# APLICACIONS INFORMÀTIQUES EN QUÍMICA

## Problemes Tema 3.2:

## Manipulador Algebraic-2

## Llistes, matrius, vectors

## Grau en Química

**1º SEMESTRE**

## Universitat de València

## Facultat de Química

## Departament de Química Física

F. Química - Edifici E - 3º planta.
C./ Dr. Moliner 50. 46100 Burjassot, València • Tel. (+34) 963543389 • Fax (+34) 963544564
Aula Virtual: http://aulavirtual.uv.es/

## I. LLISTES

**1.** Generar els 50 primers nombres parells i els 50 primers nombres imparells

**2.** Generar la sèrie de les arrels quadrades dels 50 primers nombres parells.

**3.** Generar una sèrie de 50 parells de valors (*a,b*) on "*a*" són les arrels quadrades dels nombres parells i "*b*" les arrels quadrades dels nombres imparells

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

**4.** Generar una llista formada per 10 llistes de nombres amb el format:
[[1],[1,2],[1,2,3]......  ] . Naturalment, l'última "subllista" és [1,2,..... , 10].

**5.** Comprovar numéricament creant una llista amb el comando per a generar llistes que el número "e", la base dels logaritmes neperians o naturals, compleix aquesta condició

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

**6.** Conta la llegenda que 'inventor dels escacs (Sissa) li demanà al Rei Iadava, com recompensa per haver-ne inventat aquell joc que alleujava la malenconía del Rei, que posés un gra d'arròs en el primer quadrat del tauler, dos en el segon, quatre en el tercer i així successivament. Quants grans d'arròs havien de posar-se en l'últim quadrat? Quants havia en tot el tauler?
Sabent que 100 grans d'arròs pesen uns 2 g, quants vaixells de 100000 Tones de càrrega útil hagueren estat necessaris per a transportar l'arròs de Sissa?

**Res.: Grans en l'última casella: 9 223 372 036 854 775 808.**

**Grans en tot el tauler: 18 446 744 073 709 551 615.**

**Nombre de vaixells: 3 milions sis-cents noranta mil vaixells "hagueren bastat".**

## II.- MATRIUS

1. Construïu dues matrius quadrades de 3x3 (almenys). Nomenem-les **A** i **B**. Calculeu la seua suma, la seua diferència, el seu producte i el seu quocient. Comprobeu si el determinant de la suma és la suma dels determinants. Fer el mateix per a la diferència. Fer el mateix per al producte i per al quocient.

2. Construïu les matrius quadrades

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

Calculeu la matriu inversa d'**A** i la de **B**. <u>A partir d'elles</u>, calculeu la matriu inversa del producte **A**.**B** . (Si el càlcul es correct, el producte de **A**.**B** per la seua inversa haurà de donar la matriu unitat)

3. S'anomena "Traça" d'una matriu, a la suma dels elements de la seua diagonal principal. Calcular la traça de les matrius **A** i **B** de l'exercici anterior.

**Res.: Traça d'A: 68; traça de B: 17;**

4. Construïu la matriu simètrica:

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

Calculeu el seu determinant.

Substitueix ara els elements de la diagonal per la incògnita **x**

Calculeu de nou el determinant de manera que es quede en la forma d'un polinomi de x

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

5. Realitzeu les mateixes operacions amb la matriu simètrica:

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

## III.- VECTORS

1. Donats els vectors $\mathbf{v}_1 = 5\,\mathbf{i}\ -8\,\mathbf{j}\ -3\,\mathbf{k}$ i $\mathbf{v}_2 = 2\,\mathbf{i}\ -\ \mathbf{j}\ -2\,\mathbf{k}$ , obtenir el vector suma **S**= $\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2$ i el vector diferència **R**= $\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$ .

2. Donat un vector **V**, el vector unitari paral.lel a **V** s'obté dividint **V** pel seu mòdul |V| .Obtenir els vectors unitaris paral.lels a **S** i a **R** de l'exercici anterior. Verificar que els mòduls dels vectors unitaris obtinguts valen 1.

3. Obtenir els productes escalars **S**.**R** i **R**.**S** dels vectors **S** i **R** de l'exercici anterior.

4. Verificar simbòlicament que el producte vectorial dóna un vector el qual és ortogonal als dos factors (o siga que, el producte escalar amb cadascun d'ells és zero)

   AJUDA: Definir els vectors **r** amb components ($r_x$ , $r_y$ , $r_z$) i **s** amb components ($s_x$ , $s_y$ , $s_z$). Cal comprovar que el vector **v** = **r** x **s** és "ortogonal" als vectors **r** i **s** .

5. Obtenir de manera simbòlica el mòdul dels vectors **A** (components A1,A2,A3), **B** (B1,B2,B3) i **A**x**B**, i a partir d'ells, una expressió per al sinus de l'angle i per a l'angle que formen els dos vectors **A** i **B**.

   **NOTA:** El que en Física se coneix com "mòdul" d'un vector, s'anomena en llenguatge matemàtic "norma" del vector, i correspon a un concepte més general. Si no es disposa d'una funció específica per a calcular la norma, se pot obtenir recordant que el producte escalar d'un vector per si mateix és el quadrat del seu mòdul. Per ltant *mòdul del vector* **v** = |v| = (v.v)^(1/2).

6. Considereu un vector **A**=[x1,y1,z1]. Calculeu amb el MA les següents operacions: **A**^2, [x1,y1,z1]^2, **A**.**A**, **A*****A**, **A**x**A**. En un text en el qual s'esmente el quadrat del vector **A,** a quina d'aquestes operacions es refereix?

7. Determinar el producte escalar, producte vectorial i 'l'angle que formen entre si cada dos dels següents vectors

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

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