APLICACIONES INFORMÁTICAS EN QUÍMICA

Problemas Tema 3.3:

Manipulador Algebraico-3

Funciones y ecuaciones

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. FUNCIONES PREDEFINIDAS

1. Calcule estos valores (recuerde la diferencia entre usar números exactos y números aproximados; recuerde también la diferencia entre radianes y grados).

a)	sen(30)	sen(45)	sen(60)	sen(120)	sen(-60)
b)	sen(30º)	sen(45º)	sen(60º)	sen(120º)	sen(-60º)
c)	cos(30º)	cos(45º)	cos(60º)	cos(120º)	cos(-60º)
d)	tg(30º)	tg(45º)	tg(60º)	tg(120º)	tg(-60º)
e)	arcsen(0.5)	arcsen(1/2)	arccos(0.5)	arccos(1/2)	arctg(1)
f)	ln(2)	$\log_{10}(2)$	$\log_{10}(100)$	$\log_2(e)$	$\log_2(10)$
g)	e^0	e^1	$e^{\ln(2)}$	$e^{\log_{10}(e)}$	exp(5)

Res.: a) [-0.988, .8509, -.3048, .5806, .3048] ; b) [0.500, .707, .866, .866, -.866] ; e) [.5236, π/6, 1.047, π/3, .7854] ; g) [1 , e = 2.7181..., 2 , 1.544, 148.4]

2. Defina $A = x^a\ y^b$, B = x*(y/z) . Defina también C= sqrt(A) donde A es la expresión definida antes.

Obtenga expresiones para

a)	$\ln(A)$	$\ln(B)$	$\ln(C)$	$\ln(A*C)$
b)	e^A	e^B	e^C	e^{A*C}

Res.: a) ln(C) equivale a.... (b*log(y)+a*log(x))/2 ;
b) e^{AC} equivale a.... e^(x^a*y^b*sqrt(x^a*y^b));

II.- FUNCIONES DEFINIDAS POR EL PROGRAMADOR

1. Defina una función que dado un número, calcule su cubo y le reste su raiz cuadrada. Obtenga valores de esa función para distintos valores de x como se indica:

a)Valores numéricos de x: De -5 hasta 5 en intervalos de 0.5

b)Valores simbólicos de x: Potencias de t desde -5 hasta 5 de 1 en 1.

Res.: a) $-5^{1/2}$ i-125, -2.121 i-91.13, -2.0 i-64.0, ... , 62.0,89.0,122.8] ;

b) $1/t^{15}$ $-1/t^{5/2}$, $1/t^{12}$-$1/t^{2}$, $1/t^{9}$-$1/t^{3/2}$, ... , t^{9}-$t^{3/2}$, t^{12}-t^{2}, t^{15}-$t^{5/2}$.

2. Defina las siguientes funciones. Una vez definida cada una de ellas, verifique que el MA las reconoce como funciones dando valores a la variable (por ejemplo: y(a), y(π/2), y(0.05) ....). ¿Pueden darse como valores de las variables listas de valores?

$$\mathrm{y}(x) = x^3 - 2.5\,x^2 - 6\,x + 8$$

$$\mathrm{y}(x) = \mathrm{e}^x\ \mathrm{sen}(x)$$

$$\mathrm{y}(x) = \frac{x+3}{2\,x-4}$$

$$\mathrm{z}(x,y) = x^2 + y^2$$

$$\mathrm{z}(x,y) = \frac{3\cos\left(\frac{x^2+y^2}{3}\right)}{3 + x^2 + y^2}$$

3. Construya una función "deltaY" que calcule el incremento de la función x^2sen(x^2) cuando x se incrementa en una cantidad variable "h". Obtenga el valor de la función deltaY para x=5. y h=2.

Res.: deltaY(5. , 2.) vale -43.425

4. Por definición, el pH = $-\log_{10}[H^+]$.

a) Supongamos que una reacción produce una variación de la concentración de protones cuya variación con el tiempo se ha podido medir. Obtener expresiones para el pH en función de t para los siguientes casos:

1. $\left[\mathrm{H}^+\right] = \mathrm{A} + \mathrm{B} * \mathrm{t}$
2. $\left[\mathrm{H}^+\right] = \mathrm{A} + \mathrm{B} * \mathrm{t}^{\mathrm{n}}$
3. $\left[\mathrm{H}^+\right] = \mathrm{A} + \mathrm{B}^{\mathrm{t}}$

