

Informàtica Aplicada a la Química

Espectre d'emissió de l'àtom d'Hidrogen

En 1885, Balmer va descobrir, de forma empírica, una llei matemàtica a la que s'ajusten les longituds d'onda de las distintes línies espectrals corresponents a l'espectre d'emissió de l'àtom d'hidrogen:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad R = 109677,6 \text{ cm}^{-1}$$

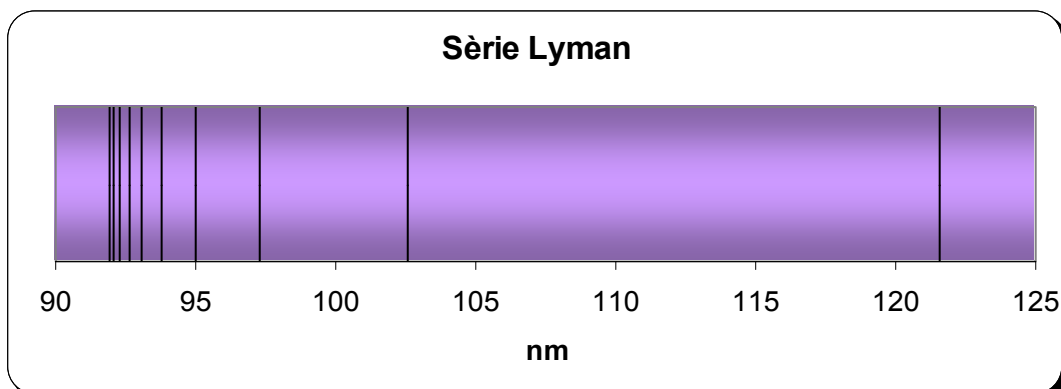
On:

- ν representa el nombre d'ones. S'expressa en cm^{-1} .
- λ representa la longitud d'onda. L'expressem en nm. ($1 \text{ cm} = 10^7 \text{ nm}$).
- R es la constant de *Rydberg*: $109677,6 \text{ cm}^{-1}$.
- $n_1 = 1, 2, 3, \dots$ etc. ($n_1 = 1$, per a totes las línies de la sèrie Lyman; $n_1 = 2$, per a totes las línies de la sèrie Balmer; $n_1 = 3$, per a la sèrie Paschen).
- $n_2 = n_1 + 1$, per a la primera línia de cada sèrie; $n_1 + i$, para la i-èsima línia de cada sèrie.

a) Calcula les deu primeres línies de la sèrie Lyman, corresponents a las deu primeres transicions des d'una òrbita excitada fins la primera; les deu primeres línies de la sèrie Balmer i las corresponents a la sèrie Paschen. Presta cura especial al format. Cal fer un quadre com el següent.

| i | n ₁ | n ₂ | ν (cm ⁻¹) | λ (nm) | |
|---|----------------|----------------|-----------------------|--------|---------|
| | | | | | UV |
| | | | | | Visible |
| | | | | | IR |

b) Representa l'espectre d'emissió de l'àtom d'hidrogen per a la sèrie Lyman. Amb aquesta finalitat, crea una nova columna en la qual introduiràs una intensitat constant unitat para totes las transicions. Si fas una representació de dispersió XY en la que representes la intensitat en front de λ , inclous barres d'error en la Y, elimines els punts i adaptes el format de manera convenient, obtindràs un gràfic com el següent:



| | |
|-------------------|--------|
| <i>Infrarroig</i> | > 1000 |
| <i>Roig</i> | 700 |
| <i>Groc</i> | 580 |
| <i>Blau</i> | 470 |
| <i>UV</i> | < 300 |

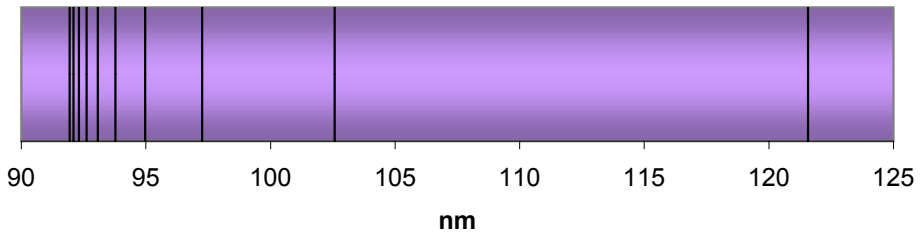
$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad R = 109677,6 \text{ cm}^{-1}$$

$n_2 = n_1 + 1$
Sèrie Lyman : $n_1 = 1$
Sèrie Balmer : $n_1 = 2$
Sèrie Paschen : $n_1 = 3$

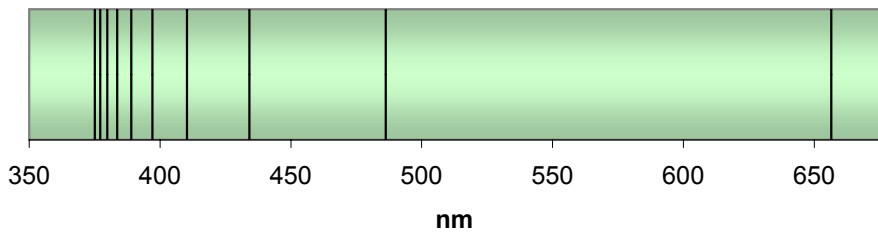
| | |
|----------|----------|
| Rydberg= | 109677,6 |
| cm -> nm | 1,E+07 |

| Intensitat | i | n_1 | n_2 | $\nu \text{ (cm}^{-1}\text{)}$ | $\lambda \text{ (nm)}$ | | |
|------------|----|-------|-------|--------------------------------|------------------------|------------------|---------|
| 1 | 1 | 1 | 2 | 82258,2 | 121,57 | Ultravioleta | Lyman |
| 1 | 2 | 1 | 3 | 97491,2 | 102,57 | | |
| 1 | 3 | 1 | 4 | 102822,8 | 97,25 | | |
| 1 | 4 | 1 | 5 | 105290,5 | 94,98 | | |
| 1 | 5 | 1 | 6 | 106631,0 | 93,78 | | |
| 1 | 6 | 1 | 7 | 107439,3 | 93,08 | | |
| 1 | 7 | 1 | 8 | 107963,9 | 92,62 | | |
| 1 | 8 | 1 | 9 | 108323,6 | 92,32 | | |
| 1 | 9 | 1 | 10 | 108580,8 | 92,10 | | |
| 1 | 10 | 1 | 11 | 108771,2 | 91,94 | | |
| 1 | 1 | 2 | 3 | 15233,0 | 656,47 | Visible | Balmer |
| 1 | 2 | 2 | 4 | 20564,6 | 486,27 | | |
| 1 | 3 | 2 | 5 | 23032,3 | 434,17 | | |
| 1 | 4 | 2 | 6 | 24372,8 | 410,29 | | |
| 1 | 5 | 2 | 7 | 25181,1 | 397,12 | | |
| 1 | 6 | 2 | 8 | 25705,7 | 389,02 | | |
| 1 | 7 | 2 | 9 | 26065,4 | 383,65 | | |
| 1 | 8 | 2 | 10 | 26322,6 | 379,90 | | |
| 1 | 9 | 2 | 11 | 26513,0 | 377,17 | | |
| 1 | 10 | 2 | 12 | 26657,8 | 375,13 | | |
| 1 | 1 | 3 | 4 | 5331,6 | 1875,63 | Infraroig pròxim | Paschen |
| 1 | 2 | 3 | 5 | 7799,3 | 1282,17 | | |
| 1 | 3 | 3 | 6 | 9139,8 | 1094,12 | | |
| 1 | 4 | 3 | 7 | 9948,1 | 1005,22 | | |
| 1 | 5 | 3 | 8 | 10472,7 | 954,86 | | |
| 1 | 6 | 3 | 9 | 10832,4 | 923,16 | | |
| 1 | 7 | 3 | 10 | 11089,6 | 901,74 | | |
| 1 | 8 | 3 | 11 | 11280,0 | 886,53 | | |
| 1 | 9 | 3 | 12 | 11424,8 | 875,29 | | |
| 1 | 10 | 3 | 13 | 11537,4 | 866,74 | | |

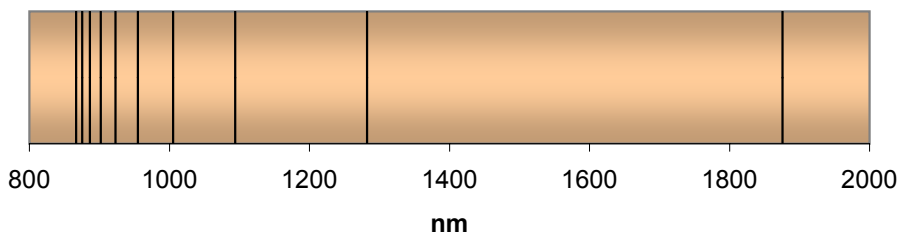
Série Lyman



Série Balmer



Série Paschen



Informàtica Aplicada a la Química.

