

## Ejercicio 9

---

## Introducción

Cuando tenemos un experimento, muchas veces buscamos llegar a un cierto resultado o dato a través de diferentes caminos. Podemos hacer mediciones o podemos hacer cálculos, pero si decidimos hacer ambos, no siempre vamos a llegar a exactamente el mismo valor. Entonces allí nos preguntamos ¿cuál es el valor “más correcto” o más aproximado al valor real?

Tanto los errores de medición como los numéricos dependen del proceso a través del cual se llegó al resultado. Un error de medición puede darse a causa del instrumento de medida, de la persona que mide, de los factores ambientales. Un error numérico puede provocarse por el redondeo de números, por el método numérico elegido o por errores en los datos utilizados.

Una vez obtenidos los resultados por ambos caminos, debemos compararlos y pensar a quién le atribuimos la diferencia.

## El problema

Considere una mezcla de gases de  $n$ -componentes no reactivos. Utilizando un espectrómetro de masa el compuesto es bombardeado con electrones de baja energía. La mezcla resultante de iones es analizada con un galvanómetro, el cual muestra “picos” correspondientes a relaciones específicas de masa/carga. Sólo se considerarán los  $n$ -picos más relevantes. Se puede conjeturar que la altura  $h_i$  del  $i$ -ésimo pico es una combinación lineal de las presiones parciales de los gases de la mezcla  $p_j$ ,  $j = 1, \dots, n$ , con lo cual se obtiene,

$$\sum_{j=1}^n s_{ij} p_j = h_i, \quad i = 1, \dots, n$$

donde  $s_{ij}$  son los “coeficientes de sensibilidad”. Para determinar las presiones parciales de los gases se requiere resolver este sistema lineal.

Suponiendo que luego de una inspección espectroscópica se presentan los siguientes siete picos más relevantes:  $h_1 = 17.1$ ,  $h_2 = 65.1$ ,  $h_3 = 186.0$ ,  $h_4 = 82.7$ ,  $h_5 = 84.2$ ,  $h_6 = 63.7$  y  $h_7 = 119.7$  y que los coeficientes de sensibilidad están dados por la tabla siguiente,

Indice	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)
Hidrogeno (1)	16.87	0.1650	0.2019	0.3170	0.2340	0.1820	0.1100
Metano (2)	0.0	27.70	0.8620	0.0620	0.0730	0.1310	0.1200
Etileno (3)	0.0	0.0	22.35	13.05	4.420	6.001	3.043
Etano (4)	0.0	0.0	0.0	11.28	0.0	1.110	0.3710
Propileno (5)	0.0	0.0	0.0	0.0	9.850	1.1684	2.108
Propano (6)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2990	15.98	2.107
n-Pentano (7)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.670

Cuadro 1: Coeficientes de sensibilidad de la mezcla de gases

Se pide calcular las presiones parciales de los componentes de la mezcla y la presión total de la mezcla. Compare este resultado con la presión de la mezcla medida durante el

ensayo, igual a  $38.78\mu\text{m}$  de Hg. Obtenga conclusiones del resultado obtenido y de la comparación.

## Métodos

El problema requiere resolver un sistema de ecuaciones algebraicas lineales  $Sp = h$  para obtener las presiones parciales  $p$ . Para ello, se utiliza el método de Eliminación Gaussiana con sustitución hacia atrás y sin pivoteo. Las razones de esta elección son:

- *Sólo debemos buscar una solución a este sistema* - Para esta situación, la eliminación gaussiana es menos costosa que la factorización LU, pues simplemente se transforma la matriz y luego se hace la sustitución hacia atrás ( $O(n^3)$ ). Si eligiéramos la factorización, primero tendríamos que descomponer la matriz de coeficientes ( $O(n^3)$ ) y luego hacer dos sustituciones hacia atrás ( $O(n^2)$ ).
- *La matriz  $S$  no necesita pivoteo* - Los elementos que están sobre la diagonal de la matriz no son nulos y, además, son mayores que los elementos que están debajo de ellos.

El método de eliminación gaussiana transforma el sistema en otro equivalente con matriz triangular superior que luego puede resolverse mediante la sustitución hacia atrás. La matriz de coeficientes y el vector de términos independientes van siendo transformados en cada paso  $k$  de la eliminación mediante operaciones elementales, con  $k = 1, \dots, n - 1$ .

