
APLICACIONES INFORMÁTICAS EN QUÍMICA

Problemes Tema 2.5: Resolució numèrica d'equacions

Grau en Química
1^{er} SEMESTRE

Universitat de València
Facultat de Química
Departament de Química Física



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

1. Dos problemes clàssics resolubles amb equacions de primer grau:

a) Dues quantitats sumen 100 i una d'elles és k vegades l'altra: $x = k*(100-x)$

Exemples: Resoldre'ls per a $k= 3.25$; $k= 0.025$; $k = 2*\pi$ usant el FC.

b) Punt de creuament de dues rectes, $y= m*x+b$, $y= m'*x+b'$

Exemples: Resoldre'l usant el FC per a

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

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

c) Una variant general del cas a) és el "repartiment proporcional": Repartiment d'una quantitat A en varies parts d'acord amb la proporció marcada per un conjunt de números (a, b, c...).

Un eixemple: Repartir 100 g de KCl en tres parts proporcionals a tres números donats: (6; 4,5 ; 2). La equació a resoldre és $6*x+4,5*x+2*x=100$ i si es programa be, s'obté directament cada part en grams ($6*x$; $4,5*x$; i $2*x$)

d) El mateix problema en una versió més química: Repartir 100 g de KCl de manera que la quantitat de POTASI en cada part estiga en la mateixa proporció que els 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) Punt (x,y)= (-0,69 , -3,36) ; punt (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. Resoldre les equacions:

Equacions	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
$(\sin(x))^3 - 1/\tan(x)=\cos(x)$	1,18080 radians = 67,6551 °
	5,52305 radians = 316,448 °
$x^x = 2x^3$	0,73624

NOTA: En diversos exemples anteriors es dona un resultat. No obstant això, en alguns casos podria haver-ne més d'un resultat. **¡És molt important que s'entenga perquè pot passar això i què cal fer per a trobar altres possibles resultats!**

3. En la reacció química $2NO(g) + O_2 \rightarrow 2NO_2(g)$, els increments de entalpia estàndard (ΔH°) i el d'entropia estàndard (ΔS°) a 298,15 K són, respectivament, $-114,1$ kJ i $-146,5$ J K⁻¹. La reacció serà espontània (en el sentit de favorable als productes de reacció) quan la variació d'energia lliure de Gibbs estàndard (ΔG°) siga menor que zero. Sabent que se compleix :

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

i suposant ΔH° i ΔS° constants, cerqueu la temperatura absoluta exacta a la qual la reacció no afavoreix ni als productes ni als reactius ($\Delta G^\circ = 0$).

(NOTA: presteu atenció a les unitats de ΔS°)

Res.: 778,84 K;

4. La constant d'equilibri d'una reacció pot obtenir-se mitjançant l'expressió:

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

Trobar el valor de la T a la qual $\ln K_{eq} = 13.8$ i la la constant d'equilibri és 984609.111. DADES: R (constant dels gasos) = 8.3145 J/(mol K); $\Delta H^\circ = -180.0$ kJ/mol; $\Delta S^\circ = -179.4$ J/(mol K).

Res.: 611,95 K;

5. Siga la matriu:

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

Quant ha de valdre l'element a_{11} per a que el determinant de la matriu valga el següent:?

- a) 7
- b) -7
- c) 0

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

6. Trobar, usant cercar objectiu (“**buscar objetivo**”) valors de b que facen $r = 0$.

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

$$a = 3b^2 + 2b - 1$$

$$c = 5b^2 - 3b - 1$$

NOTA: La resolució dels problemes que segueixen necessiten l'extensió “**Solver**”

7. Trobar el màxim de $F = 6xy - 3y^2 + z - z^2$ modificant simultàniament les variables (y, z) pero no la x que ha de romandre igual a 7.

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

8. Trobar almenys un zero d'aquesta mateixa funció variant x, y, z a la vegada.

Res.: Algunes solucions: (3,4940, 7,0000, 0,5000) (5,0610, 0,1073, 2,3640)

9. La funció $y = (x-2)^{3/2}$ té un mínim. Trobeu-lo.

Res.: x = 2, y = 0

NOTA: La solució ha de complir una condició per a que y siga real

10. Donades les funcions F i G, on $F = xy$, $G = 2x + 3y + 1$, obtenir els valors de (x, y) que facen màxim F quan G valga 14.

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

11. Trobar dos números la suma dels quals done 15 i el producte dels quals done 10.

Res.: 14,301; 0,699

12. Trobar dos números la suma dels quals valga $e \cdot \pi$ i el producte dels quals valga $e + \pi$.

Res.: 0,752497; 7,787238

13. Trobar dos números el producte dels quals siga 16 i llur suma siga mínima.

Res.: 4; 4

14. Trobar dos números el producte dels quals siga 16 i la suma d'un d'ells amb el quadrat de l'altre siga mínima.

Res.: 8; 2

15. Siguen les equacions: $x^2 + y = 3$; $y^2 + x = 5$. Determineu llurs arrels (solucions).

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

16. Donada l'equació $y = 4x^4 - 7x^2 - x + 2^{1/2}$, trobar: llurs dos mínims, el seu màxim i les seues quatre arrels. Es recomana començar per cercar les arrels (valors de x que fan $y=0$).

NOTA: Per a trobar més d'una solució cal provar diferents valors inicials.

17. El mateix per a la funció: $y = 4x^5 - 11x^3 + 5x + 2^{1/2}$. Aquest polinomi té 3 arrels reals, dos màxims i dos mínims.

18. Trobar la distància mínima entre el punt $(4, 2)$ i la paràbola $y^2 = 8x$. La distància entre dos punts com (x, y) i $(4, 2)$ ve donada per $((x-4)^2 + (y-2)^2)^{1/2}$.

Res.: La resposta equival a $8^{1/2}$

19. Programeu amb el full de càlcul el problema clàssic d'equilibri. Donada una reacció a una T per a la qual la seua K és coneguda, i donades les

concentracions inicials de reactius i/o productes, trobar les concentracions en condicions d'equilibri, a eixa T, per a les següents reaccions:

Reacció	K (448 °C)	[H ₂] ₀	[I ₂] ₀	[HI] ₀
H ₂ (g) + I ₂ (g) ↔ 2 HI (g)	50,54	1,0 M 5,0·10 ⁻³ M	1,0 M 1,0·10 ⁻² M	0 M 1,0·10 ⁻² M

Reacció	K _c (600 °C)	[SO ₂] ₀	[O ₂] ₀	[SO ₃] ₀
2SO ₂ (g) + O ₂ (g) ↔ 2 SO ₃ (g)	6860	3,2·10 ⁻³ M	1,6·10 ⁻³ M	1,06·10 ⁻² M

Reacció	K _p (200 °C)	[N ₂] ₀	[H ₂] ₀	[NH ₃] ₀
N ₂ (g) + 3H ₂ (g) ↔ 2 NH ₃ (g)	0,431	Suposeu diversos casos de concentracions inicials i analitzeu els resultats que obtingueu		

NOTA: Recordeu que si s'usa K_p però les condicions inicials s'estableixen en forma de concentracions, caldrà usar la relació entre K_p i K_c; per a una reacció amb **increment net**, Δn, de **mols gasoses**, aquesta relació és: $K_p = K_c (RT)^{\Delta n}$

Res.: Reacció 1,

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

Conc. inic.: (5,0·10⁻³; 1,0·10⁻²; 1,0·10⁻²) M --> Conc. equilibri: (0,001; 0,006 ; 0,018) M

Reacció 3 (S'assumeix que K_p ha estat calculat amb pressions en atmòsferes)

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