

# PREDICCIÓN DE LA CONCENTRACIÓN EN UNA REACCIÓN QUÍMICA

Lázaro-Camasca<sup>1</sup>, Ponce-Pinedo<sup>2</sup>, Sarria-Palacios<sup>3</sup>, Loayza-Pizarro<sup>4</sup>

*Facultad de Ciencias<sup>1</sup>, Universidad Nacional de Ingeniería<sup>1</sup>*

Email: elazaroc@uni.pe<sup>1</sup>, victor.ponce.p@uni.pe<sup>2</sup>, esarriap@uni.pe<sup>3</sup>, fernando.loayza.p@uni.pe<sup>4</sup>

## Resumen

En diversos campos de la ingeniería y ciencia se necesita obtener datos a partir de casos experimentales. Las reacciones químicas no son ajenas a esta, por ello conocer las concentraciones de estas 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 laboratoristas 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 alimentarias los ingenieros miden las cantidades de sustancias, con el propósito de **incrementar sus ingresos económicos**. Este documento proporciona una comparación entre los métodos de ajuste exacto (Interpolación) y mínimos cuadrados (Aproximación Funcional), además sugiere que método o la combinación de ambos predice con mayor exactitud la concentración del producto.

## Palabras Clave:

Casos experimentales, Concentración, Contaminación Ambiental, Industrias, Interpolación, Aproximación Funcional.

## Abstract

Falta

## Keywords:

## 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 variados aumentan o disminuyen la velocidad.

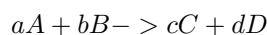
Las industrias se interesan grandemente en que las reacciones químicas se lleven a cabo rápidamente, para **ahorrar tiempo y dinero**. Es por esto que encontrar las concentraciones en un tiempo especifico es muy complicado, una posible solución seria contar con un dispositivo que registre en tiempo real las concentraciones, pero esto seria muy costoso. Una alternativa para esto es el uso de la matematica en concreto el uso de metodos numericos.

Por ello en presente trabajo se describe la obtención de una función que caracteriza la concentración de producto de una reacción química en función del tiempo. Esta función será calculada mediante métodos de interpolación polinomial y minimos cuadrados a partir puntos tabulados que han sido obtenidos de manera experimental.

## 2. CONCEPTOS PREVIOS

### 2.1. Reacciones Química

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.



### 2.1. Velocidad Instantánea de Reacción

Expresa el cambio de la concentración de un reactivo o de un producto por unidad de tiempo (concentración/tiempo).

$$v = \frac{-d[A]}{a * d[t]} = \frac{-d[B]}{b * d[t]} = \frac{-d[C]}{c * d[t]} = \frac{-d[D]}{d * d[t]}$$

### 2.2. Interpolación polinomial

Planteamos tres problemas relacionados con la aproximación de funciones

Primero, suponga que tenemos una tabla de valores numéricos de una función:

$x$	$x_0$	$x_1$	$\dots$	$x_n$
$y$	$y_0$	$y_1$	$\dots$	$y_n$

¿Es posible encontrar una fórmula simple y conveniente que reproduzca los puntos dados exactamente?

El segundo problema es similar, pero se supone que la tabla de valores numéricos dada está contaminada por errores, como puede ocurrir si los valores provienen de un experimento de física. Ahora nos preguntamos por una fórmula que represente los datos (aproximadamente) y, si es posible, filtre los errores.

Como un tercer problema, una función  $f$  está dada, quizás en la forma de un procedimiento computacional, pero es costoso evaluarla. En este caso, nos preguntamos por otra función  $g$  que sea simple de evaluar y produzca una aproximación razonable a  $f$ . A veces en este problema, queremos que  $g$  se aproxime a  $f$  con precisión total de máquina.

En todos estos problemas, se puede obtener una función simple  $p$  que represente o aproxime a la tabla o función  $f$  dadas. La representación  $p$  siempre se puede tomar como un polinomio, aunque también se pueden usar muchos otros tipos de funciones simples. Una vez que se ha obtenido una función simple  $p$ , se puede usar en lugar de  $f$  en muchas situaciones. Por ejemplo, la integral de  $f$  se podría estimar con la integral de  $p$  y, generalmente, esta última debe ser más fácil de evaluar