## Desarrollo y resultados

Para el desarrollo de la solución se utiliza el software Octave y el algoritmo de eliminación gaussiana siguiente

```
function [x] = eliminacion_gaussv(A,b)
    n = length(A(1,:));
    for k = 1:n
        m = A(k+1:n,k)/A(k,k);
        b(k+1:n) = b(k+1:n) - m*b(k);
        A(k+1:n,k:n) = A(k+1:n,k:n) - m * A(k,k:n);
    end
    [x] = sust_backv1(A,b);
endfunction

function [x] = sust_backv1(A,b)
    n = length(A(1,:));
    x = 0*b;
    for i = n:-1:1
        x(i) = (b(i)-A(i,i+1:n)*x(i+1:n))/A(i,i);
    end
endfunction
```

En primer lugar ingresamos la matriz  $S$  y el vector  $h$

```
>> S = [16.87 0.1650 0.2019 0.3170 0.2340 0.1820 0.1100;0.0 27.70 0.8620 0.0620
S =
    16.87000    0.16500    0.20190    0.31700    0.23400    0.18200    0.11000
    0.00000    27.70000    0.86200    0.06200    0.07300    0.13100    0.12000
    0.00000    0.00000    22.35000    13.05000    4.42000    6.00100    3.04300
    0.00000    0.00000    0.00000    11.28000    0.00000    1.11000    0.37100
    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    9.85000    1.16840    2.10800
    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.29900    15.98000    2.10700
    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    4.67000
```

```
>> h = [17.1;65.1;186.0;82.7;84.2;63.7;119.7]
h =
    17.100
    65.100
   186.000
    82.700
    84.200
    63.700
   119.700
```

Luego, invocamos al algoritmo de eliminación gaussiana y obtenemos

```
>> p = eliminacion_gaussv(S,h)
p =
    0.65252
    2.20382
    0.33475
    6.43436
    2.99748
    0.55055
   25.63169
>> |
```

¿Cómo se llegó a este resultado? En los pasos  $k = 1, 2, 3, 4$  de la eliminación, debajo de los pivotes, en la matriz  $S$ , sólo hay ceros. Por lo tanto, al hacer

$$E_i - \frac{s_{ik}}{s_{kk}} E_k \rightarrow E_i \quad i = k + 1, \dots, n$$

tanto la matriz  $S$  como el vector  $h$ , quedan inalterados.

En el paso  $k = 5$ , tenemos las operaciones

$$E_6 - \frac{s_{65}}{s_{55}} E_5 \rightarrow E_6$$

$$E_7 - \frac{s_{75}}{s_{55}} E_5 \rightarrow E_7$$

La fila 7 no cambia porque  $s_{75} = 0$ , pero la 6 sí, quedando:

```
>> h(6) = h(6) - S(6,5)/S(5,5)*h(5)
h =
    17.100
    65.100
   186.000
    82.700
    84.200
    61.144
   119.700

>> S(6,:) = S(6,:) - S(6,5)/S(5,5)*S(5,:)
S =
   16.87000    0.16500    0.20190    0.31700    0.23400    0.18200    0.11000
    0.00000   27.70000    0.86200    0.06200    0.07300    0.13100    0.12000
    0.00000    0.00000   22.35000   13.05000    4.42000    6.00100    3.04300
    0.00000    0.00000    0.00000   11.28000    0.00000    1.11000    0.37100
    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    9.85000    1.16840    2.10800
    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000   15.94453    2.04301
    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    4.67000
```

Aquí se ha llegado a una matriz triangular superior, por lo tanto, en el paso  $k = 6$  de la eliminación, nuevamente, la matriz y el vector quedan inalterados.