El mètode de la Bisecció

De vegades el mètode de Newton-Raphson pot ser lent en convergir i fins i tot pot divergir (per exemple si la solució es troba en les propietats d'un punt d'inflexió). Una possible alternativa al mètode de Newton és l'anomenat mètode de la bisecció. El mètode de la bisecció fa ús del teorema de Bolzano per a funcions contínues (si $f(x_a) < 0$, $f(x_b) > 0$, hi ha x_o ($x_a < x_o < x_b$) tal que $f(x_o) = 0$).

El *modus operandi* és el següent: a partir de la gràfica de la funció triem les ordenades (x_a , x_b) a l'esquerra i dreta del punt de tall de la corba amb l'eix horitzontal. Calculem $x_m = (x_a + x_b)/2$ i $f(x_m)$.

Si $f(x_m) < 0$ diem $x_a(1) = x_m$, $x_b(1) = x_b$.

Si $f(x_m) > 0$ diem $x_b(1) = x_m$, $x_a(1) = x_a$.

Repetim el procediment a partir de $x_a(1)$ i $x_b(1)$ fins a la iteració i -èsima en la qual $|x_a(i) - x_b(i)| < \varepsilon$, on ε és un valor acceptable d'imprecissió. Aleshores finalitzem el procés amb $x_f = (x_a(i) + x_b(i))/2 \pm |x_a(i) - x_b(i)|/2$.

Com un exercici, i fent ús d'una fulla de càlcul, trobeu la solució amb sentit físic del polinomi:

$$P(x) = 4 * x^3 + (4 * (P_c + P_d) - K_e) * x^2 + (4 * P_d * P_c + P_d^2 + K_e * (P_a + P_b)) * x + (P_c * P_d^2 - K_e * P_a * P_b)$$

corresponent a l'equilibri químic proposat en la practica V de la guia "Informàtica aplicada a la química", Publicacions de la Universitat Jaume I, col·lecció Universitas, ISBN 84-8021-387-6. Considereu, com allí, els valors inicials de les pressions parcials: $p_a = 1$, $p_b = 2$, $p_c = 1$, $p_d = 0$ i la constant d'equilibri $K_e = 1$.

CÀLCUL DE LA PRESSIÓ FINAL

(bisecció)

REACCIÓ: $A + B = C + 2D$

$$K_e = \frac{(P_c \cdot P_d^2)}{(P_a \cdot P_b)} \text{ (Atm.)}$$

POLINOMI: $4 \cdot X^3 + (4 \cdot (P_c + P_d) - K_e) \cdot X^2 + (4 \cdot P_d \cdot P_c + P_d^2 + K_e \cdot (P_a + P_b)) \cdot X + (P_c \cdot P_d^2 - K_e \cdot P_a \cdot P_b)$

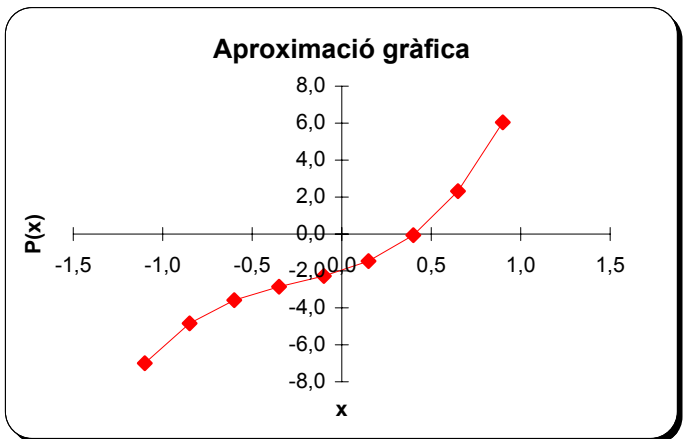
CONDICIONS INICIALS

| Pa | Pb | Pc | Pd | Ke |
|----|----|----|----|----|
| 1 | 2 | 1 | 0 | 1 |

P(TOTAL)
4,4583

d **0,25**

| x | P(x) |
|--------|--------|
| -1,100 | -6,994 |
| -0,850 | -4,839 |
| -0,600 | -3,584 |
| -0,350 | -2,854 |
| -0,100 | -2,274 |
| 0,150 | -1,469 |
| 0,400 | -0,064 |
| 0,650 | 2,316 |
| 0,900 | 6,046 |



| xe | xd | x | f(xe) | f(xd) | f(x) |
|--------|--------|--------|---------|--------|---------|
| 0,0000 | 0,5000 | 0,2500 | -2,0000 | 0,7500 | -1,0000 |
| 0,2500 | 0,5000 | 0,3750 | -1,0000 | 0,7500 | -0,2422 |
| 0,3750 | 0,5000 | 0,4375 | -0,2422 | 0,7500 | 0,2217 |
| 0,5000 | 0,4375 | 0,4688 | 0,7500 | 0,2217 | 0,4774 |
| 0,4375 | 0,4688 | 0,4531 | 0,2217 | 0,4774 | 0,3475 |
| 0,4688 | 0,4531 | 0,4609 | 0,4774 | 0,3475 | 0,4119 |
| 0,4531 | 0,4609 | 0,4570 | 0,3475 | 0,4119 | 0,3796 |
| 0,4609 | 0,4570 | 0,4590 | 0,4119 | 0,3796 | 0,3957 |
| 0,4570 | 0,4590 | 0,4580 | 0,3796 | 0,3957 | 0,3876 |
| 0,4590 | 0,4580 | 0,4585 | 0,3957 | 0,3876 | 0,3917 |
| 0,4580 | 0,4585 | 0,4583 | 0,3876 | 0,3917 | 0,3897 |
| 0,4585 | 0,4583 | 0,4584 | 0,3917 | 0,3897 | 0,3907 |
| 0,4583 | 0,4584 | 0,4583 | 0,3897 | 0,3907 | 0,3902 |
| 0,4584 | 0,4583 | 0,4583 | 0,3907 | 0,3902 | 0,3904 |
| 0,4583 | 0,4583 | 0,4583 | 0,3902 | 0,3904 | 0,3903 |
| 0,4583 | 0,4583 | 0,4583 | 0,3904 | 0,3903 | 0,3904 |
| 0,4583 | 0,4583 | 0,4583 | 0,3903 | 0,3904 | 0,3903 |
| 0,4583 | 0,4583 | 0,4583 | 0,3904 | 0,3903 | 0,3903 |
| 0,4583 | 0,4583 | 0,4583 | 0,3903 | 0,3903 | 0,3903 |

Informàtica Aplicada a la Química.

