot TK^{(1)} \cdot v \left(C + \frac{C2(C,Z)}{2}, Z + \frac{Z2(C,Z)}{2} \right)$$

$$C4(C,Z) := \delta t \cdot TK^{(0)} \cdot v(C + C3(C,Z), Z + Z3(C,Z))$$

$$Z4(C,Z) := \delta t \cdot TK^{(1)} \cdot v(C + C3(C,Z), Z + Z3(C,Z))$$

Cálculo iterativo de las concentraciones de Conejos(C) y de Zorros (Z)

$$\begin{pmatrix} C_{i+1} \\ Z_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_i + \frac{C1(C_i, Z_i)}{6} + \frac{C2(C_i, Z_i)}{3} + \frac{C3(C_i, Z_i)}{3} + \frac{C4(C_i, Z_i)}{6} \\ Z_i + \frac{Z1(C_i, Z_i)}{6} + \frac{Z2(C_i, Z_i)}{3} + \frac{Z3(C_i, Z_i)}{3} + \frac{Z4(C_i, Z_i)}{6} \end{pmatrix}$$



Breve introducción a los atractores caóticos

Antonio M. Díaz Soriano

Era un día como otro cualquiera de 1963, Edward N. Lorenz se encontraba en su despacho del MIT estudiando un modelo atmosférico mediante el cual pretendía comprender por qué los patrones climatológicos, que siguen pautas razonablemente periódicas, nunca se repiten exactamente. El modelo en cuestión se trataba de un cálculo numérico de un sistema dinámico de tres ecuaciones no lineales que simulan el fenómeno de la convección en la atmósfera; por aquel entonces la velocidad de los ordenadores era muy baja, por lo que, tras introducir unas condiciones iniciales que ya había usado con anterioridad, Lorenz salió de su despacho en busca de una taza de café. Al regresar se sorprendió de que los resultados fueran totalmente diferentes de los obtenidos en la ocasión anterior; al principio pensó que se trataba de un fallo del ordenador, pero después se dio cuenta de que los valores iniciales que había introducido en el ordenador no eran exactamente iguales que los usados con anterioridad, mientras que los primeros constaban de seis dígitos, los de ahora estaban redondeados a tres dígitos.

Unos meses después de este suceso, aparecía un artículo firmado por Lorenz en el que se introducían los conceptos de *atractor caótico* y *efecto mariposa*. Un atractor es el conjunto de puntos hacia los cuales tiende un sistema dinámico tras un número elevado -infinito sería el ideal- de iteraciones, el *apellido* caótico le viene por su gran sensibilidad a variaciones en las condiciones iniciales y a que los valores obtenidos nunca se repiten exactamente. El efecto mariposa es una metáfora de la dependencia de las condiciones iniciales, de manera que una perturbación tan pequeña como el batir de unas alas de mariposa en Brazil puede producir un tornado en Texas.

Atractor de Lorenz.

Como primer ejemplo de atractor caótico usaremos el ya mencionado atractor de Lorenz. Para este tenemos que generar un sistema dinámico a partir de las ecuaciones diferenciales y dar unos valores para los parámetros y las condiciones iniciales.

El sistema de ecuaciones es:

$$\frac{d}{dt}x = a(y - x)$$

$$\frac{d}{dt}y = bx - y - xz$$

$$\frac{d}{dt}z = xy - cz$$

Las condiciones iniciales y los parámetros son:

Número de iteraciones--->

Incremento temporal--->

$n := 0, 1 \dots 50000$

$$\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \\ z_0 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

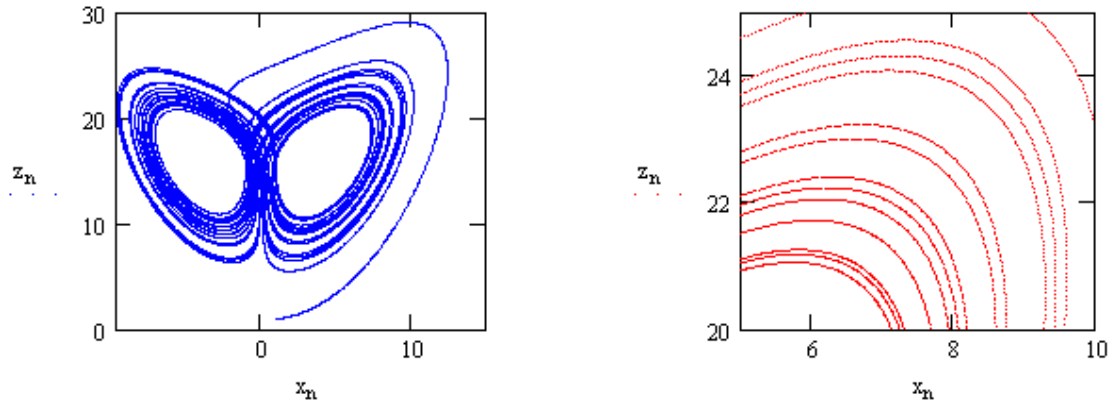
$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} 10 \\ 17 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$\Delta t := 0.001$