4. $\left[H^{+}\right] = A + e^{B*t}$

b) Obtener las mismas expresiones para los mismos casos si A=0

c) [PROBLEMA AVANZADO] Obtener una expresión para la diferencia de pH en función del t entre los casos b.1 y b.2 (es decir, para A=0) suponiendo que los B son iguales

Res: $-(n-1)\log_{10}(t)$

5. Definir una función de x con la expresión

$$f(x) = \frac{a}{b^2 + \left(x - x_0\right)^2}$$

donde "a", "b" y "x_0" son parámetros.

a) Obtener las expresiones de f(x) para $x=x_0$, $x=x_0+b$, $x=x_0-b$, $x=x_0-a/b$, $x=x_0+2*b$

b) Obtener expresiones de f(x) para x reemplazada por x_0+x y por x_0+x^2.

Res: a) $f(x_0) = a/b^2$, $f(x_0-b) = (1/2)a/b^2$; b) $f(x_0+x^2) = a/(x^4+b^2)$.

III.- ECUACIONES Y SISTEMAS DE ECUACIONES

1. Encontrar el valor de x en que dos expresiones se igualan : por ejemplo
   a) (7x+3) y (x-9)
   b) (7-5(x+8)) y (x-1/4 x+3/5 x)

2. Encontrar el valor de x en estas ecuaciones
   a) 75/x+1/3= 150.
   b) 2x + (7 /8) = 5x .
   c) 8(x+5) = 3x + (5/7)x + 2.7 .

Res: .5011, .2917, -8.703

3. Encontrar el punto (o puntos) donde se cruzan la parábola y = $6x^2$ -5x+3 y la recta y=9x+1/5 . NOTA: La solución da dos valores de x.

Res: . x=.2209, x=2.112.

4. El problema anterior puede plantearse de forma abstracta: Encontar los valores de x de los puntos de cruce entre una parabola "y = a x^2 + b x + c" y una recta "y = m x + n" .
   Si llamamos x1 y x2 a estos valores, encontrar expresiones para la suma x1+x2, para la diferencia x1-x2, para el producto x1*x2 y para el cociente x1/x2.

Res: . x1+x2 = (m-b)/a ...

5. Obtener de forma general los valores de x para el cruce entre una parábola "y = a x^2 + b x + c" y otra parábola "y = p x^2 + q x + r"
   Llamemos x1 y x2 a estos valores; encontrar expresiones para la suma x1+x2, para la diferencia x1-x2, para el producto x1*x2 y para el cociente x1/x2.

6. Resuelve las siguientes ecuaciones (independientemente una de otra) y verifica que los resultados son correctos:

a)	$x^7 - 3x^5 = -x^3 + 3x$
b)	$3x^2 + 2x^3 - 6 = 4x^4 - 2x$
c)	$\frac{1}{x} + 7x = 8(x+3)$

d)	$\frac{1}{x}+\frac{2}{x}+\frac{3}{x}=1$
e)	$\frac{a}{x}+\frac{b}{x}+\frac{c}{x}=1$

(Compárense los resultados de los casos "d)" y "e)")

7. La norma DIN para los pliegos de papel significa que cuando se dobla la hoja por el lado más largo, la hoja pequeña que resulta guarda entre sus lados largos y cortos la misma proporción que guardaban los lados largo y corto de la hoja grande. Así, por ejemplo, dados un folio DIN A4 y una cuartilla DIN A5, el lado largo del folio "F" es a su lado corto "f" como el lado largo de la cuartilla "C" es a su lado corto "c"; Nótese que "C" = "f" y que además el área de la hoja pequeña es la mitad del área de la hoja grande. Establecer cual es la relación constante lado_largo/lado_corto de la norma DIN.

Res.: 2^(1/2);

8. Supongamos que el lado largo de la hoja DIN A4 sea 29.5 cm. ¿Cuánto mide el lado corto del folio DIN A4 que es a su vez, el lado largo de la cuartilla DIN A5?

Res.: 20.86 cm (Puede verificarse facilmente si se dispone de un "folio" DIN A4 y una regla... y el fabricante ha respetado la norma).

9. Para depurar unas aguas se requiere una superficie de depuración de 500 m^2. Se quiere hacer con depuradores circulares.
Obtener el radio o los radios según los casos y las superficies respectivas.
a) Un solo depurador circular
b) Dos depuradores circulares de igual área
c) Dos depuradores circulares, uno de doble área que el otro.
d) Tres depuradores circulares de área S1 y dos de área S2, siendo S1 tres veces mayor que S2.