Integració numèrica del treball d'expansió en gasos

En el present exercici cal construir una fulla de càlcul en la que es calcule numèricament, a la temperatura de 298K, el treball d'expansió isoterm d'un mol de gas des d'un volum inicial $v_0 = 1\text{L}$ fins un volum final $v_f = 2\text{L}$ ($w = \int_{v_0}^{v_f} P(v)dv$). Considerarem que el gas està ben descrit per una equació tèrmica ideal ($Pv = RT$), per l'equació de Van der Waals ($(P + \frac{a}{v^2})(v - b) = RT$) i per l'equació de Dietericci ($P = \frac{RT}{v-b} e^{-\frac{a}{RTv}}$). Feu ús dels valors dels paràmetres a i b de la següent taula:

| | a at/(L·mol) | b L/mol |
|------|--------------|---------|
| CO2 | 3,59 | 0,0427 |
| H2 | 0,244 | 0,0266 |
| Èter | 17,4 | 0,1344 |

A l'hora de fer la integració numèrica feu us del mètode dels rectangles:

$$I = h \sum_{i=0}^{i=N-1} f[a + (i + 1/2)h]$$

i també del mètode dels trapecis

$$I = h/2 \left\{ f(a) + 2 \sum_{i=1}^{i=N-1} f[a + ih] + f(b) \right\}$$

i compareu els resultats obtinguts emprant un i altre mètode per a diferents discretitzacions. Finalment representeu en una mateixa gràfica $P(v)$ vs. v corresponent a les tres ecuacions tèrmiques considerades i discutiu la validesa de l'aproximació ideal a les equacions tèrmiques de gasos reals.

Integració del treball en gasos reals

| Algunes Constants per al gasos | | |
|--------------------------------|-----------------|-----------|
| | a (at/(lt mol)) | b(lt/mol) |
| CO2 | 3,59 | 0,0427 |
| H2 | 0,244 | 0,0266 |
| Eter etílic | 17,4 | 0,1344 |

| CAS DE L'ETER ETÍLIC | | | | |
|----------------------|-------|----|--------|--|
| R | 0,082 | hh | 0,1 | |
| T | 298 | a | 17,4 | |
| | | b | 0,1344 | |

$$w_{ideal} = RT \ln \frac{V_2}{V_1}$$

IDEAL
16,9377445

$$w_{VanderWaals} = \int_{V_1}^{V_2} \left(\frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2} \right) dV$$

$$w_{Dieterici} = \int_{V_1}^{V_2} \frac{RT}{V-b} \text{Exp} \left(-\frac{a}{RTV} \right) dV$$

valor mitjà ->

$$I = h \sum_{i=0}^{n-1} f(a + (i + 1/2)h)$$

| x | Dieterici |
|------|-----------|
| 1,05 | 13,5458 |
| 1,15 | 12,9538 |
| 1,25 | 12,3915 |
| 1,35 | 11,8623 |
| 1,45 | 11,3667 |
| 1,55 | 10,9038 |
| 1,65 | 10,4719 |
| 1,75 | 10,0690 |
| 1,85 | 9,6929 |
| 1,95 | 9,3416 |
| | 11,2599 |

$$I = \frac{h}{2} \left[f(a) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(a + ih) + f(b) \right]$$

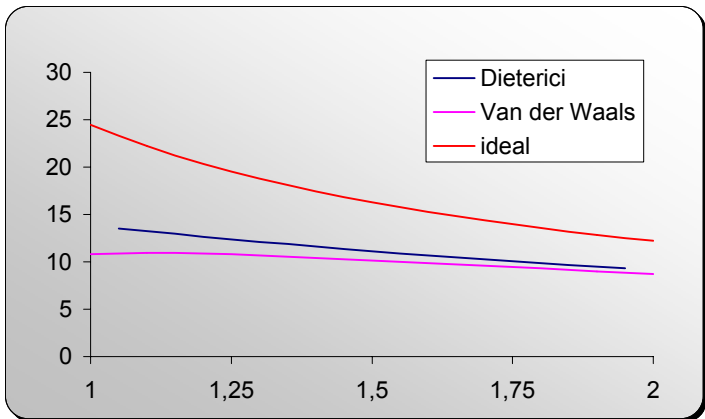
trapeci ->

| x | Van der Waals |
|-----|---------------|
| 1 | 10,830 |
| 1,1 | 10,926 |
| 1,2 | 10,848 |
| 1,3 | 10,668 |
| 1,4 | 10,430 |
| 1,5 | 10,161 |
| 1,6 | 9,876 |
| 1,7 | 9,587 |
| 1,8 | 9,301 |
| 1,9 | 9,020 |
| 2 | 8,748 |
| | 10,061 |

discrepància Dieterici
5,678

discrepància VanderWaals
6,877

| x | ideal |
|-----|---------|
| 1 | 24,4360 |
| 1,1 | 22,2145 |
| 1,2 | 20,3633 |
| 1,3 | 18,7969 |
| 1,4 | 17,4543 |
| 1,5 | 16,2907 |
| 1,6 | 15,2725 |
| 1,7 | 14,3741 |
| 1,8 | 13,5756 |
| 1,9 | 12,8611 |
| 2 | 12,2180 |



Informàtica Aplicada a la Química

El mètode d'integració numèrica de Montecarlo

El mètode de Montecarlo substitueix l'àrea davall d'una funció per la d'un rectangle amb la mateixa base i una alçada calculada mitjançant l'aproximació estadística següent:

Anomenem a i b als límits d'integració, i $f(a)$, $f(b)$ als corresponents valors de la funció. Sense detriment de generalitat supondrem que $f(a) < f(b)$. Aleshores generem una sèrie de nombres aleatoris (en Mathematica els generem amb l'ordre `Random[]`). Concretament, calculem un nombre aleatori $x_r = a + \text{Random}[] * (b - a)$ que pertany a l'interval (a, b) i, tot seguit, un altre $y_r = \text{Random}[] * f(b)$. Calculem també $f(x_r)$ i el comparem y_r . Si $y_r < f(x_r)$ aleshores incrementem amb una unitat un contador m que hem fet inicialment zero. En cas contrari no l'incrementem. Repetim l'operació n vegades. Al final calculem el factor de probabilitat $p = m/n$. A partir d'aquest valor concloem que (estadísticament) el valor mitjà de l'alçada de la funció en l'interval d'integració serà $p * f(b)$, i l'integral serà, aleshores, $\text{Int} = p \cdot f(b) \cdot (b - a)$. (Si $f(a) > f(b)$, aleshores caldrà substituir $f(b)$ per $f(a)$ en tot el raonament i fórmules).

L'imprecisió en el càlcul de l'integral es pot avaluar repetint el proces k vegades: assignem la mitjana de les integrals calculades com proposta de valor de la integral, i estimem la corresponent imprecisió com aproximadament el doble de la desviació quadràtica de la mostra formada per les k integrals calculades.

Aquest mètode no es convenient utilitzar-lo en integrals simples i dobles, on els mètodes tradicionals (trapecis, Simpson, Newton-Cotes, Gauss,) són superiors. Tanmateix, a l'hora de fer integral múltiples (amb quatre o més dimensions) els mètodes tradicionals es tornen molt lents per la gran quantitat de càlculs que ha de realitzar i és aleshores quan el mètode d'integració numèrica de Montecarlo guanya la partida.

Cal dir que s'han fet millores sobre aquest mètode estadístic simple que li donen una major precisió. Podem mencionar el mètode QuasiMonteCarlo (algorisme de Halton-Hammersley-Wozniakowski) que està implementat en el programa Mathematica.

Com un exercici calculeu la capacitat calorífica de l'alumini sòlid a 298K amb la fórmula de Debye (P. Debye, 1912) que no és integrable de forma analítica:

$$C_v = 9 N_A k \frac{1}{x_0^3} \int_0^{x_0} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \quad (1)$$

on:

$$x = (h\nu)/(kT)$$

$$x_0 = T_D/T$$

$N_A = 6.023 \cdot 10^{23}$, número de Avogadro.

$h = 6.626 \cdot 10^{-34} Js$, constant de Planck.

$k = 1.381 \cdot 10^{-23} JK^{-1}$, constant de Boltzmann.

T : temperatura absoluta.

