APLICACIONS INFORMÀTIQUES EN QUÍMICA

Problemes Tema 3.3:

Manipulador Algebraic-3

Funcions i equacions

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. FUNCIONS PREDEFINIDES

1. Calculeu aquestos valors (recordeu la diferència entre utilitzar nombres exactes i nombres aproximats. Recordeu també la diferència entre radians i graus).

a)	sin(30)	sin(45)	sin(60)	sin(120)	sin(-60)
b)	sin(30º)	sin(45º)	sin(60º)	sin(120º)	sin(-60º)
c)	cos(30º)	cos(45º)	cos(60º)	cos(120º)	cos(-60º)
d)	tg(30º)	tg(45º)	tg(60º)	tg(120º)	tg(-60º)
e)	arcsin(0.5)	arcsin(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. Definir $A = x^a\ y^b$, $B = x*(y/z)$. Definir també C= sqrt(A) on A és l'expressió definida abans.

Obtenir expressions per a:

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

Res.: a) ln(C) equival a.... (b*log(y)+a*log(x))/2 ;

b) e^{AC} equival a.... e^(x^a*y^b*sqrt(x^a*y^b));

II.- FUNCIONS DEFINIDES PEL PROGRAMADOR

1. Definiu una funció la qual, donat un nombre, calcule el seu cub i li reste la seua arrel quadrada. Obteniu valors d'eixa funció per a distints valors de x com s'indica:

a)Valors numèrics de x: De -5 fins a 5 en intervals de 0.5

b)Valors simbòlics de x: Potències de **t** des de -5 fins a 5 d'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. Definiu les següents funcions. Una vegada definida cadascuna d'elles, verifiqueu que el MA les reconeix com a funcions donant valors a la variable (per exemple: y(a), y(π/2), y(0.05) ....). Poden donar-se com a valors de les variables llistes de valors?

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

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

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

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

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

3. Construïu una funció "deltaY" que calcule l'increment de la funció $x^2\sin(x^2)$ quan x s'incremente en una quantitat variable "h". Obteniu el valor de la funció deltaY per a x=5. i h=2.

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

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

a) Suposem que una reacció produeix una variació de la concentració de protons la qual variació respecte al temps s'ha pogut amidar. Obtenir expressions per al pH en funció de **t** per els cassos següents:

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

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

b) Obtenir les mateixes expressions per als mateixos casos si A=0

c) [PROBLEMA AVANÇAT] Obtenir una expressió per a la diferència de pH en funció de **t** entre els casos b.1 i b.2 (és a dir, per a A=0) suposant que els B són iguals

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

5. Definir una funció de x amb l'expressió

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

a on "a", "b" i "x_0" són paràmetres.

a) Obtenir les expressions de f(x) per $x=x_0$, $x=x_0+b$, $x=x_0-b$, $x=x_0-a/b$, $x=x_0+2*b$

b) Obtenir les expressions de f(x) per a x substituida per x_0+x i per 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.- EQUACIONS I SISTEMES D'EQUACIONS

1. Trobar el valor de x en el qual dues expressions s'igualen: per exemple
   a) (7x+3) i (x-9)
   b) (7-5(x+8)) i (x-1/4 x+3/5 x)

2. Trobeu el valor de x en aquestes equacions
   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. Trobar el punt (o punts) on es creuen la paràbola "y = 6x^2 -5x+3" i la recta y=9x+1/5. **NOTA:** La solució dóna dos valors de x.

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

4. El problema de dalt pot plantejar-se de forma abstracta: Trobar els valors de x dels punts de creuament entre una paràbola "y = a x^2 + b x + c" i una recta "y = m x + n".
   Si nomenem x1 i x2 a aquests valors, trobar expressions per a la suma x1+x2, per a la diferència x1-x2, per al producte x1*x2 i per al quocient x1/x2.

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

5. Obtenir de forma general els valors de x per al creuament entre una paràbola "y = a x^2 + b x + c" i altra paràbola "y = p x^2 + q x + r"
   Nomenarem x1 i x2 a aquests valors; trobar expressions per a la suma x1+x2, per a la diferència x1-x2, per al producte x1*x2 i per al quocient x1/x2.

6. Resol les següents equacions (independentment una d'altra) i verifica que els resultats són correctes:

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)	$\frac{a}{x}+\frac{b}{x}+\frac{c}{x}=1$

(Compareu els resultats corresponents als casos “d)” i “e)”)

7. La norma DIN per als plecs de paper, significa que quan es doblega la fulla per el costat més llarg, la fulla xicoteta obtinguda, guarda entre els seus costats llarg i curt la mateixa proporció que guardaven els costats llarg i curt de la fulla gran. Així, per exemple, donats un foli DIN A4 i una quartilla DIN A5, el costat llarg del foli “F” és al seu costat curt “f” com el costat llarg de la quartilla “C” és al seu costat curt “c”; **Noteu** que “C” = “f” i a més a més l’àrea de la fulla xicoteta és la meitat de l’àrea de la fulla gran. Establir quina és la relació constant costat_llarg/costat_curt de la norma DIN.