Ahora planteamos el sistema dinámico a partir de las ecuaciones diferenciales:

$$\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ y_{n+1} \\ z_{n+1} \end{pmatrix} := \begin{bmatrix} x_n + \Delta t \cdot a \cdot (y_n - x_n) \\ y_n + \Delta t \cdot (b \cdot x_n - y_n - x_n \cdot z_n) \\ z_n + \Delta t \cdot (x_n \cdot y_n - c \cdot z_n) \end{bmatrix}$$

Como vemos, obtenemos una curva paramétrica en tres dimensiones. Ahora representaremos el corte con el plano XZ y la ampliación de una zona de la gráfica.



En la gráfica de la izquierda se observa con claridad los dos atractores hacia los que tiende el sistema. Si cambiamos las condiciones iniciales, los valores numéricos serán totalmente diferentes, pero tras un número lo suficientemente grande de iteraciones el aspecto de las gráficas será el mismo. Es esta una importante propiedad de los atractores, otra es la que pone de manifiesto la gráfica de la derecha, en ella podemos ver como, por mucho que nos acerquemos a cualquier zona de la curva, las trayectorias no se cruzan, o lo que es lo mismo, el sistema no tiene ningún tipo de periodicidad, de ahí que los patrones meteorológicos no se repitan nunca con exactitud.

Atractor de Hénon.

A los cinco años de la publicación del trabajo de Lorenz, Michel Hénon descubría en el Instituto de Astrofísica de París un sistema dinámico de gran sencillez mediante el cual se podían explicar las pequeñas oscilaciones que hacen que ciertos cuerpos celestes se desvien levemente de su órbita elíptica. El sistema consta de dos ecuaciones, una de ellas cuadrática, y dos constantes:

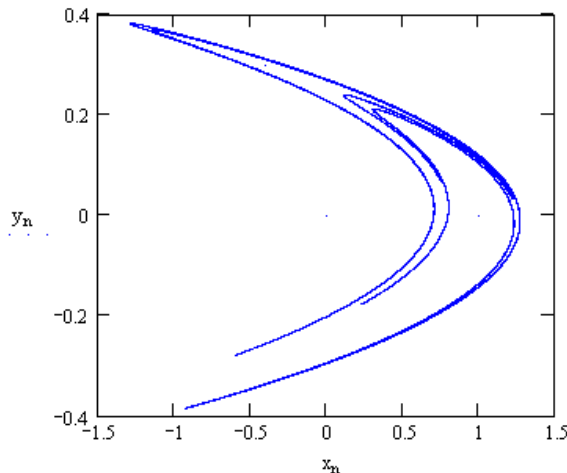
$$\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \text{amp} \\ B \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} 1.4 \\ 0.3 \end{pmatrix}$$

$$n := 0, 1 \dots 150000$$

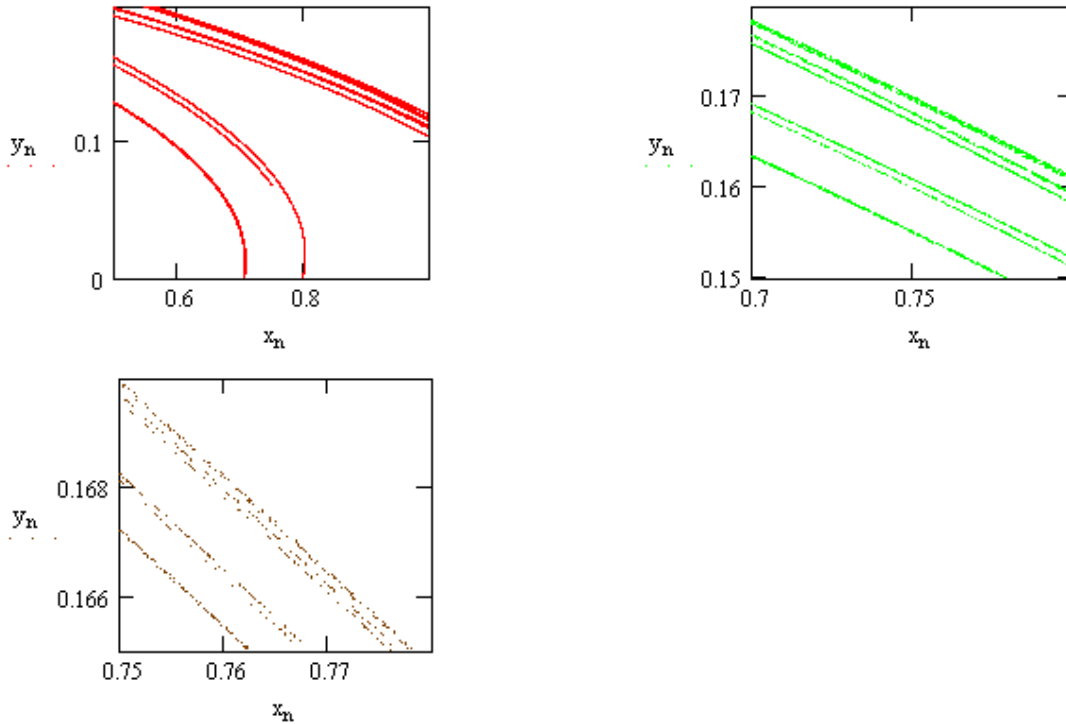
$$\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ y_{n+1} \end{pmatrix} := \begin{bmatrix} 1 + y_n - \text{amp} \cdot (x_n)^2 \\ B \cdot x_n \end{bmatrix}$$