Res.: a) r = 12,62 m ; b) r = 8,921, S= 250,0 m^2 ;
c) r1 = 10,30 m , r2 = 7,284 m , S1= 333,3 m^2 , S2 = 166,7 m^2 ;
d) r1 = 6,588 m , r2 = 3,804 m , S1= 136,4 m^2 , S2 = 45,45 m^2 ;

10. Buscamos ahora la solución general del problema anterior: Llamaremos a la superficie total S.

Obtener expresiones para el radio o los radios según los casos y las superficies respectivas para los siguientes casos:

a) n depuradores circulares iguales.

b) n depuradores circulares de área S1 y m depuradores circulares de área S2, siendo S1 p veces mayor que S2.

Res.: a) $r = (S/(n\pi))^{1/2}$; b) $S1 = p\,S/(n\,p + m)$, $S2 = S/(n\,p + m)$;

IV.- DERIVACIÓN

1. Calcule las derivadas primera, segunda y tercera de $F = \frac{\sqrt{x+3}}{x^3}$.

2. Idem de $h = x^3 + 2$.

Res.: 3*x^2 ; 6*x; 6;

3. Idem de $h = \sqrt{\frac{x^3+1}{\sqrt{x}}}$. Obtenga el valor de la función y sus derivadas para x=1.

Res.: Para x=1, h y sus tres derivadas sucesivas comenzando por la primera valen [1.414, .7071, 1.237, -1.856];

4. Calcular los máximos y mínimos de la función y= (x-3)(x+2)(x-π)

Res.: Un máximo en x= -.3102; Un mínimo en x= 3.071

(NOTA: Hay más ejemplos de ejercicios de máximos y mínimos más abajo en esta sección IV)

5. Determine los puntos críticos de la función $y = 3x^4 + 4x^3 - 12x^2 + 12$

Res.: puntos singulares en x=1; x=-2; x=0 (mín, mín, máx, respectivamente).

6. Calcular la derivada de y respecto a x sabiendo que $x^2 + x\,y + y^2 = 7$

Res.: dy/dx = -(y+2*x)/(2*y+x)

7. Calcular y'(x) sabiendo que $x^2 + y^2 - 2\,x\,y + 3\,x - y = 3$

8. Calcular y'(x) sabiendo que e^x sen y + e^y sen x = 1

9. Calcula el desarrollo en forma de polinomio de Taylor hasta orden 10 de la función ln(1+x)

a) en torno al punto x=0 (desarrollo de Taylor-McLaurin).

b) en torno al punto x=1.

10. Idem para la función sen(x)*cos(x).

Res.: x-(2*x^3)/3+(2*x^5)/15-(4*x^7)/315+(2*x^9)/2835+...;

11. Comparar la superficie de la esfera de radio r con la "velocidad" a la que crece o disminuye el volumen (dV/dr) al variar r. Hacer lo mismo para la superficie de la esfera y la longitud de un círculo máximo.

12. La distancia entre el punto (x,y) y otro punto de referencia (x0,y0) viene dada por $r = \sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}$.

a) Obtener la derivada de r respecto de x, y respecto de y .

b) Obtener las derivadas segundas respecto de x, de y y de x,y

13. La distancia entre el punto (x,y,z) y otro punto de referencia (x0,y0,z0) viene dada por $r=\sqrt{(x-x_0)^2+(y-y_0)^2+(z-z_0)^2}$

a) Obtener las derivadas de r respecto de x, de y, y de z

b) Obtener el diferencial total de r

NOTA: Para obtener el diferencial total correcto hay que declarar "constantes" las coordenadas del origen (x0,y0,z0).

14. La función $y=x^x$, siendo x > 0, tiene un mínimo. Dar el valor de x y el de la función en el mínimo.

(NOTA; la misma función sin restricciones en el signo de x puede estudiarse usando las funciones realpart( ) e imagpart( ) , ya que para x<0 se trata de una función compleja).

Res.: x= 1/e = 0.367879 ; y = e^(-1/e)=0.692200).

15. La función $y=x^{1/x}$, siendo x > 0, tiene un máximo. Dar el valor de x y el de la función en el mínimo.

Res.: x= e = 2.718281828 ; y = e^(1/e)=1.444668.

