

Estudio de la variación de calor desprendida en una reacción química

Francisco A. Ocaña Lara

Depto. de Estadística e Investigación Operativa

2 de marzo de 2009

Resumen

La siguiente práctica pretende ilustrar el significado de los conceptos de derivada parcial y de diferencial, a través de algunas de sus aplicaciones en las ciencias experimentales. Esta práctica está inspirada en el Ejercicio 7 (pág. 101) del libro de Valderrama (1995). Para facilitar la labor al alumno, se recomienda que, antes de realizar la presente práctica, resuelva el mencionado ejercicio.

Con la ayuda de una hoja de cálculo, el alumno puede ir siguiendo los apartados que a continuación se enumeran (mantener el orden de los apartados será de gran ayuda). En cada apartado, el alumno realizará los cálculos que se indican, pero sin olvidar que ha de poner atención también en su interpretación.

Descripción

La cantidad de calor Q desprendida, cuando x moléculas de SO_4H_2 se mezclan con y moléculas de H_2O , es

$$Q = \frac{ay}{bx + y},$$

donde a y b son parámetros fijos de \mathbb{R} . Cuando sea necesario en la presente práctica, suponga que $a = 1$ y $b = 0.5$.

1. La realización de los apartados del Ejercicio 7 (pág. 101) del libro de Valderrama (1995) puede ser de gran ayuda para entender el problema.

Resultados analíticos:

$$\frac{\partial Q}{\partial x} = \frac{-a b y}{(b x + y)^2} \quad y \quad \frac{\partial Q}{\partial y} = \frac{a b x}{(b x + y)^2}.$$

2. ¿Cómo queda la expresión de Q cuando ahora las magnitudes x e y se expresan en moles? ¿Cuál es la cantidad de calor desprendida, cuando se mezclan 10 moles¹ de SO_4H_2 junto con 5 moles de H_2O ?
3. En la situación anterior, se va a analizar la variación de Q por mol de SO_4H_2 añadido. Para ello, calcule la variación por mol de SO_4H_2 añadido que experimenta Q (respecto de su valor en el primer apartado), cuando se añada ($\Delta x_0 = 1$) una mol de SO_4H_2 . Idem anterior, pero considerando que se añaden $\Delta x_k = 2^{-k}$ moles de SO_4H_2 , para $k = 1, \dots, 6$. ¿Cómo se comportan las anteriores variaciones de Q por mol de SO_4H_2 , cuando $\Delta x_k \rightsquigarrow 0$? ¿Hacia quién tienden dichas variaciones relativas de Q ?
4. En la situación del Apartado 2, se va a analizar ahora la variación de Q por mol de H_2O añadido. Para ello, calcule la variación por mol de H_2O añadido que experimenta Q (respecto de su valor en el primer apartado), cuando se añada ($\Delta y_0 = 1$) un mol de H_2O . Idem anterior, pero considerando que se añaden $\Delta y_k = 2^{-k}$ moles de H_2O , para $k = 1, \dots, 6$. ¿Cómo se comportan las anteriores variaciones de Q por mol de H_2O , cuando $\Delta y_k \rightsquigarrow 0$? ¿Hacia quién tienden dichas variaciones relativas de Q ?
5. Confeccione una tabla (Tabla 1) de la forma siguiente:

	y_1	\dots	y_j	\dots	y_n
x_1	$Q(x_1, y_1)$	\dots	$Q(x_1, y_j)$	\dots	$Q(x_1, y_n)$
\vdots	\vdots		\vdots		\vdots
x_n	$Q(x_n, y_1)$	\dots	$Q(x_n, y_j)$	\dots	$Q(x_n, y_n)$

donde $x_i = 9.5 + i 0.1$, $y_j = 4.5 + j 0.1$ e $i, j = 1, 2, \dots, 10 = n$. Obsérve que disponemos de valores de Q asociados a pares (x_i, y_j) situados en un entorno del punto $(10, 5)$.

¹En esta práctica, consideraremos moles de moléculas.

6. Confeccione otra tabla (Tabla 2) similar a la anterior, pero, en lugar de aparecer los valores *exactos* $Q(x_i, y_j)$, lo han de hacer sus aproximaciones obtenidas a través de $dQ(10, 5)$. Compare los valores de las Tablas 1 y 2 e interprete los resultados obtenidos.
7. Idem anterior, obteniendo la Tabla 3 con los errores absolutos *exactos* $Q(x_i, y_j) - Q(10, 5)$. ¿Cuál es el significado de estos errores, respecto al valor $Q(10, 5)$?
8. Idem anterior, obteniendo la Tabla 4 con los errores absolutos aproximados. ¿Cómo aproximaría dichos errores absolutos? Compare las Tablas 3 y 4 e interprete los resultados obtenidos.
9. Idem anterior, obteniendo la Tabla 5 con los errores relativos *exactos* $(Q(x_i, y_j) - Q(10, 5)) / Q(10, 5)$. ¿Cuál es el significado de estos errores, respecto al valor $Q(10, 5)$?
10. Idem anterior, obteniendo la Tabla 6 con los errores relativos aproximados. ¿Cómo aproximaría dichos errores relativos? Compare las Tablas 5 y 6 e interprete los resultados obtenidos.

Referencias

- [1] Valderrama Bonnet, Mariano J. (1995). *Modelos matemáticos en las ciencias experimentales*. Ediciones Pirámide, Madrid.