

PREDICCIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DEL PRODUCTO EN UNA REACCIÓN QUÍMICA

Lázaro-Camasca¹, Ponce-Pinedo², Sarria-Palacios³, Loayza-Pizarro⁴

Facultad de Ciencias¹, Universidad Nacional de Ingeniería¹

Email: elazaroc@uni.pe¹, victor.ponce.p@uni.pe²,esarriap@uni.pe³, fernando.loayza.p@uni.pe⁴

Resumen

En muchos problemas científicos se necesita obtener datos a partir de casos experimentales. Conocer estas concentraciones ayuda a muchos profesionales. Los químicos y biólogos miden las cantidades agentes contaminantes para determinar los niveles de **contaminación en el ambiente**. En la industria farmacéutica los laboritaristas miden las cantidades de sustancias necesarias para preparar medicamentos; todas estas de concentración determinada y de cuya exacta preparación **depende de la vida y la pronta recuperación de cientos de miles de enfermos**. En las industrias de bebidas gaseosas los ingenieros miden las cantidades de edulcorantes, cafeína, ácido fosfórico, entre otros, con el propósito de que estas sean gratas al paladar, refrescantes y comercialmente rentables, **ingrementando sus ingresos economicos**.

Palabras Clave:

Interpolación, Predicción química, Concentración, Contaminación ambiental.

Abstract

Mathematics is the pillar of many disciplines such as physics, chemistry, computing, biology, engineering. In particular, the **Polynomial Interpolation** method allows us to obtain data from others, in this case the data becomes the chemical concentrations. Knowing the knowledge of these concentrations helps many professionals. Chemists and biologists measure the amounts of carbon monoxide and dioxide, sulfur dioxide and other pollutants to determine the levels of pollution in the environment. The laboratoristas that work in the pharmaceutical industry measure the quantities of substances necessary to prepare nasal, ophthalmic, sedative, analgesic, antispasmodic, moisturizing solutions; all of these of determined concentration and whose exact preparation **depends on the life and the quick recovery of hundreds of thousands of patients**. In the soft drink industries engineers measure the amounts of sweeteners, caffeine, phosphoric acid, among others, with the purpose that these are pleasant to the palate, refreshing and commercially profitable,**increase the income significantly to the industries**.

Keywords:

Interpolation, chemical prediction, concentration, environmental pollution, industrial income.

1. INTRODUCCIÓN

En las reacciones químicas la velocidad de la reacción dependen de diversos parametros tales como la temperatura, la presión, la concentracion de los reactivos estos al ser va

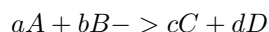
Conocer la concentración de las soluciones es muy importante porque gracias a ello se puede establecer las cantidades de soluto y solvente presentes en una solución, muchos profesionales tienen que medir, necesariamente, una de las siguientes magnitudes físicas: Masa (m), volumen (v) y cantidad de sustancia (n).

Por ello presente trabajo describe la obtención de una función que describirá la concentración de producto de una reacción química en función del tiempo. Esta función será calculada mediante métodos de interpolación polinomial utilizando puntos que han sido obtenidos de manera experimental.

2. CONCEPTOS PREVIOS

PARTE QUÍMICA:

- **Reacciones Químicas:** Es un proceso en el que dos o más sustancias (reactantes) se transforman en una o más sustancias (productos). Estas reacciones deben satisfacer la ley de la conservación de la materia.



- **Velocidad Instantánea de Reacción:** Expresa el cambio de la concentración de un reactivo o de un producto por unidad de tiempo (concentración/tiempo). $v = -1/a \cdot d[A]/dt = -1/b \cdot d[B]/dt = 1/c \cdot d[C]/dt = 1/d \cdot d[D]/dt$
- **ORDEN DE LAS REACCIONES**

