

APLICACIONES INFORMÁTICAS EN QUÍMICA

Problemes Tema 2.3:

**Sèries, representació de funcions i construcció de
taules en FC**

Grau en Química

1º SEMESTRE

Universitat de València

Facultat de Química

Departament de Química Física



Aquesta obra està sota una [licència de Creative Commons](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/)

1. Genereu sèries aritmètiques de valors en columna segons aquestes dades:

Valor inicial	Valor final	Increment
-100	100	10
-10	10	0,5
0	360	5

a) Genereu sèries geomètriques de valors en columna:

Valor inicial	Valor final	“Increment” o raó
1	200	1,1
100	0,2	0,975

NOTA: Les sèries aritmètiques se caracteritzen per “l’increment” o diferència entre els elements contigus. Les sèries geomètriques se caracteritzen per “la raó” o quocient entre elements contigus. El valor “final” que el full de càlcul demana en les dades per a generar sèries actua com valor màxim o mínim que no pot passar-se

2. Construïu una sèrie en columna de valors de x entre 0 i 2 amb un interval de 0.05 entre ells.

a) Calcular en columnes contigües les funcions

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

b) Representar gràficament totes aquestes funcions en la mateixa gràfica

c) Ajustar l’eix de les ordenades (y) entre 0 i 5

d) Calcular ara columnes addicionals amb les funcions

2^x	e^x	10^x
-------	-------	--------

i aferir-les a la mateixa gràfica anterior.

3. Realitzar un exercici similar a l'anterior amb les següents dades:

Interval de les abscisses (**x**): Entre 0 i 2 amb increments de 0.05

Primer grup de funcions:

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

Interval de les ordenades (**y**): Entre 0 i 2

Segon grup de funcions

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

4. Generar una taula de valors de la funció lineal $y = m x + b$, on m i b són paràmetres, x és la variable independent, i y és la variable dependent.

- Construir una taula dels valors d' y que resulten quan x varia de -10 fins a 10 de 0.1 en 0.1. Per a això és necessari tindre un conjunt de paràmetres $\{m, b\}$. Prendrem uns valors arbitraris però situats en cel.les prefixades. Per a començar, preneu $m = 1$, $b = 1$. Els valors d' y se programaran de manera que depenguin de les direccions absolutes de les cel.les que contenen els valors de m i de b

- Al costat de la taula (x, y), fer la representació gràfica de la corba i en funció de x .

- Modifiqueu les cel.les que contenen m i/o b . Verifiqueu l'efecte sobre la gràfica. Fer un estudi sistemàtic del que ocorreix al modificar m o b

5. Construïu una taula de volums (en litres) per a un mol de gas ideal a diferents pressions, P , (0.8, 1.0, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8 i 2.0 atm) per a un conjunt de valors de T (260, 265, 270 ..., fins 400 K). Els volums corresponents a cada P fixa haurien d'aparèixer en columna (per tant les P estaran en una fila i les T en columna).

- a) Construïu altra taula apart equivalent a l'anterior però en la qual per a cada T fixa apareguen els volums en columna per a les diferents P (per tant les P estaran en una columna i les T en una fila)
- b) Cal preveure que el nombre de mols del gas pot modificar-se, de manera que ambdues taules han de recalculer-se automàticament si se modifica el nombre n de mols de gas. El valor de n haurà d'estar indicat en una única cel.la apart.

$R = 0.0820578 \text{ atm L K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$. Amb aquestes dades obtindrà dues taules de volums de gasos ideals en L (litres)

NOTA: Per què no apareix en cap cel.la el famós valor 22.4 L que “se suposa” ocupa un mol?

- c) Dupliqueu ara les dues taules en altra part del document. En les taules duplicades les dades de volum han d'aparèixer en cm^3 . Les quatre taules (les dues inicials i les dues duplicades) hauran de recalculer-se de forma automàtica cada vegada que es canvie el nombre n de mols

NOTA: Si té coneixements avançats, pot duplicar les taules en un full diferent però en el mateix document o “llibre” del FC

6. Utilitzar les dades (x,y) següents per a representar, en la mateixa gràfica, les sèries de punts (x,y) i (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

Utilitzar l'opció “**eix secundari**” i altres opcions per a que la gràfica permeti la representació clara de les sèries.

7. Fer el mateix amb les sèries (x, e^x) i (x, e^y) , estant present en la gràfica la sèrie (x,y) i no estant-lo.

8. **Calculador de masses moleculars d'hidrocarburs i altres molècules orgàniques.** Els alcans, (mono)alquens i (mono)alquins tenen les fórmules generals C_nH_{2n+2} , C_nH_{2n} i C_nH_{2n-2} respectivament.

