# APLICACIONES INFORMÁTICAS EN QUÍMICA

## Problemas Tema 2.5:

## Resolución numérica de ecuaciones

## Grado en Química

**1º SEMESTRE**

**Universitat de València**

**Facultad de Química**

**Departamento de Química Física**

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

**1.** Varios problemas clásicos resolubles con ecuaciones de primer grado:

a) Dos cantidades que suman 100 y una es k veces la otra: $x = k*(100-x)$

Ejemplos: Resolverlos para k= 3,25 ; k= 0,025 ; k = 2*π usando la HC.

b) Punto en que se cruzan dos rectas, y= m*x+b , y= m'*x+b'

Ejemplos: Resolverlo usando la HC para

y= 5,7x+0,58 , y= 8,567x+2,56

y= -5,7x+0,86 , y= -100x-25

c) Una variante general del caso a) es el llamado "reparto proporcional": Reparto de una cantidad A en varias partes siguiendo la proporción marcada por un conjunto de números (a, b, c…).

Un ejemplo: Repartir 100 g de KCl en tres partes proporcionales a tres números dados: (6; 4,5 ; 2). La ecuación a resolver es 6*x+4,5*x+2*x=100 y si se programa bien, se obtiene directamente cada parte en gramos (6*x; 4,5*x ; y 2*x)

d) El mismo problema en una versión más química: Repartir 100 g de KCl de manera que la cantidad de POTASIO en cada parte esté en la misma proporción que los números (5 ; 4,5; 3 ; 1,5)

$A_r$(Cl): 35,453 ; $A_r$(K): 39,0983 .

**Res.: a) (76,47 y 23,53); (2,44 y 97,56); (86,27 y 13,73)**

**b) Punto (x,y)= (-0,69 , -3,36) ; punto (x,y)= (-0,27 , 2,42)**

**c) 48 g , 36 g , 16 g.**

**d) 35,71 g ; 32,14 g ; 21,43 g ; 10,71 g**

**2.** Resolver las ecuaciones:

| **Ecuaciones** | **Res.** |
|---|---|
| $x^2 = 2x^3$ | **0,000 ; 0,500** |
| $4/(x + x^{1/2}) = 3x$ | **0,79242** |
| $2x^2 = 1/x^{1/2}$ | **0,75786** |
| $2x^4 = 1/(x^{1/2} + x)$ | **0,74646** |
| $2x^3 = 1/(x^3+x)$ | **-0,75180** |
| $(\mathrm{sen}(x))^3 - 1/\tan(x)=\cos(x)$ | **1,18080 radianes = 67,6551 º**<br>**5,52305 radianes = 316,448 º** |
| $x^x = 2x^3$ | **0,73624** |

**NOTA:** En varios ejemplos anteriores se da un resultado. Sin embargo, en algunos casos podría haber más de un resultado. **¡Es muy importante que se entienda porqué puede pasar esto y qué hay que hacer para encontrar otros posibles resultados!**

**3.** En la reacción química $2NO(g) + O_2 \rightarrow 2NO_2(g)$, los incrementos de entalpía estándar (ΔHº) y el de entropía estándar (ΔSº) , a 298,15 K son, respectivamente, –114,1 kJ y –146,5 J $K^{-1}$. La reacción será espontánea (en el sentido de favorable a los productos) cuando la variación de energía libre de Gibbs estándar (ΔGº) sea menor que cero. Sabiendo que se cumple :

$$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0$$

y suponiendo ΔHº e ΔSº constantes, busque la temperatura absoluta exacta a la que la reacción no favorece a productos ni a reactivos (ΔGº = 0).
(NOTA: preste atención a las unidades de ΔSº)
**Res.: 778,84 K;**

**4.** La constante de equilibrio de una reacción puede obtenerse mediante la expresión:

$$\ln K_{eq} = \frac{-\Delta H^{\circ}}{RT} + \frac{\Delta S^{\circ}}{R}$$

Hallar el valor la T a la que $\ln K_{eq}$ = 13,8 y a la que la constante de equilibrio es 984609,111. DATOS: R (constante de los gases) = 8,3145 J/(mol K); ΔHº = -180,0 kJ/mol; ΔSº = -179,4 J/(mol K).
**Res.: 611,95 K;**

**5.** Sea la matriz:

$$\begin{bmatrix} 7 & 4 & 9 \\ 5 & 9 & 8 \\ 1 & 2 & 2 \end{bmatrix}$$

¿Cuánto ha de valer el elemento $a_{11}$ para que el determinante de la matriz valga..?

a) 7
b) -7
c) 0

**Res.: a) 3; b) -4 ; c) -0,5 ;**

6. Hallar, usando buscar objetivo, valores de b que hagan r = 0.

$$r = (a^3 - 3c^2)^{1/2}$$
$$a = 3b^2 + 2b - 1$$
$$c = 5b^2 - 3b - 1$$

**NOTA:** La resolución de los problemas que siguen necesitan la extensión “Solver”

7. Encontrar el máximo de $F = 6xy - 3y^2 + z - z^2$ modificando simultáneamente las variables (y, z) pero no la x que ha de permanecer igual a 7.