- **Reacciones de Orden Cero:** Son aquellas en que la velocidad no depende de la concentración de los reactivos. Entonces para: $A \rightarrow B$, la ley de velocidad será: $v = k[A]^0 = k$. Donde k es la constante de velocidad y su unidad es

$$M t^{-1}$$

Por tanto: $v = -d[A]/dt = k$. Entonces:

$$[A] = -kt + [A]_0$$

- **Reacciones de Primer Orden:** Para la reacción genérica de primer orden: $A \rightarrow B$, la ley de velocidad será: $v = k[A]^1$, la unidad de k es t^{-1} . Entonces se tiene: $v = -d[A]/dt = k \cdot [A]$ Resolviendo:

$$\ln[A] = -kt + \ln[A]_0$$

- **Reacciones de Segundo Orden:** Para la reacción genérica de segundo orden: $A \rightarrow B$, la ley de velocidad será: $v = k[A]^2$, la unidad de k es

$$M^{-1} t^{-1}$$

Por tanto: $v = -d[A]/dt = k \cdot [A]^2$ Entonces:

$$1/[A] = -kt + 1/[A]_0$$

PARTE NUMÉRICA:

- **INTERPOLACIÓN POLINÓMICA**

Dados $n+1$ puntos $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ con $x_i \neq x_j$, si $i \neq j$ existe un único polinomio $P_n(x)$ de $\text{grado} \leq n$ tal que $P(x_i) = y_i \forall i = 0, 1, \dots, n$.

- **Datos de Interpolación:** $(x_k, f_k), k = 0, 1, \dots, n$. Conocemos los valores de una función $f_k = f(x_k)$, en $n+1$ puntos distintos x_k , de un intervalo $[a, b]$.

- **Funciones Interpolantes:** Polinomios de grados menor o igual que n . $P(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$

- **Problema de Interpolación:** Determinar los coeficientes a_0, a_1, \dots, a_n para que cumplan las condiciones de interpolación:

$$P(x_k) = f_k, k = 0, 1, \dots, n$$

■ MÉTODOS DE INTERPOLACIÓN POLINÓMICA

- **Método de Lagrange:** Consiste en calcular previamente los polinomios $L_i(x_i), i = 0, 1, \dots, n$, llamados polinomios de Lagrange, que verifican:

$L_i(x_i) = 1, L_i(x_j) = 0, i \neq j$. Estos polinomios vienen dados por la expresión:

$L_i(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^n (x - x_j) / (x_i - x_j)$. El polinomio de interpolación se escribe de la forma:

$$P(x) = f_0L_0(x) + f_1L_1(x) + \dots + f_nL_n(x) = \sum_{i=0}^n f_iL_i(x)$$

- **Método Serie de Potencias:** Este método construye un polinomio interpolante de orden n $P(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$ para $n+1$ puntos dados, reemplazando los puntos dados en el polinomio y resolviendo el sistema de ecuaciones generado, hallando de esta manera sus coeficientes.

- **Método de Newton (Diferencias Divididas):** Consiste en escribir el polinomio de interpolación en la forma:

$$P(x) = A_0 + A_1(x - x_0) + A_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots + A_{n-1}(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-2})$$

Los coeficientes A_k , que se denominan diferencias divididas de la función f en los puntos x_0, x_1, \dots, x_k , se denotan por $A_k = f[x_0, x_1, \dots, x_k]$ y se genera de forma recursiva mediante la fórmula:

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = (f[x_1, x_2, \dots, x_k] - f[x_0, x_1, \dots, x_{k-1}]) / (x_k - x_0) \text{ Partiendo de } f[x_0] = f(x_0).$$

Con esta notación, el polinomio de interpolación puede escribirse como:

$$P(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \dots + f[x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}).$$

■ INTERPOLACIÓN POLINOMIAL POR PARTES

El uso de polinomios de interpolación de alto grado puede producir errores grandes debido al alto grado de oscilación de este tipo de polinomios. Para evitar este problema se busca aproximar la función desconocida en intervalos pequeños usando polinomios de grado bajo. El caso más común de la interpolación por partes es usar polinomios cúbicos.

- **Interpolación con Funciones Splines:** Sea Δ una partición del intervalo $[a, b]$. $\Delta: a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$. Un spline es una función polinómica a trozos en cada uno de los intervalos $[x_i, x_{i+1}]$ de la partición. Notaremos por $S_m^k(\Delta)$ al conjunto de funciones de clase k que son polinomios a trozos de grado m en cada uno de los intervalos de partición:

$$S_n^k(\Delta) = \{s \in C_m^k[a, b], s|_{[x_i, x_{i+1}]} \in P_m\},$$

donde P_m denota el conjunto de polinomios de grado a lo sumo m .

