APLICACIONES INFORMÁTICAS EN QUÍMICA

Problemas Tema 2.3:

Series, representación de funciones y construcción de tablas en 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. Genere series aritméticas de valores en columna según estos datos:

Valor inicial	**Valor final**	**Incremento**
-100	100	10
-10	10	0,5
0	360	5

a) Genere series geométricas de valores en columna:

Valor inicial	**Valor final**	**“Incremento” o razón**
1	200	1,1
100	0,2	0,975

NOTA: Las series aritméticas se caracterizan por “el incremento” o diferencia entre los elementos contiguos. Las series geométricas se caracterizan por “la razón” o cociente entre elementos contiguos. El valor “final” que la hoja de cálculo pide en los datos para generar series actúa como valor máximo o mínimo que no puede rebasarse

2. Construir una serie en columna de valores de x entre 0 y 2 con un intervalo de 0,05 entre ellos.

a) Calcular en columnas contiguas las funciones

1^x	$\left(\frac{1}{2}\right)^x$	$\left(\frac{1}{e}\right)^x$	$\left(\frac{1}{10}\right)^x$

b) Representar gráficamente todas estas funciones en la misma gráfica

c) Ajustar el eje de las ordenadas (y) entre 0 y 5

d) Calcular ahora columnas adicionales con las funciones

2^x	e^x	10^x

y añadirlas a la misma gráfica anterior

3. Realizar un ejercicio similar al anterior con los siguientes datos:

Intervalo de las abscisas (x): Entre 0 y 2 con incrementos de 0,05

Primer grupo de funciones:

x^{1}	$x^{3/4}$	$x^{1/2}$	$x^{1/3}$	$x^{1/5}$	$x^{1/100}$

Intervalo de las ordenadas (y): Entre 0 y 2

Segundo grupo de funciones

$x^{4/3}$	x^{2}	x^{3}	x^{5}	x^{25}

4. Generar una tabla de valores de la función lineal $y = m\,x + b$, donde m y b son parámetros, x es la variable independiente y es la variable dependiente.

- Construir una tabla de los valores de y que resultan cuando x varía de -10 hasta 10 de 0,1 en 0,1. Para ello es necesario tener un conjunto de parámetros {m, b}. Tomaremos unos valores arbitrarios pero situados en celdas prefijadas. Para empezar, tomar m = 1, b = 1. Los valores de y se programarán de manera que dependan de las direcciones absolutas de las celdas que contienen los valores de m y de b

- Al lado de la tabla (x,y), hacer la representación gráfica de la curva y en función de x

- Modificar las celdas que contienen m y/o b. Verificar el efecto sobre la gráfica. Hacer un estudio sistemático de lo que ocurre al modificar m o b

5. Construya una tabla de volúmenes (en litros) para un mol de gas ideal a diferentes P (0.8, 1.0, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8 y 2.0 atm) para un conjunto de valores de T (260, 265, 270 ..., hasta 400 K). Los volúmenes correspondientes a cada P fija deberán aparecer en columna (por tanto las P estarán en una fila y las T en columna).

a) Construya otra tabla aparte equivalente a la anterior pero en la que para cada T fija aparezcan los volúmenes en columna para las diferentes P (por tanto las P estarán en una columna y las T en una fila)
b) Tiene que prever que el número de moles del gas pueden modificarse, de manera que ambas tablas deben recalcularse automáticamente si se modifica el número n de moles de gas. El valor de n deberá estar indicado en una única celda aparte.

R = 0,0820578 atm L K^{-1} mol^{-1}. Con estos datos obtendrá dos tablas de volúmenes de gases ideales en L (litros)

NOTA: ¿Por qué no aparece en ninguna celda el famoso valor de 22,4 L que "se supone" que ocupa un mol?

c) Duplique ahora las dos tablas en otra parte del documento. En las tablas duplicadas los datos de volumen deben aparecer en cm^3. Las cuatro tablas (las dos iniciales y las dos duplicadas) deberán recalcularse de forma automática cada vez que se cambie el número n de moles

NOTA: Si tiene conocimientos avanzados, puede duplicar las tablas en una hoja diferente pero en el mismo documento o "libro" de la HC

6. Utilizar los datos (x,y) siguientes para representar, en la misma gráfica, las series de puntos (x,y) y (x, x^y):

x	**y**
3,0	21,85
3,3	18,59
3,5	18,57
3,8	18,53
4,0	16,31
4,3	13,81
4,5	13,75
4,8	14,77
5,0	10,85
5,3	9,60
5,5	9,26
5,8	7,86
6,0	7,03
6,3	5,25

6,5	4,16
6,8	5,76
7,0	3,00
7,3	2,29
7,5	1,56
7,8	1,10
8,0	0,83

Utilizar la opción "**eje secundario**" y otras opciones para que la gráfica permita la representación clara de las series.

7. Hacer lo mismo con las series (x, e^x) y (x, e^y), estando presente en la gráfica la serie (x,y) y no estándolo.

8. **Calculador de masas moleculares de hidrocarburos y otras moléculas orgánicas**. Los alcanos, (mono)alquenos y (mono)alquinos tienen las fórmulas generales C_nH_{2n+2}, C_nH_{2n} y C_nH_{2n-2} respectivamente.

   a) Haga una tabla que pueda "crecer" cómodamente donde, dado "n", se obtenga al lado, en columnas sucesivas, las masas moleculares relativas del alcano, el alqueno y el alquino correspondientes
   b) Amplíe la tabla de manera que en columnas contiguas a cada hidrocarburo, se obtenga el porcentaje en peso de cada elemento (C e H)

AYUDA: Ar (C)= 12,0107; Ar (H)= 1,0079

9. **Calculador de masas moleculares de moléculas orgánicas comunes**. Considere moléculas orgánicas de fórmula molecular general $C_aH_bO_cN_d$. Construya una tabla que pueda "crecer" cómodamente donde, dados "a, b, c, d", se obtenga al lado la masa molecular del compuesto $C_aH_bO_cN_d$ correspondiente (que vale para todos sus isómeros, naturalmente), así como el porcentaje en peso de cada elemento.