T_D : temperatura de Debye. (Per a l'alumini $T_D = 398K$)


```

ClearAll["Global`*"];
<<Statistics`DescriptiveStatistics`

(* Introducció de dades: Temperatura absoluta (K) := ta ; Temperatura Debye (K) := td *)
ta = 298; td = 398;

Print["La temperatura absoluta és ", ta, " K, La temperatura Debye ", td, " K"];

(* límits integració (a,b) i n= nombre de punts *)
a = 10^-50; (* el valor a=0 pot donar lloc a indeterminacions *)
b = td/ta;
n = 100;

(* Constants *)
av = 6.023*10^23; boltz = 1.381*10^(-23); coe = 9*av*boltz/(b^3);

(* Mètode de Monte Carlo *)
y0 = ((a^4)*Exp[a])/(Exp[a]-1)^2;
yf = ((b^4)*Exp[b])/(Exp[b]-1)^2;
y0 = Max[{y0, yf}];
cont = 0;
np = n*100;
For[i = 1, i <= np, i++,
  x = Random[]*(b-a)+a;
  y = Random[]*y0;
  yx = ((x^4)*Exp[x])/(Exp[x]-1)^2;
  If[yx >= y, cont = cont+1]; ];
int = cont/np*y0*(b-a);
Print["La capacitat calorífica avaluada amb el Mètode de Monte Carlo: ", N[int*coe, 6]];

La temperatura absoluta és 298 K, La temperatura Debye 398 K

La capacitat calorífica avaluada amb el Mètode de Monte Carlo: 23.0637

(* amb cota d'error *)
llista = {};
For[j = 1, j <= 50, j++,
  y0 = ((a^4)*Exp[a])/(Exp[a]-1)^2;
  yf = ((b^4)*Exp[b])/(Exp[b]-1)^2;
  y0 = Max[{y0, yf}];
  cont = 0;
  np = n*15;
  For[i = 1, i <= np, i++,
    x = Random[]*(b-a)+a;
    y = Random[]*y0;
    yx = ((x^4)*Exp[x])/(Exp[x]-1)^2;
    If[yx >= y, cont = cont+1]; ];
  int = cont/np*y0*(b-a)//N;
  llista = AppendTo[llista, int];
int = Mean[llista];
er = 2*StandardDeviation[llista];
Print["La capacitat calorífica avaluada amb el Mètode de Monte Carlo: ",
  N[int*coe, 4], " +/- ", N[er, 1]];

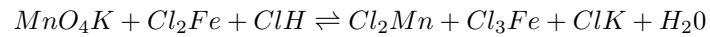
La capacitat calorífica avaluada amb el Mètode de Monte Carlo: 22.95 +/- 0.05

```

Informàtica Aplicada a la Química.

Ajust de raccions amb "Solve"

Ajusteu la reacció:



Amb aquesta finalitat plantejeu un sistema de 7 equacions de balanç de matèria per als 7 elements que intervenen en la reacció i ressoleu el sistema amb l'ordre Solve de Mathematica.

Solució:

(* $MnO_4K + Cl_2Fe + ClH \rightarrow Cl_2Mn + Cl_3Fe + ClK + H_2O$ *)

```
ClearAll["Global`*"];
```

```
Off[General::spell, General::spell1];
```

```
mno4k=1;
```

```
Solve[{ mno4k== cl2mn,
```

```
mno4k==clk,
```

```
4 mno4k==h20,
```

```
cl2fe==cl3fe,
```

```
clh==2 h20,
```

```
clh+2 cl2fe==2cl2mn+3cl3fe+clk }, {cl2fe,clh,cl2mn,cl3fe,clk,h20 }]
```

```
{ { cl2fe -> 5, clh -> 8, cl2mn -> 1, cl3fe -> 5, clk -> 1, h20 -> 4 } }
```

Informàtica Aplicada a la Química.

Capacitat d'absorció de calor d'un gram d'aigua, inicialment sòlid a -50°C , variant la seua temperatura

Les següents dades experimentals es refereixen a la capacitat calorífica de l'aigua:

| aigua sòlida | | aigua líquida | |
|--------------|-------------------|---------------|-------------------|
| T(K) | c_p (cal /gr K) | T(K) | c_p (cal /gr K) |
| 270,8 | 0,5018 | 273 | 1,00738 |
| 268,1 | 0,4932 | 293 | 0,99883 |
| 262 | 0,4861 | 313 | 0,99804 |
| 252,2 | 0,4668 | 333 | 0,99943 |
| 242,4 | 0,4488 | 353 | 1,00229 |
| 234,7 | 0,4346 | 383 | 1,00697 |

Per a l'aigua gas tenim que $c_p = a + bT + dT^2$ (cal/mol K), on $a = 7.256$, $b = 0.002298$ i $d = 0.000000283$. Els calors de fusió i vaporització de l'aigua són 79.78 i 539.55 cal/gr a les temperatures de 273K i 373K, respectivament.

Amb una fulla de càlcul ajusteu c_p de l'aigua sòlida a un polinomi. Feu el mateix amb la capacitat calorífica de aigua líquida. Una vegada expressada la capacitat calorífica de l'aigua per un polinomi (en realitat tres polinomis, un per cada estat d'agregació) i sabent els calors de fusió i vaporització, calculeu el calor (en calories) que absorbeix un gram d'aigua, inicialment sòlid a -50°C , fins a aplegar als 200°C en estat de vapor. Representeu una gràfica $Q(T)$ (el calor que absorbeix el gram d'aigua vs. l'augment de temperatura) i un altra $T(Q)$ (on ara el calor està en ordenades). Discutiu i justifiqueu la potencia refrigerant de l'aigua en els diferents rangs de temperatura.

Nota: Cal adonar-se que els polinomis que ajusteu són molt sensibles a la precissió dels quoficients que heu obtingut. Adoneu-vos que heu d'obtenir resultats similars si feu ús dels valors mitjans de les capacitats calorífiques de l'aigua sòlida i líquida.

Capacitat d'absorció de calor d'un gram d'aigua sòlida, inicialment a -50°C, variant la seua temperatura

Capacitats calorífiques cp d'aigua sòlida

| T(K) | cp (cal /gr K) |
|-------|----------------|
| 270,8 | 0,5018 |
| 268,1 | 0,4932 |
| 262 | 0,4861 |
| 252,2 | 0,4668 |
| 242,4 | 0,4488 |
| 234,7 | 0,4346 |

Capacitats calorífiques cp d'aigua líquida

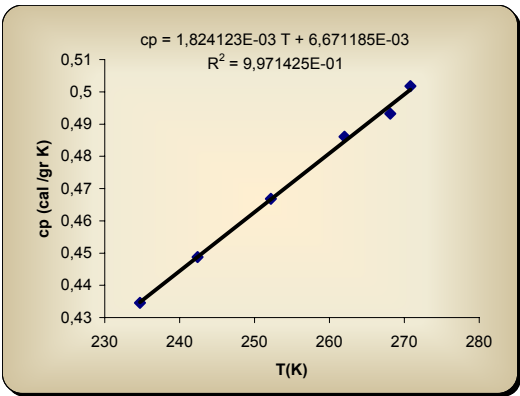
| T(K) | cp (cal /gr K) |
|------|----------------|
| 273 | 1,00738 |
| 293 | 0,99883 |
| 313 | 0,99804 |
| 333 | 0,99943 |
| 353 | 1,00229 |
| 383 | 1,00697 |

Capacitat calorífica cp de l'aigua gas : $cp = a + b T + d T^2$ (cal/mol K)