Res.: 2^(1/2);

8. Suposem que el costat llarg de la fulla DIN A4 siga 29.5 cm. Quina és la longitud del costat curt del foli DIN A4 el qual és també el costat llarg de la quartilla DIN A5?

Res.: 20.86 cm (Pot verificar-set fàcilment si es disposa d’un “foli” DIN A4 i un regle... i el fabricant ha respectat la norma).

9. Per a depurar unes aigües es requereix una superfície de depuració de 500 m^2. Es vol fer amb depuradors circulars.
Obtenir el radi o els radis segons els casos i les superfícies respectives.
a) Un sol depurador circular
b) Dos depuradors circulars d'igual àrea
c) Dos depuradors circulars, un de doble àrea que l'altre.
d) Tres depuradors circulars d'àrea S1 i dos d'àrea S2, sent S1 tres vegades major 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. Cerquem ara la solució general del problema anterior: Direm S a la superfície total.

Obtenir expressions per al radi o els radis segons els casos i les superfícies respectives per als següents casos:

a) n depuradors circulars iguals.

b) n depuradors circulars d'àrea S1 i m depuradors circulars d'àrea S2, sent S1 p vegades major que S2.

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

IV.- DERIVACIÓ

1. Calculeu les derivades primera, segona i tercera de $F = \frac{\sqrt{x+3}}{x^3}$.

2. El mateix per a de $h = x^3 + 2$.

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

3. El mateix per a $h = \sqrt{\frac{x^3+1}{\sqrt{x}}}$. Obteniu el valor de la funció i llurs derivades per a x=1.

Res.: Per a x=1, h i llurs tres primeres derivades valen [1.414, .7071, 1.237, -1.856];

4. Calcular els màxims i mínims de la funció y= (x-3)(x+2)(x-π)

Res.: Un màxim en x= -.3102; Un mínim en x= 3.071

(NOTA: Hi ha més exemples d'exercicis de màxims i mínims més a baix en aquesta secció IV)

5. Determineu els punts crítics de la funció $y = 3x^4 + 4x^3 - 12x^2 + 12$

Res.: punts singulars en x=1; x=-2; x=0 (mín, mín, màx, respectivament).

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

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

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

8. Calcular y'(x) sabent que $e^x \sin y + e^y \sin x = 1$

9. Calculeu el desenvolupament en forma de polinomi de Taylor fins a l'ordre 10 de la funció: ln(1+x)

a) al voltant del punt x=0 (desenvolupament de Taylor-McLaurin).

b) al voltant del punt x=1.

10. Feu el mateix per a la funció sin(x)*cos(x).

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

11. Compareu la superfície de l'esfera de radi **r** amb la "velocitat" a la que augmenta o minva el volum (dV/dr) al variar **r**. Fer el mateix per a la superfície de l'esfera i la longitud d'un cercle màxim.

12. La distància entre el punt (x,y) i altre punt de referència (x_0,y_0) ve donada per $r = \sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}$.

a) Obtenir la derivada de r respecte de x, i respecte de y .

b) Obtenir les derivades segones respecte de x, de y i de x,y

13. La distància entre el punt (x,y,z) i altre punt de referència (x_0,y_0,z_0) ve donada per $r = \sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2}$

a) Obtenir les derivades de r respecte de x, de y, i de z

b) Obtenir el diferencial total de r

NOTA: Per a obtenir el diferencial total correcte cal declarar "constants" les coordenades de l'origen (x_0,y_0,z_0).

14. La funció $y=x^x$, sent x > 0, té un mínim. Donar el valor de x i el de la funció en el mínim.
(NOTA; la mateixa funció sense restriccions en el signe de x pot estudiar-se usant les funcions "realpart( )" i "imagpart( )" , ja que per a x<0 es tracta d'una funció complexa.

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

15. La funció $y=x^{1/x}$, sent x > 0, té un màxim. Donar el valor de x i el de la funció en el mínim.

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

16. a) La funció $y = x^{\ln(x)}$ (sent x>0) té un mínim; en quin valor de x?

b) Determineu igualment la posició del mínim par a la funció $x^{\ln(a\,x)}$ sent x>0 i sent "a" una constant positiva.

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

17. La funció $x^{(\ln(2x)/x)}$ sent x>0, té un mínim i un màxim. Donar el valor de x i el de la funció en el mínim i en el màxim.

