APLICACIONES INFORMÁTICAS EN QUÍMICA

Problemas Tema 2.2:

Matrices y vectores en la HC

Grado en Química

1º SEMESTRE

Universitat de València

Facultad de Químicas

Departamento de Química Física

F. Química - Edifici E - 3º planta.
C./ Dr. Moliner 50. 46100 Burjassot, Valencia • Tel. (+34) 963543389 • Fax (+34) 963544564
Aula Virtual: http://aulavirtual.uv.es/

1. Operaciones básicas con matrices.

a) Sumar y multiplicar las matrices **M** y **N** siguientes

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 2 & 7 \\ 3 & 5 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{N} = \begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 7 & 2 \end{pmatrix}$$

b) Restar y dividir las matrices **M** y **N** anteriores

c) Verifique como afecta el orden de la operación al resultado de los apartados a) y b)
¿Qué operaciones con matrices son conmutativas y cuáles no?

2. Construya las matrices 3x3 siguientes, que llamaremos A y B:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 7 \\ 1 & 3 & -5 \\ 2 & 6 & -2 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 3 & -5 & 9 \\ -1 & 2 & 4 \\ -3 & -7 & 4 \end{pmatrix}$$

a) Calcule el determinante de **A** y el de **B**

b) Calcule la matriz inversa de **A**

c) Calcule el producto **AB** , el producto **BA** y el cociente **A/B**

d) Calcule el determinante del cociente

Res.: a) |A|= 16; |B|= 265; d): |A/B| =0,06038

3. Construya una matriz 3x3. Calcule su determinante. Si es distinto de 0, calcule la matriz inversa (Si el determinante vale 0, cambie la matriz y recalcule la matriz inversa). A continuación, multiplique ambas matrices para obtener una matriz unidad 3x3.

4. Construya una matriz más grande que en el ejercicio anterior (6x6, por ejemplo) y compruebe que el determinante de una matriz cambia de signo si se permutan de lugar entre si dos filas cualesquiera. Compruebe lo mismo para la permutación de dos columnas.

5. Construya dos matrices cuadradas arbitrarias, (al menos, 4x4) y compruebe que si dos matrices cuadradas se multiplican, sus determinantes también lo hacen. ¿Se cumple lo mismo con la suma de matrices? Compruébelo.

6. Tome dos matrices cuadradas (al menos, 4x4) que sólo se diferencien en una columna. Construya una tercera matriz igual a las anteriores pero en la que la columna diferente sea suma (o resta) de las dos columnas que eran diferentes en las dos primeras matrices. Compruebe ahora que la suma (o resta) de los determinantes de las dos primeras matrices sí es igual al determinante de la tercera.

7. Operaciones con matrices no cuadradas:

a) Construya una matriz 2x4 y otra 4x3. Multiplíquelas
b) Construya otros pares de matrices no cuadradas que puedan multiplicarse y multiplíquelas (por ejemplo, matrices 3x2 y 2x5 o 5x3 y 3x2)
c) Ídem para los casos:
c1.- 3x1 y 1x3
c2.- 1x3 y 3x1 (Producto escalar de un vector fila por un vector columna)
c3.- 3x3 y 3x1 (Producto de una matriz por un vector columna)
c4.- 1x3 y 3x3 (Producto de un vector fila por una matriz)

8. Utilice la hoja de cálculo para operar con vectores:

a) Sume los vectores 3**i** + 4**j** - 6**k** y 2,4**i** - 5**j** + 1,3**k**
b) Calcule el cociente de sus módulos
c) Obtenga el producto escalar de los dos vectores anteriores
d) Obtenga el ángulo que forman entre ellos a partir del producto escalar y sus módulos
e) Repita los ejercicios anteriores con otros vectores. Si se ha trabajado bien, la HC ha quedado preparada de manera que será fácil repetir los cálculos con otros vectores. Aquí hay algunas sugerencias de pares de vectores **r** y **s**:

	r	s	Res.
d.1	2**i** + 3,3**j** + 5**k**	3**i** + 6**j** + 5**k**	15,98º
d.2	1,1**i** + 2,2**j** + 3,3**k**	3,3**i** + 2,2**j** + 1,1**k**	
d.3	1,5**i** + 2,5**j** + 3,5**k**	-1,5**i** - 2,5**j** - 3,5**k**	
d.4	1,5**i** + 2,5**j** + 3,5**k**	2,0**i** + 2,0**j** + 2,0**k**	
d.5	1,5**i** + 2,5**j** + 3,5**k**	3,0**i** + 3,0**j** + 3,0**k**	
d.6	0,7**i** + 0,22**j** + 1,07**k**	-0,77**i** + 4,4**j** + -0,4**k**	

f) Si en el apartado anterior **r** representa una fuerza en N y **s** representa el desplazamiento (en m) de la fuerza **r**, dé el valor del trabajo W (en J) realizado por la fuerza en cada caso.

9. Sumar los vectores **r** = 3 **i** + 5,5 **j** + 8 **k** y **s** = 2,4 **i** + 3,5 **j** + 5 **k** y usar la llamada "regla del coseno":

$$|\mathbf{r}+\mathbf{s}|^2 = |\mathbf{r}|^2 + |\mathbf{s}|^2 + 2|\mathbf{r}||\mathbf{s}|\cos(\theta)$$

para obtener el ángulo θ que forman **r** y **s**. Compruebe los valores del ángulo (θ) obtenidos de esta manera con los ángulos obtenidos en el ejercicio 8.