- a) Feu una taula que pugui “crèixer” còmodament on, donat “n”, s'obtinga al costat, en columnes successives, les masses moleculars relatives de l'alcà, l'alquè i l'alquí corresponents
- b) Ampliï la taula de manera que en columnes contigües a cada hidrocarbur, s'obtinga el percentatge en pes de cada element (C i H)

AJUDA: Ar (C)= 12.0107; Ar (H)= 1.0079

9. **Calculador de masses moleculars de molècules orgàniques comuns.**

Considereu molècules orgàniques de fórmula molecular general $C_aH_bO_cN_d$.

Construïu una taula que pugui “crèixer” còmodament on, donats “a, b, c, d”, s'obtinga al costat la massa molecular del compost $C_aH_bO_cN_d$ corresponent (la qual val per a tots llurs isòmers, naturalment), així com el percentatge en pes de cada element.

AJUDA: Ar (C)= 12.0107; Ar (H)= 1.0079; Ar (O)= 15.9994, Ar (N)= 14.0067

Res.: Alguns resultats 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)

CH₅N (Mr=31,0569; %C: 38,67, %H: 16,23, %N: 45,10)

10. La sèrie de les potències de 2 amb valor inicial 2¹ i valor final en 2³² o en 2⁶⁴ és molt important en informàtica teòrica (amb n bits, el nombre sencer més gran que pot representar-se és 2ⁿ-1). Dita sèrie pot generar-se com sèrie geomètrica. Genereu les sèries fins 2³² i fins 2⁶⁴.
 Calculeu la sèrie de potències de 2 fins 1.0 · 10³² i fins 1.0 · 10⁶⁴. Esbrineu quants elements té cadascuna d'elles.

Res.: Nombre d'elements de la sèrie: Fins 10³² : 107; Fins 10⁶⁴ : 213

11. Utilitzeu el FC per a generar sèries en funció d'un "comptador" o índex "n".
 Exemple: és fàcil imaginar que si prenem la meitat d'un segment, li afegim la meitat de l'altra meitat, afegim la meitat del que queda, i així successivament, arribarem a tindre tot el segment.... o no? Utilitzeu el FC per a generar la sèrie $\frac{1}{2^n}$ des de **n=1** i anar sumant-la per a cada valor de **n**. En altres paraules,

calculeu les sumes parcials $\sum_{n=1}^n \frac{1}{2^n}$. Quan podem dir que hem arribat a sumar la unitat?

- a) Feu el mateix tipus d'exercici per a diverses sèries. Construeu les sèries (fins un màxim de 60 elements començant per l'índex n=1) i calculeu la seua suma.

Nom	Element	Sèrie	Límit
b.1	$\frac{1}{n^2}$	$\sum_{n=1}^{n_{\max}} \frac{1}{n^2}$	$\left(\frac{\pi^2}{6}\right)$
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

Objectius:

Distingir clarament entre:

- Els elements d'una sèrie (el nom matemàtic rigorós és “successió”)
- El límit al qual tendeixen els elements
- La sèrie formada per les **sumes parcials** dels elements de la sèrie (successió)
- El límit de la sèrie de sumes parcials. Una sèrie és convergent quan ho és la sèrie de sumes parcials.

Usar el FC per a comprendre aquestos objectius

12. Genereu una sèrie de valors de la variable independent x i programeu les següents funcions:

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

Les funcions shx i chx definides abans s'anomenen “**sinus hiperbòlic**” i “**cosinus hiperbòlic**” respectivament. (Són funcions que apareixen com solució de certes equacions diferencials d'interés en Química i en Física. S'anomenen “**hiperbòliques**” per que poden definir-se de forma semblant a les funcions trigonomètriques clàssiques o circulars, però es defineixen sobre una hipèrbola en lloc de sobre una circumferència).

- a) Comproveu que els valors obtinguts dalt per a shx i chx són els mateixos que els que proporcionen les funcions “SENOH()” i “COSH(...)” del full de càlcul Excel
- b) Comproveu també que es compleix la relació trigonomètrica $ch^2 x - sh^2 x = 1$ per a tots els valors de x . (Recordeu que en el cas de les funcions trigonomètriques circulars $\sin(x)$ i $\cos(x)$, la suma dels quadrats és igual a 1)
- c) De la mateixa manera que la tangent trigonomètrica és igual al quocient $\sin(x)/\cos(x)$, es defineix la tangent hiperbòlica

$$\operatorname{th}x = \frac{\operatorname{sh}x}{\operatorname{ch}x}$$

Comproveu que els valors de $\operatorname{th}x$ obtinguts amb el quocient anterior són iguals als de la funció “TANH(...)” del full de càlcul Excel.

13. Construïu sèries similars de valors per a unes altres funcions matemàtiques. Per exemple:

- a) $y = \ln(\sin(x))$
- b) $y = e^{-x} \ln(x)$. Comproveu cap a quin valor tendeix aquesta funció a valors molt grans de x
- c) $y = x(1 + x^2)^{1/2}$
- d) $y = \operatorname{tg}^3(x)^{1/2}$
- e) Proveu-ne unes altres més...