APLICACIONES INFORMÁTICAS EN QUÍMICA

Problemas Tema 3.2:

Manipulador Algebraico-2

Listas, matrices, vectores

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/

I. LISTAS

1. Generar los 50 primeros numeros pares y los 50 primeros números impares

2. Generar la serie de las raices cuadradas de los 50 primeros números pares.

3. Generar una serie de 50 pares de valores (a,b) donde "a" son las raices cuadradas de los números pares y "b" las raices cuadradas de los números impares

Res.: [[√2, √1], [√4, √3], [√6, √5],......]

4. Generar una lista formada por 10 listas de números con el formato:
[[1],[1,2],[1,2,3]......] . Naturalmente, la última "sublista" es [1,2,..... , 10].

5. Comprobar numéricamente creando una lista con el comando para generar listas que el número "e", la base de los logaritmos neperianos o naturales, cumple esta condición

$$e = \lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{1}{n}\right)^{n}$$

6. Cuenta la leyenda que el inventor del ajedrez (Sissa) le pidió al Rey Iadava, como recompensa por haber inventado aquel juego que aliviaba la melancolía del Rey, que pusiera un grano de arroz en el primer cuadrado del tablero, dos en el segundo, cuatro en el tercero y así sucesivamente. ¿Cuántos granos de arroz debían ponerse en el último cuadrado? ¿Cuántos había en todo el tablero?
Sabiendo que 100 granos de arroz pesan unos 2 g ¿Cuántos barcos de 100000 toneladas de carga útil hubieran sido necesarios para transportar el arroz de Sissa?

Res.: Granos en la última casilla: 9 223 372 036 854 775 808.
Granos en el tablero: 18 446 744 073 709 551 615.
Número de barcos: 3 millones seiscientos noventa mil barcos "hubieran bastado".

7.

II.- MATRICES

1. Construye dos matrices cuadradas de 3x3 (al menos). Llamémoslas A y B. Calcula su suma, su diferencia, su producto y su cociente. Comprueba si el determinante de la suma es la suma de los determinantes. Idem para la diferencia. Idem para el producto y para el cociente.

2. Construye las matrices cuadradas

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 10 & 8 & 7 & -3 \\ 5 & 12 & -4 & 5 \\ 3 & 6 & 21 & -3 \\ 4 & 7 & 2 & 25 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 5 & 4 & 2 & -1 \\ 5 & -6 & -4 & 5 \\ 4 & 8 & 11 & -9 \\ 3 & 17 & -2 & 7 \end{pmatrix}$$

Calcula la matriz inversa de **A** y la de **B**. <u>A partir de ellas</u>, calcula la matriz inversa del producto **A**.**B** . (Si el cálculo es correcto, el producto de **A**.**B** por su inversa debe dar la matriz unidad)

3. Se llama "Traza" de una matriz a la suma de los elementos de su diagonal principal. Calcular la traza de las matrices A y B del ejercicio anterior.

Res.: Traza de A: 68; de B: 17;

4. Construya la matriz simétrica:

$$\mathbf{H}1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Calcule su determinante.

Sustituya ahora los elementos de la diagonal por la incógnita x

Calcule de nuevo el determinante de forma que quede en la forma de un polinomio de x

Res.: 1; x^4-3x^2+1;

5. Realice las mismas operaciones con la matriz simétrica:

$$\mathbf{H}2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

III.- VECTORES

1. Dados los vectores $\mathbf{v}_1 = 5\,\mathbf{i} - 8\,\mathbf{j} - 3\,\mathbf{k}$ y $\mathbf{v}_2 = 2\,\mathbf{i} - \mathbf{j} - 2\,\mathbf{k}$, obtener el vector suma $\mathbf{S} = \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2$ y el vector resta $\mathbf{R} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$.

2. Dado un vector **V** , el vector unitario paralelo a **V** se obtiene dividiendo **V** por su módulo |V| .Obtener los vectores unitarios paralelos a **S** y a **R** del ejercicio anterior. Verificar que los módulos de los vectores unitarios obtenidos valen 1.

3. Obtener los productos escalares **S**.**R** y **R**.**S** de los vectores S y R del ejercicio anterior.

4. Verificar simbólicamente que el producto vectorial da un vector que es ortogonal a los dos factores (es decir, el producto escalar con cada uno de ellos es cero)

   AYUDA: Definir los vectores **r** con componentes (r_x , r_y , r_z) y **s** con componentes (s_x , s_y , s_z). Hay que comprobar que el vector **v** = **r** x **s** es "ortogonal" a los vectores **r** y **s** .

5. Obtener de forma simbólica el modulo de los vectores **A** (componentes A1,A2,A3) , **B** (B1,B2,B3) y **A**x**B** , y a partir de ellos, una expresión para el seno del angulo y para el ángulo que forman los dos vectores **A** y **B**.

   NOTA: Lo que en Física se conoce como "módulo" de un vector, se denomina en lenguaje matemático "norma" del vector, y corresponde a un concepto más general. Si no se dispone de una función específica para calcular la norma, se puede obtener recordando que el producto escalar de un vector por si mismo es el cuadrado de su módulo. Por lo tanto *modulo del vector* **v** = |v| = (v.v)^(1/2).

6. Considérese un vector **A**=[x1,y1,z1]. Calcúlense con el MA las siguientes operaciones: **A**^2, [x1,y1,z1]^2, **A**.**A**, **A*****A**, **A**x**A**. En un texto en que se mencione el cuadrado del vector **A** ¿A cual de estas operaciones se refiere?

7. Determinar el producto escalar, producto vectorial y el ángulo que forman entre sí cada dos de los siguientes vectores

$$\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} \quad \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 4 \\ 5 \\ 6 \end{pmatrix} \quad \mathbf{v}_3 = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ -4 \end{pmatrix} \quad \mathbf{v}_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Res.: $\mathbf{v}_1$ y $\mathbf{v}_2$: .2257 rad = 12.93 º ; $\mathbf{v}_2$ y $\mathbf{v}_4$: .5228 rad = 29.95 º