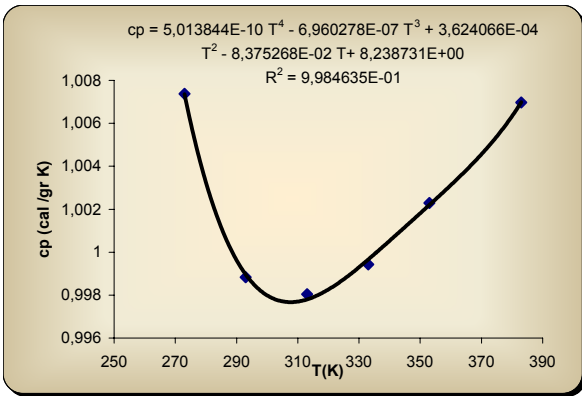
| | a | b | d |
|----------|------------|-------------|------------|
| PER MOL | 7,256 | 2,30E-03 | 2,83E-07 |
| PER GRAM | 0,40311111 | 0,000127667 | 1,5722E-08 |

| | |
|----|---------------|
| Lf | 79,78 cal/gr |
| Lv | 539,55 cal/gr |

Ajust de la cp d'aigua sòlida



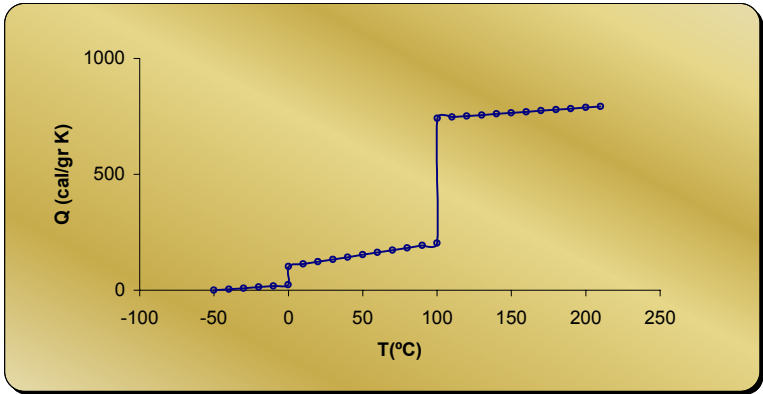
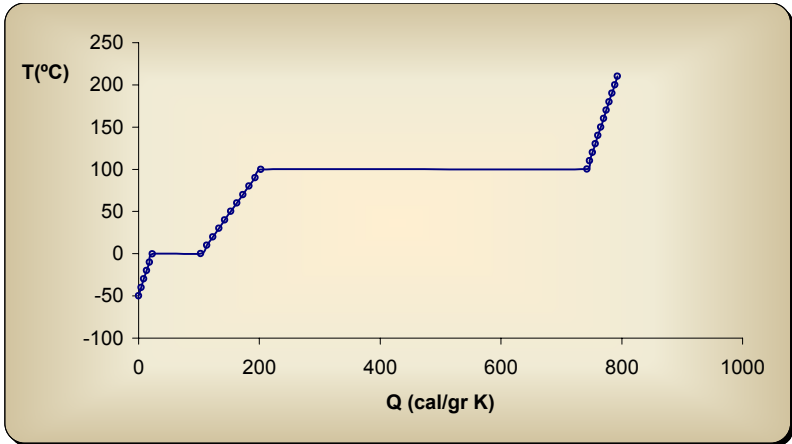
Ajust de la cp d'aigua líquida



Temperatura inicial de l'aigua -50°C

| | |
|------|-----|
| T0 = | 223 |
|------|-----|

| t(°C) | T(K) | Q (cal/gr K) |
|-------|-------|--------------|
| -50 | 223 | 0,0 |
| -40 | 233 | 4,2 |
| -30 | 243 | 8,6 |
| -20 | 253 | 13,2 |
| -10 | 263 | 18,0 |
| -0,1 | 272,9 | 22,9 |
| 0,1 | 273,1 | 102,8 |
| 10 | 283 | 112,8 |
| 20 | 293 | 122,8 |
| 30 | 303 | 132,8 |
| 40 | 313 | 142,7 |
| 50 | 323 | 152,7 |
| 60 | 333 | 162,7 |
| 70 | 343 | 172,7 |
| 80 | 353 | 182,7 |
| 90 | 363 | 192,8 |
| 99,9 | 372,9 | 202,7 |
| 100,1 | 373,1 | 742,4 |
| 110 | 383 | 746,9 |
| 120 | 393 | 751,4 |
| 130 | 403 | 756,0 |
| 140 | 413 | 760,6 |
| 150 | 423 | 765,2 |
| 160 | 433 | 769,8 |
| 170 | 443 | 774,4 |
| 180 | 453 | 779,0 |
| 190 | 463 | 783,7 |
| 200 | 473 | 788,3 |
| 210 | 483 | 793,0 |

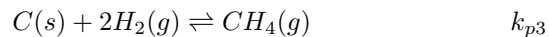
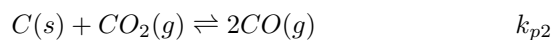
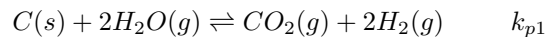


Informàtica Aplicada a la Química.

Equilibris simultanis: cremant carbó amb vapor d'aigua a altes temperatures

Considerem que afegim un excés de carbó (grafit) dins d'un cilindre tancat amb un èmbol on hi ha 1 mol de vapor d'aigua a la temperatura $T = 1000\text{K}$. El cilindre està dins d'un bany isoterm, de manera que, malgrat el calor de reacció, la temperatura es manté constant. L'èmbol és mòbil i ens permet fixar la pressió total a $P = 1$ at. A 1000K les constants K_p dels equilibris anteriors són $k_{p1} = 3.31$, $k_{p2} = 1.7$ i $k_{p3} = 0.093$, respectivament. Calculeu les pressions parcials de tots els gasos en l'equilibri. Considereu comportament ideal.

La reacció química és un conjunt de tres processos succesius. Les equacions químiques són:

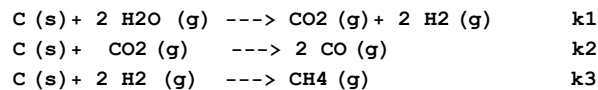


Aquest és un típic problema d' n equacions amb n incògnites que pot ser resolt amb l'ordre *NSolve* de Mathematica, una vegada establertes les equacions. És recomanable (perquè simplifica l'àlgebra) expressar els mols dels diferents compostos en funció dels graus d'avanç e_1 , e_2 i e_3 de les diferents equacions.

Malgrat que les dades que tenim són de K_p , escrivim les pressions parcials en funció de la pressió total i els nombres de mols, perquè al llarg de la reacció por haver variació de volum, de manera que el canvi de les pressions parcials no només deriva de la variació de mols. També es pot originar pels canvis de volum que cal fer per fixar la pressió a 1 at. Sobre aquests canvis de volum l'enunciat no ens dona dades.

A l'hora de triar la solució del problema és clar, a partir del enunciat, que e_1 , e_2 i e_3 han de ser positius -a l'instant inicial únicament introduïm els reactius de la primera reacció de la cadena. Aò ens farà rebutjar d'entrada les solucions amb graus d'avanç negatius. També caldrà rebutjar les solucions que suposen pressions parcials negatives. Al remat sols una de les solucions matemàtiques ha de tenir sentit químic.

(* Equilibris simultanis: cremant carbó amb vapor d'aigua a altes temperatures



Aquest és un típic problema de n equacions amb n incognites que pot ser resolt amb l'ordre NSolve de Mathematica, una vegada establertes les equacions. És recomanable (perquè simplifica l'àlgebra) expressar els mols dels diferents compostos en funció dels graus d'avanç e1, e2 i e3 de les diferents equacions *)

```
ClearAll["Global`*"];
```

```
k1 = 3.31; k2 = 1.7; k3 = 0.093;
```

```
nH2O = (1 - 2 e1) ; nCO2 = (e1 - e2) ; nH2 = 2 (e1 - e3) ; nCO = 2 e2 ; nCH4 = e3 ; nTOT = 1 + e1 + e2 - e3;
```

(* malgrat que les dades que tenim són de K_p , escrivim les pressions parcials en funció de la pressió total i els nombres de mols, perquè al llarg de la reacció por haver variació de volum, de manera que el canvi de les pressions parcials no només deriva de la variació de mols. També es pot originar pels canvis de volum que cal fer per fixar la pressió a 1 at. Sobre aquests canvis de volum l'enunciat no ens dona dades *)

```
sol = NSolve[{k1 * nTOT * nH2O^2 == nCO2 * nH2^2,
             k2 * nTOT * nCO2 == nCO^2,
             k3 * nH2^2 == nCH4 * nTOT}, {e1, e2, e3}]
```

```
{{e2 -> -0.971927, e3 -> 0.343996, e1 -> 1.29598}, {e2 -> -0.527408, e3 -> 0.0410068, e1 -> 0.330928}, {e2 -> -0.149461, e3 -> 0.75025, e1 -> 0.105701}, {e2 -> 0.104575, e3 -> 1.05562, e1 -> 0.205642}, {e2 -> 0.308189, e3 -> 0.399621, e3 -> 0.0555668, e1 -> 0.59355}, {e2 -> 0.514954, e3 -> 10.2453, e1 -> 8.80559}}
```