AYUDA: Ar (C)= 12,0107; Ar (H)= 1,0079; Ar (O)= 15,9994, Ar (N)= 14,0067

Res.: Algunos resultados control:

CH_4 (Mr=16,0423; %C: 74,87, %H: 25,13).
C_2H_4 (Mr=28,0530; %C: 85,63, %H: 14,37).
H_2CO (Mr = 30,0259; %C: 40,00, %H: 6,71, %O: 53,29)
CH_5N (Mr=31,0569; %C: 38,67, %H: 16,23, %N: 45,10)

10. La serie de las potencias de 2 con valor inicial 2^1 y valor final en 2^{32} o en 2^{64} es muy importante en informática teórica (con n bits, el numero entero más grande que puede representarse es 2^n-1). Dicha serie puede generarse como serie geométrica. Genere las series hasta 2^{32} y hasta 2^{64}.
Calcule la serie de potencias de 2 hasta $1{,}0 \cdot 10^{32}$ y hasta $1{,}0 \cdot 10^{64}$. Averigüe cuantos elementos tiene cada una de ellas.

Res.: Número de elementos de la serie: Hasta 10^{32} : 107; hasta 10^{64} : 213

11. Utilice la HC para generar series en función de un "contador" o índice "n".
Ejemplo: es fácil imaginar que si tomamos la mitad de un segmento, le añadimos la mitad de la otra mitad, añadimos la mitad de lo que queda, y así sucesivamente, llegaremos a tener todo el segmento.... ¿o no? Utilice la HC para generar la serie $\frac{1}{2^n}$ desde n=1 e ir sumándola para cada valor de n. En otras palabras, calcule las sumas parciales $\sum_{n=1}^{n} \frac{1}{2^n}$. ¿Cuándo podemos decir que hemos llegado a sumar la unidad?

a) Haga el mismo tipo de ejercicio para diversas series. Construya las series (hasta un máximo de 60 elementos comenzando por el índice n=1) y calcule su suma.

Nombre	Elemento	Serie	Límite
b.1	$\frac{1}{n^2}$	$\sum_{n=1}^{n_{\max}} \frac{1}{n^2}$	$\left(\pi^2/6\right)$
b.2	$\left(\frac{1}{3}\right)^n$	$\sum_{n=1}^{n_{\max}} \left(\frac{1}{3}\right)^n$	$\left(\frac{1}{1-1/3}\right)-1$
b.3	$\frac{1}{n(n+1)}$	$\sum_{n=1}^{n_{\max}} \frac{1}{n(n+1)}$	1
b.4	T_n = 1+2+3+4+...+ n	$\sum_{n=1}^{n_{\max}} \frac{1}{T_n}$	2

Objetivos:

Distinguir claramente entre:
- Los elementos de una serie (el nombre matemático riguroso es "sucesión")
- El límite al que tienden los elementos
- La serie formada por las **sumas parciales** de los elementos de la serie (sucesión)
- El límite de la serie de sumas parciales. Una serie es convergente cuando lo es la serie de sumas parciales

Usar la HC para comprender estos objetivos

12. Genere una serie de valores de la variable independiente x y programe las siguientes funciones:

e^x	e^{-x}	$shx = \dfrac{e^x - e^{-x}}{2}$	$chx = \dfrac{e^x + e^{-x}}{2}$

Las funciones shx y chx definidas arriba se llaman "**seno hiperbólico**" y "**coseno hiperbólico**" respectivamente. (Son funciones que aparecen como solución de ciertas ecuaciones diferenciales de interés en Química y en Física. Se llaman "**hiperbólicas**" porque pueden definirse de forma parecida a las funciones trigonométricas clásicas o circulares, pero se definen sobre una hipérbola en lugar de sobre una circunferencia).

a) Compruebe que los valores obtenidos arriba para shx y chx son los mismos que los que proporcionan las funciones SENOH( ) y COSH(...) de la hoja de cálculo Excel

b) Compruebe también que se cumple la relación trigonométrica $ch^2x - sh^2x = 1$ para todos los valores de x. (Recuerde que en el caso de las funciones trigonométricas circulares sen(x) y cos(x) es la suma de los cuadrados lo que es igual a 1)

c) De la misma manera que la tg trigonométrica es igual al cociente sen(x)/cos(x) , se define la tangente hiperbólica

$$thx = \frac{shx}{chx}$$

Compruebe que los valores de *thx* obtenidos con el cociente anterior son iguales a los de la función TANH(...) de la hoja de cálculo Excel.

13. Construya series similares de valores para otras funciones matemáticas. Por ejemplo:

a) $y = \ln\left(sen\left(x\right)\right)$

b) $y = e^{-x}\ln\left(x\right)$. Compruebe hacia qué valor tiende esta función a valores muy grandes de x

c) $y = x\left(1 + x^2\right)^{1/2}$

d) $y = tg^3\left(x\right)^{1/2}$

e) Pruebe otras ...