Este sistema equivalente se puede escribir como sigue:

$$\begin{aligned}
 16.87 \cdot p_1 + 0.1650 \cdot p_2 + 0.2019 \cdot p_3 + 0.3170 \cdot p_4 + 0.2340 \cdot p_5 + 0.1820 \cdot p_6 + 0.11000 \cdot p_7 &= 17.100 \\
 27.70 \cdot p_2 + 0.8620 \cdot p_3 + 0.0620 \cdot p_4 + 0.0730 \cdot p_5 + 0.1310 \cdot p_6 + 0.12000 \cdot p_7 &= 65.100 \\
 22.35 \cdot p_3 + 13.050 \cdot p_4 + 4.4200 \cdot p_5 + 6.0010 \cdot p_6 + 3.04300 \cdot p_7 &= 186.00 \\
 11.280 \cdot p_4 + 1.1100 \cdot p_6 + 0.37100 \cdot p_7 &= 82.700 \\
 9.8500 \cdot p_5 + 1.1684 \cdot p_6 + 2.10800 \cdot p_7 &= 84.200 \\
 15.94453 \cdot p_6 + 2.04301 \cdot p_7 &= 61.144 \\
 4.67000 \cdot p_7 &= 119.70
 \end{aligned}$$

Ahora se comienza a realizar la sustitución hacia atrás, cuyos cálculos son:

$$\begin{aligned}
 p_7 &= \frac{119.70}{4.6700} = 25.63169 \\
 p_6 &= \frac{61.144 - 2.04301 \cdot p_7}{15.94453} = 0.55055 \\
 p_5 &= \frac{84.2 - 2.10800 \cdot p_7 - 1.1684 \cdot p_6}{9.8500} = 2.99748 \\
 p_4 &= \frac{82.700 - 1.1100 \cdot p_6 + 0.37100 \cdot p_7}{11.280} = 6.43436 \\
 p_3 &= \frac{186.00 - 13.050 \cdot p_4 - 4.4200 \cdot p_5 - 6.0010 \cdot p_6 - 3.04300 \cdot p_7}{22.35} = 0.33475 \\
 p_2 &= \frac{65.100 - 0.8620 \cdot p_3 - 0.0620 \cdot p_4 - 0.0730 \cdot p_5 - 0.1310 \cdot p_6 - 0.12000 \cdot p_7}{27.70} = 2.20382 \\
 p_1 &= \frac{17.100 - 0.1650 \cdot p_2 - 0.2019 \cdot p_3 - 0.3170 \cdot p_4 - 0.2340 \cdot p_5 - 0.1820 \cdot p_6 - 0.11000 \cdot p_7}{16.87} = 0.65252
 \end{aligned}$$

Y así es como el algoritmo ha llegado a la solución, que es el vector  $p$  que contiene las presiones parciales de los gases.

Para calcular la presión total de la mezcla, simplemente sumamos las presiones parciales,

```
>> p_total = sum(p)
p_total = 38.805
>> |
```

La presión total **calculada** es de  $38.805 \mu\text{m}$  de Hg.

La matriz residual que arroja el método que elegimos para llegar al resultado, utilizando una computadora en la realización de los cálculos, es:

```
>> S*p-h
ans =
0.0000e+000
0.0000e+000
0.0000e+000
0.0000e+000
0.0000e+000
0.0000e+000
1.4211e-014
```

Esto nos muestra que el error numérico es muy pequeño. De modo que, si los datos que utilizamos son los reales, la solución calculada es bastante próxima al valor real.

Por otro lado tenemos la presión total **medida**, que es  $38.78\mu m$  de Hg. Entonces, la diferencia entre la presión total calculada y la medida es de  $0.025\mu m$  de Hg.

Como vimos que el error en el valor calculado es muy pequeño, podríamos concluir que la medición puede no ser tan exacta. Pero también tendríamos que contemplar si los datos que utilizamos en los cálculos son los exactos.

---

## Conclusión

---

Hay dos puntos fundamentales en este ejercicio.

Por un lado, a la hora de elegir métodos numéricos para llegar a una cierta solución con sistemas de ecuaciones lineales, debemos contemplar si requiere calcular varias soluciones con la misma matriz de coeficientes, qué forma tiene dicha matriz, cómo son esos coeficientes. Es fundamental elegir métodos que sean eficientes y que aproximen lo mejor posible la solución.

Por otro lado, cuando tenemos que calcular y medir algo, puede suceder que los dos caminos no terminen en el mismo valor. Entonces, hay que comparar esos resultados y tratar de ver cuál de los dos está más cerca del valor real, contemplando todas las causas posibles de errores, tanto numéricos como de medición.