(* A partir del enunciat és clar que e1, e2, e3 han de ser positius -a l'instant inicial únicament introduïm els reactius de la primera reacció de la cadena. Açò ens fa rebutjar d'entrada les quatre primeres solucions. Per esbrinar quina d'entre les 4 restants és la que té sentit químic procedim a calcular quines serien les pressions parcials i a descartar aquelles solucions que donen lloc a pressions negatives *)

```
For [i = 5, i <= 8, i++,
```

```
  e1 = sol[[i, 3, 2]]; e2 = sol[[i, 1, 2]]; e3 = sol[[i, 2, 2]]; n = (1 + e1 + e2 - e3);
```

```
Print["ph2o=", (1 - 2 e1) / n,
```

```
      " pco2= ", (e1 - e2) / n,
```

```
      " ph2= ", 2 (e1 - e3) / n,
```

```
      " pco= ", 2 e2 / n,
```

```
      " pch4= ", e3 / n,
```

```
      " P = ", ((1 - 2 e1) + (e1 - e2) + 2 (e1 - e3) + 2 e2 + e3) / n ]]
```

```
ph2o=2.31235 pco2= 0.396974 ph2= -6.67709 pco= 0.821496 pch4= 4.14627 P =1.
```

```
ph2o=0.0715601 pco2= 0.0762868 ph2= 0.471368 pco= 0.360122 pch4= 0.0206635 P =1.
```

```
ph2o=-0.0965625 pco2= 0.100087 ph2= 0.555308 pco= 0.41249 pch4= 0.0286781 P =1.
```

```
ph2o=-220.719 pco2= 110.161 ph2= -38.2596 pco= 13.6848 pch4= 136.133 P =1.
```

(* únicament la solució sisena té sentit químic: i=6 *)

```
e1 = sol[[6, 3, 2]]; e2 = sol[[6, 1, 2]]; e3 = sol[[6, 2, 2]]; n = (1 + e1 + e2 - e3);
```

```
Print["ph2o=", (1 - 2 e1) / n,
```

```
      " pco2= ", (e1 - e2) / n,
```

```
      " ph2= ", 2 (e1 - e3) / n,
```

```
      " pco= ", 2 e2 / n,
```

```
      " pch4= ", e3 / n,
```

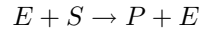
```
      " P = ", ((1 - 2 e1) + (e1 - e2) + 2 (e1 - e3) + 2 e2 + e3) / n ]]
```

```
ph2o=0.0715601, pco2= 0.0762868, ph2= 0.471368, pco= 0.360122, pch4= 0.0206635, P =1.
```

Informàtica Aplicada a la Química.

Ajust lineal i no lineal en catàlisi enzimàtica

El mecanisme de Michaelis-Menten ha estat generalment acceptat per interpretar la cinètica de les reaccions catalitzades per enzims. Si anomenem E a l'enzim, S al substracte i P al producte de la reacció catalitzada, escrivim:



Sembla ser, però, que el mecanisme és una mica més complex:



De manera que la velocitat V de reacció pot ser escrita, d'acord amb aquest mecanisme, en la forma:

$$V = \frac{V_{MAX}[S]}{K_M + [S]}$$

on K_M és l'anomenada constant de Michaelis-Menten i V_{MAX} s la mxima velocitat de reacció (la qual és, per una altra banda, proporcional a la concentració d'enzim).

Com l'equació encontrada no relaciona linealment velocitat i concentraci de substracte, a l'hora de fer ajustos de resultats experimentals aquesta sol ser reescrita en la forma:

$$\frac{1}{V} = \frac{K_M}{V_{MAX}} \frac{1}{[S]} + \frac{1}{V_{MAX}}$$

de manera que ja pot fer-se una representació lineal de $\frac{1}{V}$ vs. $\frac{1}{[S]}$. Tanmateix, aquesta doble representació inversa pot distorsionar les dades experimentals en el sentit de concentrar moltes dades d'inversa de concentració en una petita regió de l'eix de coordenades, prop del valor zero, i deixar poques dades a valors més grans de l'esmentat eix.

Es proposa com exercici que ajusteu en una fulla de càlcul les dades experimentals que venen recollides després mitjançant un ajust lineal i també de manera no lineal (podeu fer ús de l'opció solver d'excel en el segon cas). Determineu en tots dos casos V_{MAX} i K_M , així com el coeficient de correlació. Compareu els resultats que heu ajustat en un i altre ajust.

Dades experimentals:

| [S] | V |
|-----|------|
| 0,1 | 3,33 |
| 0,2 | 5 |
| 0,5 | 7,14 |
| 0,8 | 8 |
| 1 | 8,33 |
| 2 | 9,09 |

Michaelis Menten

| Dades Experimentals | |
|---------------------|------|
| [S] | V |
| 0,1 | 3,33 |
| 0,2 | 5 |
| 0,5 | 7,14 |
| 0,8 | 8 |
| 1 | 8,33 |
| 2 | 9,09 |

Model no lineal

$$V = \frac{V_{MAX} [S]}{K_M + [S]}$$

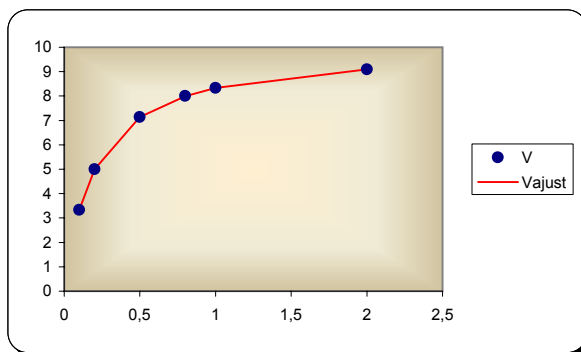
Model lineal

$$\frac{1}{V} = \frac{K_M}{V_{MAX}} \frac{1}{[S]} + \frac{1}{V_{MAX}}$$

AJUST NO LINEAL (SOLVER)

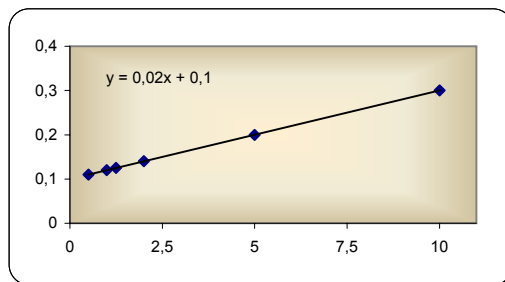
| | |
|------------------|-------|
| V _{MAX} | 10,00 |
| K _M | 0,20 |

| Dades Experimentals | | mod. no lineal | | |
|---------------------|-------|--------------------|----------------|-----------------------------|
| [S] | V | V _{ajust} | Δ ² | D ² _y |
| 0,1 | 3,33 | 3,331639208 | 2,687E-06 | 12,145225 |
| 0,2 | 5 | 4,997989619 | 4,04163E-06 | 25 |
| 0,5 | 7,14 | 7,140960358 | 9,22288E-07 | 50,9796 |
| 0,8 | 8 | 7,998312569 | 2,84742E-06 | 64 |
| 1 | 8,33 | 8,331752619 | 3,07167E-06 | 69,3889 |
| 2 | 9,09 | 9,089623613 | 1,41667E-07 | 82,6281 |
| <V> | 6,815 | SUMA | 1,37117E-05 | 304,141825 |
| | | | R ² | 0,999999955 |



AJUST LINEAL

| Dades Experimentals | | Mod Lineal | | 0,020026966 | 0,09998046 |
|---------------------|------|------------|-------------|------------------|-------------|
| [S] | V | 1/[S] | 1/V | 8,30208E-06 | 3,89126E-05 |
| 0,1 | 3,33 | 10 | 0,3003003 | 0,999999313 | 6,7855E-05 |
| 0,2 | 5 | 5 | 0,2 | 5819103,692 | 4 |
| 0,5 | 7,14 | 2 | 0,140056022 | | |
| 0,8 | 8 | 1,25 | 0,125 | | |
| 1 | 8,33 | 1 | 0,120048019 | V _{MAX} | 10,00 |
| 2 | 9,09 | 0,5 | 0,110011001 | K _M | 0,20 |



Informàtica Aplicada a la Química.