Notaremos: $\Delta = x_0, x_1, \dots, x_n$ la partición

dado por los nodos. $h_i = x_{i+1} - x_i$, a la amplitud del intervalo $[x_i, x_{i+1}]$. f_i a los valores de la función que queremos interpolar. $m_i = (f_{i+1} - f_i)/h_i$, a la pendiente de la curva en el intervalo $[x_i, x_{i+1}]$.

Interpolación con splines cúbicos: $S_3^2(\Delta)$

Funciones interpolantes: Splines en $S_3^2(\Delta)$ se trata de funciones de clase 2 definidas a trozos mediante polinomios de grado 3 en cada intervalo de la partición. Problema de interpolación: Determinar un spline $s \in S_3^2(\Delta)$ tal que: $s(x_i) = f_i, i = 0, 1, \dots, n$, y necesitamos imponer además dos condiciones adicionales en los puntos de frontera x_0 y x_n . Por ejemplo si el spline satisface $s''(x_0) = 0$ y $s''(x_n) = 0$ se dice que es un spline cubico natural.

■ REGRESIÓN POR MÍNIMOS CUADRADOS

En este método se pretende trazar la recta que más se acerque al conjunto de datos dado, expresada matemáticamente como:

$$Y = C_1 X + C_2 + error$$

Los valores C_1, C_2 y el error, se pueden calcular de las siguientes maneras:

$$C_1 = (n \sum X_i * Y_i - \sum X_i \sum Y_i) / (n \sum X_i^2 - (\sum X_i)^2)$$

$$C_2 = \sum Y_i / n - C_1 \sum X_i / n$$

$$error = (\sum Y_i - C_2 - C_1 X_i)^2$$

El error se da en términos de la suma de los cuadrados de la diferencia entre el valor muestral y el valor calculado con la recta de regresión.

Si los datos no son muy exactos o tienen asociado un error entonces la mejor manera es es-

tablecer una sola curva que represente la tendencia general de los datos observados.

■ ESTIMACIÓN DEL ERROR

Sea $f \in C^{n+1}[a, b]$. Sea $P_n(x)$ el polinomio de grado $\leq n$ que interpola f en los $n+1$ puntos (distintos) x_0, x_1, \dots, x_n en el intervalo $[a, b]$. Para cada valor fijo $x \in [a, b]$ existe $\xi(x) \in (a, b)$ tal que:

$$f(x) - P_n(x) = f^{(n+1)}(\xi(x)) / (n+1)! * (x-x_0)(x-x_1) \dots (x-x_n)$$

3. ANÁLISIS

En una reacción química, la concentración del producto C_B cambia con el tiempo como se indica en la siguiente tabla:

t	C_B
0.00	0.00
0.10	0.30
0.40	0.55
0.60	0.80
0.80	1.10
1.00	1.15

Calcule la concentración C_B cuando $t = 0,82$

Para resolver el problema se implementará una **interfaz gráfica** donde el usuario pueda elegir el método numérico para resolver el problema, además podrá hallar la C_B en el cualquier tiempo t .

Con esto es usuario podrá comparar la eficiencia de los diferentes métodos numéricos ver cual es el mejor y el peor, también podrá insertar sus datos para un mayor aprendizaje, ya que la **eficiencia de los métodos** depende del problema y por ende de los datos.

4. OBSERVACIONES

5. CONCLUSIONES

Agradecimientos

Los autores agradecen a las autoridades de la Facultad de Ciencias de la Universidad Nacional de Ingeniería por su apoyo.

-
1. Jaan Kiusalaas, *Numerical Methods in Engineering with python*. Cambrige University Press **37** (2010).
 2. L.Héctor Juaréz V., *Análisis Numérico* Universidad Autónoma Metropolitana **2008** (2010).
 3. W. Kincaid, D. Cheney, *Métodos Numéricos y Computación*, sexta edición. Cengage Learning, 300-305.
 4. Walter Mora F., *Introducción a los Métodos Numéricos*, primera edición. Instituto Tecnológico de Costa Rica, 2013.
 5. Dr. Herón Morales Marchena, *Interpolación, Diferenciación e Integración Numérica*, <http://biblioteca.uns.edu.pe/saladocentes/archivoz/cuarczoz/cuaderno.2.pdf>.
 6. Pontificia Universidad Católica del Perú, 2011 *Química General*, <http://corinto.pucp.edu.pe/quimicageneral/unidades-q2/unidad-2-cinetica-quimica.html>.