**Res.: (x,y,z)=(7, 7, 0,5)**

8. Encontrar al menos un cero de esa misma función variando x, y, z a la vez.

**Res.: Algunas soluciones: (3,4940, 7,0000, 0,5000) (5,0610, 0,1073, 2,3640)**

9. La función $y = (x-2)^{3/2}$ tiene un mínimo. Encontrarlo.

**Res.: x = 2, y = 0**

**NOTA:** La solución ha de cumplir una condición para que y sea real

10. Dadas las funciones F y G, donde F = xy, G = 2x + 3y +1, obtener los valores de (x, y) que hagan máximo F cuando G valga 14.

**Res.: x = 3,25, y = 2,17**

11. Encontrar dos números cuya suma dé 15 y cuyo producto dé 10.

**Res.: 14,301; 0,699**

**12.** Hallar dos números cuya suma valga e*π y cuyo producto valga e+π.

**Res.: 0,752497; 7,787238**

**13.** Encontrar dos números cuyo producto sea 16 y su suma sea mínima.

**Res.: 4; 4**

**14.** Encontrar dos números cuyo producto sea 16 y la suma de uno de ellos con el cuadrado del otro sea mínima.

**Res.: 8; 2**

**15.** Sean las ecuaciones: $x^2 + y = 3$; $y^2 + x = 5$. Hallar sus raíces.

**Res.: x = 1, y = 2**

**16.** Dada la ecuación $y = 4x^4 - 7x^2 - x + 2^{1/2}$, encontrar: sus dos mínimos, su máximo y sus cuatro raíces. Se recomienda empezar por buscar las raíces (valores de x que hacen y=0).

**NOTA:** Para hallar más de una solución hay que probar diferentes valores iniciales

**17.** Lo mismo para la función: $y = 4x^5 - 11x^3 + 5x + 2^{1/2}$. Este polinomio tiene 3 raíces reales, dos máximos y dos mínimos.

**18.** Hallar la distancia mínima entre el punto (4, 2) y la parábola $y^2 = 8x$. La distancia entre dos puntos como (x, y) y (4, 2) viene dada por $((x-4)^2+(y-2)^2)^{1/2}$.

**Res.: La respuesta equivale a $8^{1/2}$**

**19.** **Programe con la hoja de cálculo el problema clásico de equilibrio**. Dada una reacción a una T para la cual su K es conocida, y dadas las concentraciones iniciales de reactivos y/o productos, encontrar las concentraciones en condiciones de equilibrio, a esa T, para las siguientes reacciones:

| Reacción 1 | K (448 °C) | $[H_2]_o$ | $[I_2]_o$ | $[HI]_o$ |
|---|---|---|---|---|
| $H_2(g) + I_2(g) \leftrightarrow 2\ HI\ (g)$ | 50,54 | 1,0 M<br>$5{,}0 \cdot 10^{-3}$ M | 1,0 M<br>$1{,}0 \cdot 10^{-2}$ M | 0 M<br>$1{,}0 \cdot 10^{-2}$ M |

| Reacción 2 | $K_c$ (600 °C) | $[SO_2]_o$ | $[O_2]_o$ | $[SO_3]_o$ |
|---|---|---|---|---|
| $2SO_2(g) + O_2(g) \leftrightarrow 2\ SO_3\ (g)$ | 6860 | $3{,}2 \cdot 10^{-3}$ M | $1{,}6 \cdot 10^{-3}$ M | $1{,}06 \cdot 10^{-2}$ M |

| Reacción 3 | $K_p$ (200 °C) | $[N_2]_o$ | $[H_2]_o$ | $[NH_3]_o$ |
|---|---|---|---|---|
| $N_2(g) + 3H_2(g) \leftrightarrow 2\ NH_3\ (g)$ | 0,431 | Suponga diversos casos de concentraciones iniciales y analice los resultados que obtenga | | |

**NOTA:** Recuerde que si se usa $K_p$ pero las condiciones iniciales se establecen en forma de concentraciones, debe usarse la relación entre Kp y Kc ; para una reacción con **incremento neto**, Δn, **de moles gaseosos**, esta relación es:

$$K_P = K_c \left( RT \right)^{\Delta n}$$

**Res.: Reacción 1,**

**Conc. inic.: (1,0; 1,0 ; 0) M ---> Conc. equilibrio: (0,22; 0,22 ; 1,56) M**

**Conc. inic.: ($5{,}0 \cdot 10^{-3}$; $1{,}0 \cdot 10^{-2}$; $1{,}0 \cdot 10^{-2}$) M ---> Conc. equilibrio: (0,001; 0,006 ; 0,018) M**

**Reacción 3 (Se asume Kp ha sido calculado con presiones en atmosferes)**

**Conc. inic.: (1,0; 1,0 ; 1,0) M ---> Conc. equilibrio: (0,724; 0,172 ; 1,55) M**