Desintegració radioactiva. Ressolució d'equacions diferencials amb Mathematica

El mecanisme de la reacció de desintegració radioactiva és el següent:



Amb ajuda del Mathematica intergreu el sistema d'equacions de velocitat i representeu en un mateix gràfic les concentracions del productes A, B i C en funció del temps.

Particularitzeu el problema per a les condicions frontera següents:

Valors de les constants de velocitat en $L \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$: $k_1 = 1$, $k_2 = 0.5$.

Concentracions inicials del reactius en mol L^{-1} : $[A] = 1$, $[B] = [C] = 0$.

Limits de temps en el càlcul: $t_{Min} = 0 \text{ s}$, $t_{Max} = 10 \text{ s}$.

(* Desintegració radiactiva

El mecanisme d'aquest model és:



Les equacions de velocitat seran doncs:

$$\begin{array}{l} d[A]/dt = -k_1 [A] \\ d[B]/dt = k_1 [A] - k_2 [B] \\ d[C]/dt = k_2 [B] \end{array} \quad *)$$

ClearAll["Global`*"];Off[General::spell,General::spell1];

(* Valors de les cinc constants de velocitat en unitats L mol⁻¹ s⁻¹.) k1 = 1; k2 = 0.5;

(*Concentrations inicials de A, B i C.*) CA0 = 1.0; CB0 = 0; CC0 = 0;

(*Limits dce temps en el càlcul.*) tMin = 0; tMax = 10;

(* Resolució de les equacions de velocitat *)

solucio = NDSolve[

(*les lleis de velocitat.*)

$$\begin{array}{l} \{CA'[t] == -k_1 CA[t], \\ CB'[t] == k_1 CA[t] - k_2 CB[t], \\ CC'[t] == k_2 CB[t], \end{array}$$

(*Els valors inicial de les concentracions.*)

$$CA[0] == CA0, CB[0] == CB0, CC[0] == CC0\},$$

(*variables dependents, variable independent i rang d'aquesta darrera.*)

$$\{CA, CB, CC\}, \{t, tMin, tMax\},$$

(*Opcions en el càlcul*)

$$\text{MaxSteps} \rightarrow 5000 \];$$

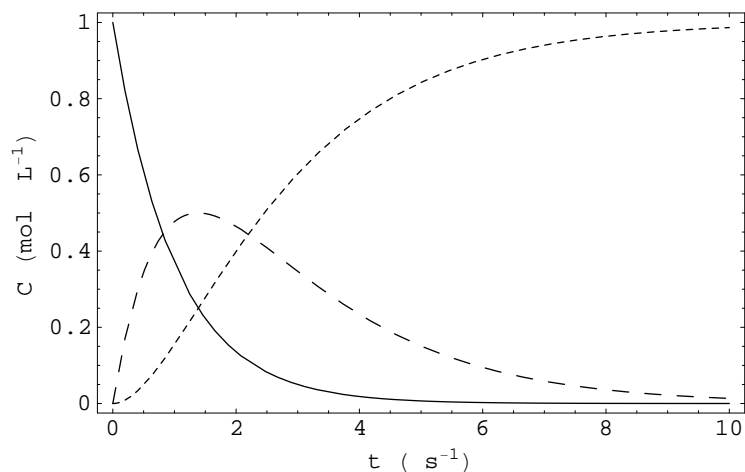
(*Valors de xMin, xMax and yMin per a la gràfica *) xMin = 0; xMax = tMax; yMin = 0;

(*Càlcul del valor yMax *)

yMax = Max[Table[{CA[t]/. solucio,CB[t]/. solucio,CB[t]/. solucio}, {tau, 0, tMax}]];

(*Gràfica*)

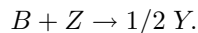
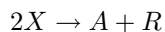
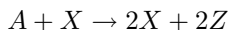
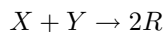
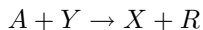
Plot[{CA[t]/. solucio,CB[t]/. solucio,CC[t]/. solucio},{t,tMin,tMax}, Frame -> True, FrameLabel -> {"t (\!\!(s\^-1\!))", "C (mol \!\!(L\^-1\!))"}, PlotStyle->{Dashing[{0.0,0.0}],Dashing[{0.025,0.025}],Dashing[{0.01,0.01}]}];



Informàtica Aplicada a la Química.

Reaccions oscil·lants. Ressolució d'equacions diferencials amb Mathematica

Una reacció oscil·lant és una reacció química complexa que presenta la particularitat que la concentració d'alguns dels productes generats oscil·la entre un valor màxim i un valor mínim. Un exemple d'aquestes reaccions ve descrita pel model Oregonator (desenvolupat en la universitat d'Oregon) que presenta el següent mecanisme de reacció:



Amb ajuda del Mathematica intergreu el sistema d'equacions de velocitat amb la hipòtesi que les concentracions d'A i B es mantenen constants (afegint reactius des de fora si s'escau). Representeu en un mateix gràfic les concentracions dels productes X, Y i Z en funció del temps (en l'interval (t_0, t_f) on $t_0 = 0$, $t_f = 100.000$ s) i observeu com aquestes concentracions presenten un comportament oscil·lant en front del temps.

Particularitzeu el problema per a les condicions frontera següents:

Valors de les 5 constants de velocitat en $L \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$: $k_1 = 0.005$, $k_2 = 1.0$, $k_3 = 1.0$, $k_4 = 1.0$, $k_5 = 0.0004$.

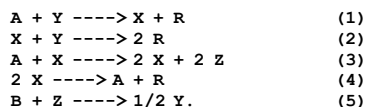
Valors de les concentracions del reactius A i B en mol L^{-1} : $[A] = 0.01$, $[B] = 1.0$.

Concentracions inicials de X, Y i Z en mol L^{-1} : $[X_0] = 0$, $[Y_0] = 0$, $[Z_0] = 0.00025$.

Limits de temps en el càlcul: $t_{Min} = 0$ s, $t_{Max} = 100000$ s.

(* Reacció oscil.lant (model d'Oregon)

El mecanisme d'aquest model és:



Assumim constants les concentracions d'A i B, Les equacions de velocitat seran doncs:

$$\begin{array}{l} d[X]/dt = k1 [A] [Y] - k2 [X] [Y] + k3 [A] [X] - 2 k4 [X]^2 \\ d[Y]/dt = -k1 [A] [Y] - k2 [X] [Y] + (1/2) k5 [B] [Z] \\ d[Z]/dt = 2 k3 [A] [X] - k5 [B] [Z] \end{array} \quad *)$$

ClearAll["Global`*"]

Off[General::spell,General::spell1]

(* Valors de les cinq constants de velocitat en unitats L mol⁻¹ s⁻¹.)

k1 = .005; k2 = 1.; k3 = 1.; k4 = 1.; k5 = .0004;

(*Valors a and b corresponents a les espècies A i B en mol L⁻¹.)

a = .01; b = 1.;

(*Concentrations inicials de X, Y i Z.*)

CX0 = 0; CY0 = 0; CZ0 = .00025;

(*Limits de temps en el càlcul.*)

tMin = 0.; tMax = 100000.;