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

V.- INTEGRACIÓ

1. Calculeu les integrals $\int \frac{1}{1+x}\,dx$ i $\int_0^1 \frac{1}{1+x}\,dx$.

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

2. Què ocorre a l'intentar realitzar aquesta integral? $\int_{-1}^{1} \frac{1}{1+x}\, dx$.

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

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

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

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

5. Calculeu les integrals següents les quals apareixen en mecànica quàntica:

$\int_0^{L} x^2 sin^2(k\,x)\, dx$; $\int_0^{L} sin^2(k\,x)\, dx$

Pot desenvolupar-se més aquest problema substituint el valor de $\boldsymbol{k}$ pel seu valor $k = \frac{n\,\pi}{L}$ on **n** és un nombre sencer. $\boldsymbol{L}$ és una constant major que zero.

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

6. Resol les integrals:

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. Resol les integrals

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

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

8. Resol les integrals:

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

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

1. Programar la suma dels "n" primers nombres sencers usant un bucle "for". **NOTA**: Començar amb n=50. Una vegada programat, canviant el valor de "n" es podran obtenir altres sumes.

Res.: Per a n=50, sum=1275

2. Programar les sumes de "n" nombres consecutius de la sèrie descendent 1/100 + 1/99 + 1/98 +

Res.: Per a n=50, sum=0.708172

3. Programar la mateixa suma que en l'exercici anterior (1/100+1/99+1/98+... però ara el càlcul cal que es detinga quan la suma siga major o igual a una quantitat llindar o "cota".
   Sabries modificar el programa per a que "compte" quants elements ha sumat quan assoleix el valor llindar?

Res.: Per a llindar=0.75, sum=0.770690, 47 elements sumats.

4. Programar usant el bucle "for" la suma simbòlica $\frac{1}{a}+\frac{1}{a^2}+\frac{1}{a^3}+\cdots+\frac{1}{a^n}$ de manera que el resultat siga la fracció suma. **NOTA:** començar amb n=5. Una vegada programat, canviant "**n**" i repetint l'execució, se podran obtenir diferents sumes.

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

VII.- PROBLEMES APLICATS

1. Per a una Reacció Química (R.Q.) en equilibri es compleix la relació entre l'increment de potencial de Gibbs molar de la reacció, ΔG^o , i la constant d'equilibri termodinàmic K:

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

on R és la constant universal dels gasos.

a) Obtenir una funció K_eq(x) que ens done el valor numèric de K conegut ΔG^o per a T=298,15 K

b) Obtenir una taula de valors de K per a ΔG^o entre -50 kJ/mol i 50 kJ/mol de 10 en 10 unitats.

AJUDES: Fer el càlcul sense usar unitats en les expressions però tenint en compte que:

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

No hi ha que confondre les unitats de temperatura K (Kelvin) amb la constant d'equilibri K que volem calcular.

"log(x)" correspon a logaritmes naturals o neperians.

Res.: Per a ΔG^o = -50, ... 10 , 0, 10...., 50 ; K = 5.7501*10^8, ... , 56.49, 1, 0.0177, ...,1.7391*10^-9

2. Per a la R.Q. en fase gasosa $Cl_2 + 2\ NO_2 = 2\ ClNO_2$, es disposa de la dada

ΔG^o = 6.2 * (kJ/mol) (298,15 K, 1 atm)

a) Quin és el valor de Kp a aquesta temperatura?

b) Formular les pressions parcials en l'equilibri per a valors inicials de pCl2_0, pNO2_0, i pClNO2_0 donats.

c) Obtenir les pressions en l'equilibri per a les condicions inicials...

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 ΔG^o per a la R.Q. en fase gasosa $Br_2 + 2\ NO = 2\ BrNO$ és

ΔG^o = -10.4 * (kJ/mol) (298,15 K, 1 atm)

a) Quin és el valor de Kp a aquesta temperatura?

b) Formular les pressions parcials en l'equilibri per a valors inicials de pBr2_0, pNO_0, y pBrNO_0 donats

c) Obtenir les pressions en l'equilibri per a les condicions inicials

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. Per a la R.Q. en fase gasosa NO + NO2 + H2O = 2 HNO2 Kp= 1.56 atm^-1 (293 K, 1 atm)

a) Quin és el valor d'ΔGº ?
b) Formular les pressions parcials en l'equilibri per a uns valors inicials pNO_0, pNO2_0, pH2O_0 y pHNO2_0 donats
c) Obtenir les pressions en l'equilibri per a les condicions inicials
   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) ΔGº = -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. Es vol tallar un filferro de 60 metres en dues peces. Una d'elles es doblegarà per a formar un triangle equilàter. L'altra es doblegarà per a formar un quadrat. Es vol saber les longituds dels costats del triangle i el quadrat que permeten obtenir un àrea mínima.

Res.: Costat del triangle: 11.30 m ; Costat del quadrat: 6.52 m.