Vamos a representar los resultados:



Si viésemos como se va generando la gráfica punto a punto, al principio no distinguiríamos mas que una nube caótica de puntos en apariencia inconexos, sin embargo, a medida que el número de iteraciones aumenta, la curva comienza a compactarse para configurar el atractor, del cual es imposible saber si dos puntos consecutivos estarán cerca o lejos.

Al igual que el atractor de Lorenz, los valores numéricos obtenidos dependen de las condiciones iniciales, no así la curva final, la cual adquiere siempre el mismo aspecto después de las suficientes iteraciones. Una propiedad particular del atractor de Hénon es que al acercarnos a cualquier parte de la gráfica, lo que en principio parecían líneas individuales, se subdividen en pares de líneas, y así sucesivamente.



Otros atractores.

Los atractores aparecen en numerosas ramas de la ciencia, sin embargo, al igual que ocurre con los fractales, hay un gran número de sistemas que se han desarrollado con carácter meramente estético. Uno de ellos es el creado por Clifford A. Pickover en el centro de investigación Thomas J. Watson de IBM.

El planteamiento del sistema es como sigue:

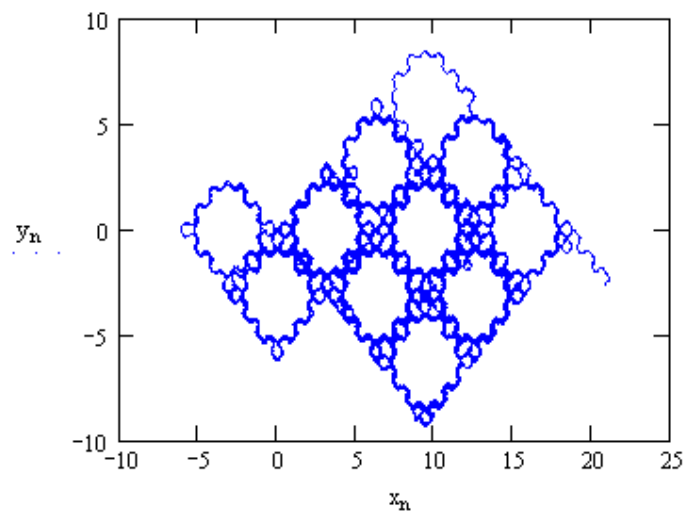
$n := 0, 1 \dots 50000$

$hr := 0.05$

$$\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} -3 \\ -2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ y_{n+1} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} x_n - hr \cdot \sin(y_n + \tan(3 \cdot y_n)) \\ y_n - hr \cdot \sin(x_n + \tan(3 \cdot x_n)) \end{pmatrix}$$

La representación del atractor de Pickover suele hacerse en color, actuando de esta manera se comprende que este sistema se conozca con el sobrenombre *palomitas fractales*. Nosotros, sin embargo, nos limitaremos a una representación monocroma:



Por último, vamos a representar un sistema de carácter caótico solamente en algunas regiones del plano. No entraremos a analizar este sistema con más detalle, tan sólo mencionar que las zonas estables se encuentran en los hexágonos.

$n := 0, 1 \dots 50000$

$$\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} -0.01 \\ -0.01 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ y_{n+1} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} 1 - y_n + |x_n| \\ x_n \end{pmatrix}$$

