

# **APLICACIONES INFORMÁTICAS EN QUÍMICA**

## **Problemes Tema 2.2: Matrius i vectors en el Full de Càlcul**

**Grau en Química**  
1º SEMESTRE

**Universitat de València**  
**Facultat de Química**  
**Departament de Química Física**



Aquesta obra està sota una [licència de Creative Commons](#)

1. Operacions bàsiques amb matrius.

a) Sumar i multiplicar les matrius **M** i **N** següents

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

b) Restar i dividir les matrius **M** i **N** anteriors

c) Verifiqueu com afecta l'ordre de l'operació al resultat dels apartats **a)** i **b)**

Quines operacions amb matrius són commutatives i quines no?

2. Construïu les següents matrius de 3x3, que nomenarem **A** i **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) Calculeu el determinant d'**A** i el de **B**

b) Calculeu la matriu inversa d'**A**

c) Calculeu el producte **A B**, el producte **B A** i el quocient **A/B**

d) Calculeu el determinant del quocient

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

3. Construeix una matriu 3x3. Calculeu llur determinant. Si és distint de zero, calculeu la matriu inversa (Si el determinant val zero, canvieu la matriu i recalqueu la matriu inversa). A continuació, multipliqueu ambdues matrius per a obtenir una matriu unitat 3x3.

4. Construïu una matriu més gran que en l'exercici anterior (6x6, per exemple) i comproveu que el determinant d'una matriu canvia de signe si s'intercanvien de lloc dues files qualsevol. Comproveu el mateix per a la permutació de dues columnes.

5. Construir dues matrius quadrades arbitràries, (almenys, 4x4) i comprovar que si dues matrius quadrades se multipliquen, llurs determinants també ho fan. Se compleix el mateix amb la suma de matrius? Comprovar.
  
6. Preneu dues matrius quadrades (almenys, 4x4) que només es diferenciïn en una columna. Construeix una tercera matriu igual a les anteriors però en la qual la columna diferent siga suma (o resta) de les dues columnes que eren diferents en les dues primeres matrius. Comproveu ara que la suma (o resta) dels determinants de les dues primeres matrius és igual al determinant de la tercera.
  
7. Operacions amb matrius no quadrades:
  - a) Construeix una matriu 2x4 i altra 4x3. Multipliqueu-les
  - b) Construeix altres parells de matrius no quadrades que poden ésser multiplicades i multipliqueu-les (per exemple, matrius: 3x2 i 2x5 o 5x3 i 3x2)
  - c) El mateix per als següents casos:
    - c1.- 3x1 i 1x3
    - c2.- 1x3 i 3x1 (Producte escalar d'un vector fila per un vector columna)
    - c3.- 3x3 i 3x1 (Producte d'una matriu per un vector columna)
    - c4.- 1x3 i 3x3 (Producte d'un vector fila per una matriu)
  
8. Utilitzeu el full de càlcul per a operar amb vectors:
  - a) Sumeu els vectors  $3\mathbf{i} + 4\mathbf{j} - 6\mathbf{k}$  i  $2.4\mathbf{i} - 5\mathbf{j} + 1.3\mathbf{k}$
  - b) Calculeu el quocient de llurs mòduls.
  - c) Obtengueu el producte escalar dels dos vectors anteriors
  - d) Obtengueu l'angle que formen entre ells a partir del producte escalar i llurs mòduls.
  - e) Repetiu els exercicis anteriors amb altres vectors. Si s'ha treballat bé, el full de càlcul ha quedat preparat de manera que serà fàcil repetir els càlculs amb altres vectors. Aquí hi ha algunes suggerències de parells de vectors  $\mathbf{r}$  i  $\mathbf{s}$ :

	<b>r</b>	<b>s</b>	<b>Res.</b>
d.1	$2\mathbf{i} + 3.3\mathbf{j} + 5\mathbf{k}$	$3\mathbf{i} + 6\mathbf{j} + 5\mathbf{k}$	<b>15,98°</b>
d.2	$1.1\mathbf{i} + 2.2\mathbf{j} + 3.3\mathbf{k}$	$3.3\mathbf{i} + 2.2\mathbf{j} + 1.1\mathbf{k}$	
d.3	$1.5\mathbf{i} + 2.5\mathbf{j} + 3.5\mathbf{k}$	$-1.5\mathbf{i} - 2.5\mathbf{j} - 3.5\mathbf{k}$	
d.4	$1.5\mathbf{i} + 2.5\mathbf{j} + 3.5\mathbf{k}$	$2.0\mathbf{i} + 2.0\mathbf{j} + 2.0\mathbf{k}$	
d.5	$1.5\mathbf{i} + 2.5\mathbf{j} + 3.5\mathbf{k}$	$3.0\mathbf{i} + 3.0\mathbf{j} + 3.0\mathbf{k}$	
d.6	$0.7\mathbf{i} + 0.22\mathbf{j} + 1.07\mathbf{k}$	$-0.77\mathbf{i} + 4.4\mathbf{j} + -0.4\mathbf{k}$	

f) Si en l'apartat anterior **r** representa una força en Newtons i **s** representa el desplaçament (en metres) de la força **r**, doneu el valor del treball W (en Joules) realitzat per la força en cada cas.

9. Sumar els vectors  $\mathbf{r} = 3\mathbf{i} + 5.5\mathbf{j} + 8\mathbf{k}$  i  $\mathbf{s} = 2.4\mathbf{i} + 3.5\mathbf{j} + 5\mathbf{k}$  i useu la nomenada "regla del cosinus":

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

per a obtenir l'angle  $\theta$  que formen **r** i **s**. Comproveu els valors de l'angle ( $\theta$ ) obtinguts d'aquesta manera amb els angles obtinguts en l'exercici 8.-.