(* R resolució de les equacions de velocitat *)

solucio = NDSolve[

(*les lleis de velocitat.*)

$$\begin{array}{l} \{CX'[t] == k1 a CY[t] - k2 CX[t] CY[t] + k3 a CX[t] - 2 k4 CX[t]^2, \\ CY'[t] == -k1 a CY[t] - k2 CX[t] CY[t] + (1/2) k5 b CZ[t], \\ CZ'[t] == 2 k3 a CX[t] - k5 b CZ[t], \end{array}$$

(*Els valors inicial de les concentracions.*)

$$CX[0] == CX0, CY[0] == CY0, CZ[0] == CZ0,$$

(*variables dependents, variable independent i rang d'aquesta darrera.*)

$$\{CX, CY, CZ\}, \{t, tMin, tMax\},$$

(*Opcions en el càlcul*)

$$\text{MaxSteps} \rightarrow 5000 \text{]};$$

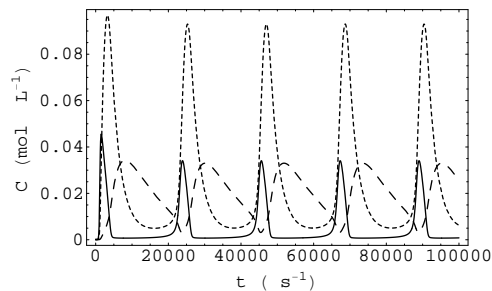
(*Valors de xMin, xMax and yMin per a la gràfica *)

xMin = 0; xMax = tMax; yMin = 0;

(*Càlcul del valor yMax *)

yMax = Max[Table[{CX[t]/. solucio, CY[t]/. solucio, CZ[t]/. solucio}, {tau, 0, tMax}]]; (*Gràfica*)

Plot[{10 CX[t] /. solucio, CY[t] /. solucio, CZ[t] /. solucio}, {t, tMin, tMax}, Frame -> True, FrameLabel -> {"t (\!(s^-1\))", "C(mol \!(L^-1\))"}, PlotStyle -> {Dashing[{0.0, 0.0}] Dashing[{0.025, 0.025}] Dashing[{0.01, 0.01}]}];



Informàtica Aplicada a la Química.

Integració numèrica de la segona llei de Fick (equació diferencial d'ordre 2) amb Excel

Les dissolucions (líquides, sòlides o gasoses) en equilibri presenten una concentració uniforme. Si provoquem externament un gradient de concentracions el sistema reacciona, intentant tornar a la situació d'equilibri, produint un flux J de solut ¹ des de zones de major a les de menor concentració (flux contracorrent). Aquest flux és major a major gradient.

Si considerem variacions de concentració de solut únicament al llarg de l'eix z , el gradient és simplement dc/dz i la relació flux - gradient:

$$J = -D \frac{cd}{dz} \quad 1^a \text{ llei de Fick} \quad (1)$$

la constant de proporcionalitat D s'anomena quocient de difusió.

Considerem ara un volum dV format per dues àrees A separades una distància dz : $dV = Adz$. Aleshores, $dn = cdV = cAdz$ és el nombre de mols de solut que hi ha en dV . Sobre aquest volum hi ha un doble flux: un d'entrada $J(z)A$ i un d'eixida $J(z+dz)A$ que, en absència de fonts i clavegueres, és el responsable que es pugui produir una acumulació per unitat de temps, dn/dt , de molècules de solut en l'esmentat volum. Tenim *Entrada - Eixida = Acumulació*, és a dir:

$$[J(z) - J(z+dz)]A = \frac{dc}{dt}Adz$$

o, el que és equivalent:

$$-\frac{\partial J}{\partial z} = \frac{dc}{dt}$$

Substituint en aquesta equació la primera llei de Fick, eq. (1), obtenim l'anomenada segona llei de Fick,

$$\frac{dc}{dt} = D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}$$

El balanç pot ser, però, un poc més general: *Entrada - Eixida + Generació = Acumulació*, on la generació és positiva o negativa segons tinguem una font o una claveguera:

$$[J(z) - J(z+dz)]A + g(z)dV = \frac{dc}{dt}dV$$

d'on

$$\frac{dc}{dt} = D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + g(z)$$

En estat estacionari tenim que $dc/dt = 0$ i, aleshores,

$$\frac{\partial^2 c}{\partial z^2} = -\frac{1}{D}g(z) \quad (2)$$

Es proposa com exercici la integració numèrica d'aquesta equació estacionària amb les condicions de contorn $c(z=0) = 10$ Molar i $c(z=10) = 1$ Molar, quan en la conducció de 10 metres hi ha una claveguera als dos metres $g(2) = -1.0$ i una font als cinc metres $g(4) = 1.0$. Amb aquesta finalitat substituïu derivades per diferències finites centrals

$$\frac{dc}{dz} \approx \frac{c(z+h/2) - c(z-h/2)}{h}$$

Iterant la definició:

$$\frac{d^2c}{dz^2} \approx \frac{c(z+h) - 2c(z) + c(z-h)}{h^2}.$$

Substituint en l'equació estacionària, eq (2), i anomenant $c(z) = c_i$, $c(z+h) = c_{i+1}$ i $c(z-h) = c_{i-1}$, tenim:

$$\begin{aligned} c_{i+1} - 2c_i + c_{i-1} &= -\frac{h^2}{D}g_i \\ \rightarrow c_i &= (c_{i+1} + c_{i-1})/2 + \frac{h^2}{2D}g_i \end{aligned} \quad (3)$$

Es proposa que construïu un fulla de càlcul amb 3 columnes z_i, g_i i c_i . Les posicions $z = 0$ i $z = 10$ es corresponen amb $c(z=0) = 10$ i $c(z=10) = 1$. La resta de termes c_i es calculen amb la fórmula iterativa, eq, (3). La columna g_i serà tota zero excepte $g(z=2)$ i $g(z=4)$. Per evitar que la fulla de càlcul done error per referències circulars desactivarem el càlcul automàtic i activarem el càlcul iteratiu (seleccionem "Opcions" del menú "Herramientas" i piqueu en la pestanya "calcular". Trieu "cálculo manual" i "iteración"). Una vegada construïda la fulla procediu al càlcul (tecla F9). Representeu el perfil de concentracions vs. la distància z .

¹Amb major precisió, flux és el nombre de mols que travessen la unitat de superfície en la unitat de temps: $J = \frac{dn}{dAdt}$.

Integració numèrica de la segona llei de Fick (mètode de la relaxació)

pas 0,4

| discret | x_i | g_i | c_i |
|---------|-------|-------|-------|
| 0,0 | 0,0 | 0 | 10,00 |
| 1,0 | 0,4 | 0 | 9,24 |
| 2,0 | 0,8 | 0 | 8,49 |
| 3,0 | 1,2 | 0 | 7,73 |
| 4,0 | 1,6 | 0 | 6,97 |
| 5,0 | 2,0 | -1,0 | 6,22 |
| 6,0 | 2,4 | 0 | 7,46 |
| 7,0 | 2,8 | 0 | 8,70 |
| 8,0 | 3,2 | 0 | 9,94 |
| 9,0 | 3,6 | 0 | 11,18 |
| 10,0 | 4,0 | 1,0 | 12,42 |
| 11,0 | 4,4 | 0 | 11,66 |
| 12,0 | 4,8 | 0 | 10,90 |
| 13,0 | 5,2 | 0 | 10,14 |
| 14,0 | 5,6 | 0 | 9,38 |
| 15,0 | 6,0 | 0 | 8,62 |
| 16,0 | 6,4 | 0 | 7,86 |
| 17,0 | 6,8 | 0 | 7,10 |
| 18,0 | 7,2 | 0 | 6,34 |
| 19,0 | 7,6 | 0 | 5,58 |
| 20,0 | 8,0 | 0 | 4,81 |
| 21,0 | 8,4 | 0 | 4,05 |
| 22,0 | 8,8 | 0 | 3,29 |
| 23,0 | 9,2 | 0 | 2,53 |
| 24,0 | 9,6 | 0 | 1,76 |
| 25,0 | 10,0 | 0 | 1,00 |

clavegura

font