16. a) La función $y = x^{\ln(x)}$ (para x>0) tiene un mínimo ¿en qué valor de x?

b) Determinar igualmente la posición del mínimo para la función $x^{\ln(a\ x)}$ siendo x>0 y siendo "a" una constante positiva.

Res.: a) x=1 ; b) x= $e^{-\ln(a)/2}$;

17. La función $x^{(\ln(2x)/x)}$ siendo x>0, tiene un mínimo y un máximo. Dar el valor de x y el de la función en el mínimo y en el máximo.

Res.: xmin= 0,66703 ; ymin=0.83948; xmax: 5.5388 ; ymax: 2.10275 ;

V.- INTEGRACIÓN

1. Calcular las integrales $\int \frac{1}{1+x}\,dx$ y $\int_0^1 \frac{1}{1+x}\,dx$.

Res.: ln(x+1) ; ln(2)=0.6931

2. ¿Qué ocurre al intentar realizar esta integral? $\int_{-1}^{1} \frac{1}{1+x}\,dx$.

3. Calcular las integrales $\int_0^{\infty} x^n e^{-x}\, dx$ para n=1, 2, ... , 6

Res.: 1 ; 2; 6; 24; 120; 720;

4. Calcular las integrales $\int_0^{\infty} x^n e^{-x^2}\, dx$ para n=1, 2, ... , 6

Res.: 1/2 ; sqrt(π)/4; 1/2; sqrt(π)*3/8; 1; sqrt(π)*15/16;

5. Calcular las integrales siguientes que aparecen en mecánica cuántica:

$$\int_0^L x^2 sen^2(k\,x)\, dx \quad ; \quad \int_0^L sen^2(k\,x)\, dx$$

Puede desarrollarse más este problema sustituyendo el valor de k por su valor $k = \frac{n\,\pi}{L}$ donde n es un número entero. L es una constante mayor que cero.

Res.: (L^3)/6 - (L^3)/(4*%pi^2*n^2); L/2 ;

6. Resuelve las integrales:

a)	$\int x^3\, dx$	b)	$\int \ln(x)\, dx$
c)	$\int tg(x)\, dx$		
d)	$\int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-a\,x}\, dx$	e)	$\int_{\pi/4}^{\pi/2} \cos^2(x)\, dx$

Res.: a) x^4/4 ; b) x*log(x)-x ; ... ; d) 1/a ; e) (π-2)/8

7. Resuelve las integrales

a)	$\int x\, e^x\, dx$	b)	$\int x^3\, sen(x)\, dx$
c)	$\int_0^1 \cos(x)\, dx$		

Res.: a) (x-1)*e^x ; c) 0.8414...

8. Resuelve las integrales:

a)	$\int \sqrt{a - b\,x^2}\, dx$	b)	$\int \frac{x+3}{x^3 - 2x^2 + x - 2}\, dx$

VI.- ESTRUCTURAS DE CONTROL ("IF" , "FOR")

1. Programar la suma de los "n" primeros numeros enteros usando un bucle "for". NOTA: Comenzar con n=50. Una vez programado, cambiando el valor de "n" se podrán obtener otras sumas.

Res.: Para n=50, sum=1275

2. Programar las suma de "n" numeros consecutivos de la serie descendente 1/100 + 1/99 + 1/98 +

Res.: Para n=50, sum=0.708172

3. Programar la misma suma que el ejercicio anterior (1/100+1/99+1/98+... pero ahora el cálculo ha de detenerse cuando la suma sea mayor o igual que una cantidad umbral o "cota".
   ¿Sabría modificar el programa para que "cuente" cuantos elementos ha sumado cuando alcanza el valor umbral?

Res.: Para umbral=0.75, sum=0.770690, 47 elementos sumados.

4. Programar usando el bucle "for" la suma simbólica $\frac{1}{a}+\frac{1}{a^2}+\frac{1}{a^3}+\cdots+\frac{1}{a^n}$ de manera que el resultado sea la fracción suma. NOTA: comenzar con n=5. Una vez programado, cambiando "n" y repitiendo la ejecución, se podrán obtener diferentes sumas.

