

Wstęp do chemii kwantowej - laboratorium.

Zadania

2 października 2012

1 Wstęp

Używanie maximy jako kalkulatora

Zadanie 1

1. Oblicz $2+2*2$
2. Oblicz $\sqrt{18769}$
3. Oblicz 2^{10}
4. Oblicz $7/8$ i $7.0/8.0$
5. Oblicz wartość rzeczywistą wyrażenia $\frac{2+5}{6*19}$
6. Oblicz $\sin(0)$
7. Oblicz $\sin(\pi)$ - wpisywanie liczby π
8. Oblicz wartość rzeczywistą e^1 - wpisywanie liczby e
9. Oblicz wartość rzeczywistą $2 * e$ używając polecenia *float()*

Nadawanie wartości zmiennym

1. Przypisz do zmiennych a i b wartości odpowiednio 5.25 i 3.23
2. Przypisz zmiennej c wartość $a * b$
3. Przypisz naraz do zmiennych x, y, z wartości π , e 10.0

4. Nadaj zmiennej g wartość $\sin(x * y * m)$
5. Wypisz g
6. Nadaj zmiennej m wartość 9.29
7. Wypisz g

Definicje funkcji

1. Zdefiniuj funkcję $f(x) = x^2 \sin(x)$ Oblicz wartość tej funkcji dla $x = \frac{\pi}{2}$
2. Zdefiniuj funkcję $g(x) = \sin(x) * \cos(x)$ Oblicz wartość tej funkcji dla $x = \frac{\pi}{6}$
3. Zdefiniuj funkcję $h(y) = e^y \cos(y + \pi)$ Oblicz wartość tej funkcji dla $y = 0.5$

Kill

- Wyczyść wartości zmiennych x oraz y z pamięci poleceniem *kill*.
- Wyczyść wartości wszystkich zmiennych z pamięci poleceniem *kill(all)*.

Rozwiązywanie równań

1. Wyznacz x spełniające równanie $-9x - 5x^2 = -x^3 - 45$.
2. Wyznacz u z równania $2u^2 + xu = y$

Różniczkowanie

1. Oblicz pierwszą pochodną wyrażenia $x^2 e^x$
2. Zdefiniuj funkcję $\sin(x) * e^x + 1/x$. Oblicz jej pierwszą i drugą pochodną.
3. Zdefiniuj funkcję $\sin(u) \cos(v) + \frac{e^u}{e^v}$. Oblicz jej pochodną po u . Oblicz jej pochodną po v .

Całkowanie

1. Oblicz całkę nieoznaczoną wyrażenia $1/x$
2. Oblicz całkę nieoznaczoną wyrażenia $r^2 + \log(r) + e^r * \sin(r)$
3. Oblicz całkę oznaczoną w granicach $[-5:7]$ wyrażenia $-t^2 * \sin(t)$

Wykresy

1. Narysuj wykres funkcji $f(x) = \sin(x)$ w zakresie $(-\pi; \pi)$
2. Narysuj na jednym wykresie funkcję $f(x) = \sin(x)$ i $g(x) = \cos(x)$ w zakresie $(-2\pi; \frac{\pi}{2})$
3. Narysuj na jednym wykresie funkcję $f(x) = x^2$ i $g(x) = \sin(x)$ i nadaj im odpowiednie etykiety.

2 Zadania do samodzielnego wykonania

Zadanie 0 Oblicz:

1. Oblicz $\sin(\frac{\pi}{2}) \cos(\frac{\pi}{4}) + \log(e)$
2. Zdefiniuj funkcje $e^{(x^2)}$ i $(e^x)^2$. Oblicz funkcje dla $x = 1.56$
3. Oblicz $\frac{\sqrt{153} + \frac{1}{3}}{13 + 2\pi}$

Zadanie 0.5

1. Zdefiniuj funkcję $da(x) = \sin(\frac{x}{2})$ i $db(x) = \frac{\sin(x)}{2}$ Oblicz wartość tej funkcji dla $x = \frac{\pi}{2.3}$ i
2. Zdefiniuj funkcję $b(x) = x^4 + \frac{2 + \sin(x)}{\cos(x)}$ Oblicz wartość tej funkcji dla $x = \frac{\pi}{4}$
3. Zdefiniuj funkcję $a(x, y) = \sin(x) * \cos(y)$ Oblicz wartość tej funkcji dla $x = \frac{\pi}{2}$ i $y = \pi$

Zadanie 1 Przypisz zmiennej $eq1$ równanie

$$x^2 - 5 = x - 2.$$

Rozwiąż je ze względu na zmienną x .

Przypisz zmiennej $eq2$ równanie

$$y * m + y^2 = \frac{2 + y}{3}.$$

Rozwiąż je ze względu na zmienną y .

Nadaj zmiennej m wartość pierwszego rozwiązania równania $eq1$.

Podaj rozwiązanie równania $eq2$

Zadanie 2 Zdefiniuj funkcję:

$$g(z) := z^3 - 2z^2 - 5z.$$

Znajdź jej miejsca zerowe.

Oblicz jej wartości w punktach:

- $z = 1.2$
- $z = \frac{\pi}{2}$

Narysuj wykres tej funkcji w granicach $x \in (-10; 3.4)$

Zadanie 3 Rozwiąż równanie ze względu na t :

$$t^2 + t = 3$$

Oblicz całkę

$$\int_a^b (e^x * x^2 + \sin(x))$$

gdzie a i b są rozwiązaniami powyższego równania.

Zadanie 4 Zdefiniuj funkcję

$$f(x) := x^3 \sin(x)$$

i oblicz jej pierwszą i drugą pochodną po x . Przedstaw funkcję i jej pochodne na wykresie w granicach $x \in (-\pi; \pi)$ z odpowiednimi etykietami.

Zadanie 5 Zdefiniuj funkcję

$$g(x, u) := x * u^2 + e^{a*u}.$$

Oblicz jej pierwszą i drugą pochodną po x .

Oblicz jej pierwszą i drugą pochodną po u .

Zadanie 6 Zdefiniuj funkcje:

$$f(x) = (x^2 + 4)^5$$

oraz

$$g(x) = x \log(1 + x^2)$$

Następnie oblicz poniższe całki nieoznaczone.

$$\int f(x) dx$$

$$\int g(x) dx$$

Zadanie 7 Zdefiniuj funkcje:

$$m(r) = r^4 e^{-ar^2}$$

i

$$s(r) = r^3 e^{-ar}$$

Scałkuj je w granicach $(0 : \infty)$. ∞ zapisujemy jako *inf*.

Zadanie 8 Zdefiniuj funkcje:

1. $x^4 - 10x^2 + 100 \sin(x)$

2. $\frac{\sin(x)}{x}$

a następnie przedstaw na wykresie ich przebieg, jak również przebieg ich pierwszej oraz drugiej pochodnej. Przedstaw przebieg funkcji i jej pochodnych na jednym wykresie.