Res.: para n=5 , $(a^4 + a^3 + a^2 + a + 1)/a^5$;

VII.- PROBLEMAS APLICADOS

1. Para una R.Q. en equilibrio se cumple la relación entre el incremento de potencial de Gibbs molar de la reacción, ΔGº , y la constante de equilibrio termodinámico K:

$$\Delta G^o = -R\ T \log(K)$$

donde R es la constante universal de los gases.

a) Obtener una función K_eq(x) que nos dé el valor numérico de K conocido ΔGº para T=298,15 K

b) Obtener una tabla de valores de K para ΔGº entre -50 kJ/mol y 50 kJ/mol de 10 en 10 unidades.

AYUDAS: Hacer el cálculo sin usar unidades en las expresiones pero teniendo en cuenta que

R= 8.31451x10^-3 kJ*K^-1*mol^-1

No deben confundirse las unidades de temperatura K (Kelvin) con la constante de equilibrio K que queremos calcular.

"log(x)" corresponde a logaritmos naturales o neperianos.

Res.: Para ΔGº = -50, ... 10 , 0, 10...., 50 ; K = 5.7501*10^8, ... , 56.49, 1, 0.0177, ...,1.7391*10^-9

2. Para la R.Q. en fase gas Cl2 + 2 NO2 = 2 ClNO2 , se dispone del dato ΔGº = 6.2 * (kJ/mol) (298,15 K, 1 atm)

a) ¿Cuál es el valor de Kp a esta temperatura?

b) Formular las presiones parciales en el equilibrio para valores iniciales de pCl2_0, pNO2_0, y pClNO2_0 dados.

c) Obtener las presiones en el equilibrio para las condiciones iniciales...

c1) pCl2_0 = 1 atm, pNO2_0 = 1 atm, y pClNO2_0 = 1atm

c2) pCl2_0 = 1 atm, pNO2_0 = 1 atm, y pClNO2_0 = 0 atm

c3) pCl2_0 = 0 atm, pNO2_0 = 0 atm, y pClNO2_0 = 1 atm.

Res.: a) Kp = 0.082 atm^-1 ; Kp = (pClNO2o+2*x)^2/((pCl2o-x)*(pNO2o-2*x)^2); c1) pCl2=1.257 atm , pNO2 = 1.514 atm , pClNO2=0.486 atm.

3. El valor de ΔGº para la R.Q. en fase gas Br2 + 2 NO = 2 BrNO es

ΔGº = -10.4 * (kJ/mol) (298,15 K, 1 atm)

a) ¿Cuál es el valor de Kp a esta temperatura?

b) Formular las presiones parciales en el equilibrio para valores iniciales de pBr2_0, pNO_0, y pBrNO_0 dados

c) Obtener las presiones en el equilibrio para las condiciones iniciales

c1) pBr2_0 = 1 atm, pNO_0 = 1 atm, y pBrNO_0 = 1 atm.

c2) pBr2_0 = 0 atm, pNO_0 = 0 atm, y pBrNO_0 = 1 atm.

Res.: a) Kp = 66.38 atm^-1 ; Kp = (pBrNOo+2*x)^2/((pBr2o-x)*(pNOo-2*x)^2); c1) pBr2=.6336 atm, pNO=.2672 atm, pBrNO=1.733 atm.

4. Para la R.Q. en fase gas $NO + NO_2 + H_2O = 2\ HNO_2$ Kp= 1.56 atm^-1 (293 K, 1 atm)

a) Cuál es el valor de ΔG^o ?

b) Formular las presiones parciales en equilibrio para unos valores iniciales pNO_0, pNO2_0, pH2O_0 y pHNO2_0 dados

c) Obtener las presiones en el equilibrio para las condicones iniciales

c1) pNO_0 = 1 atm, pNO2_0 = 1atm, pH2O_0 = 1 atm y pHNO2_0 = 0 atm.

c2) pNO_0 = 0.6 atm, pNO2_0 = 0.7 atm, pH2O_0 = 0.8 atm y pHNO2_0 = 1.0 atm.

Res.: a) ΔG^o = -1.102 kJ*mol^-1 ; Kp = (pHNO2o+2*x)^2/((pNOo-x)*(pNO2o-x)*(pH2Oo-x)); c1) pNO = pNO2 = pH2O= .6629 atm, pHNO2=0.6742 atm.

5. Se quiere cortar un alambre de 60 metros en dos piezas. Una de ellas se doblará para formar un triangulo equilátero. La otra se doblará para formar un cuadrado. Se busca las longitudes de los lados del triangulo y el cuadrado que permiten obtener un área mínima.

Res.: Lado del triangulo: 11.30 m ; Lado del cuadrado: 6.52 m.