### 2.2.1 Polinomios de Lagrange

Suponga que queremos interpolar funciones arbitrarias en un conjunto de nodos fijos  $x_0, x_1, \dots, x_n$ . Primero definimos un sistema de  $n+1$  polinomios especiales de grado  $n$  conocidos como **polinomios cardinales** en la teoría de interpolación. Éstos se denotan por  $L_0, L_1, \dots, L_n$  y tienen la propiedad:

$$L_i(x_j) = \gamma_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases}$$

Una vez que están disponibles, podemos interpolar cualquier función  $f$  por la **forma de Lagrange de interpolación polinomial**:

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n L_i(x) f(x_i)$$

Esta función  $p_n$ , al ser una combinación lineal de los polinomios  $L_i$ , es en sí misma un polinomio de grado a lo más  $n$ . Además, cuando evaluamos  $p_n$  en  $x_i$  obtenemos  $f(x_j)$ :

$$p_n(x_j) = \sum_{i=0}^n L_i(x_j) f(x_i) = L_j(x_j) f(x_j) = f(x_j)$$

Por tanto,  $p_n$  es el polinomio de interpolación para la función  $f$  en los nodos  $x_0, x_1, \dots, x_n$ . Ahora sólo resta escribir la fórmula para el polinomio cardinal  $i$ , que es

$$L_i(x) = \prod_{j \neq i, j=0}^n \left( \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right)$$

Esta fórmula indica que  $L_i(x)$  es el producto de  $n$  factores lineales:

$$L_i(x) = \left( \frac{x - x_0}{x_i - x_0} \right) \left( \frac{x - x_1}{x_i - x_1} \right) \dots \left( \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \right) \left( \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} \right) \dots \left( \frac{x - x_n}{x_i - x_n} \right)$$

Los denominadores son sólo números; la variable  $x$  se presenta únicamente en los numeradores. Por tanto,  $L_i$  es un polinomio de grado  $n$ . Observe que cuando  $L_i(x)$  se evalúa en  $x = x_i$ , cada factor en la ecuación anterior será 1. Por tanto,  $L_i(x_i) = 1$ . Pero cuando

se evalúa  $L_i(x)$  en cualquier otro nodo, digamos,  $x_j$ , uno de los factores en la ecuación anterior será 0 y  $L_i(x_j) = 0$  para  $i \neq j$ .

### 2.2.2 Método de Newton

Supóngase que se tiene una función dada en forma tabular como se presenta a continuación

Puntos	0	1	...	n
$x$	$x_0$	$x_1$	...	$x_n$
$f(x)$	$f[x_0]$	$f[x_1]$	...	$f[x_n]$

y que se desea aproximarla preliminarmente con un polinomio de primer grado que pasa, por ejemplo, por los puntos (0) y (1). Sea además dicho polinomio de la forma:

$$p(x) = a_0 + a_1(x - x_0) \dots (*)$$

donde  $x_0$  es la abscisa del punto (0) y  $a_0, a_1$  son constantes por determinar. Para encontrar el valor de  $a_0$  se hace  $x = x_0$ , de donde  $a_0 = p(x_0) = f[x_0]$ , y fin de encontrar el valor de  $a_1$  se hace  $x = x_1$ , de donde  $a_1 = (f[x_1] - f[x_0]) / (x_1 - x_0)$ , o sea la primera diferencia dividida  $f[x_1, x_0]$ .

Al sustituir los valores de estas constantes en la ecuación (\*) ésta queda

$$p(x) = f[x_0] + (x - x_0)f[x_0, x_1]$$

o sea un polinomio de primer grado en términos de diferencias divididas. Y si ahora se desea aproximar la función tabular con un polinomio de segundo grado que pase por los puntos (0), (1) y (2) y que tenga la forma:

$$p_2(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1)$$

generalizando se puede formar para  $p_n$ .

Una observación muy importante acerca de  $p_n$  es que los coeficientes  $a_0, a_1, \dots$ , no dependen de  $n$ . En otras palabras,  $p_n$  se obtiene de  $p_{n-1}$  sumando un término

más, sin alterar los coeficientes que ya están en  $p_{n-1}$ . Este es porque comenzamos esperando que pn pudiera expresarse en la forma:

$$p_n(x) = p_{n-1}(x) + a_n(x - x_0) \dots (x - x_{n-1})$$

y descubrimos que esto de hecho era posible.

Una forma de determinar sistemáticamente los coeficientes desconocidos  $a_0, a_1, \dots, a_n$  es hacer  $x$  igual a  $x_0, x_1, \dots, x_n$  en la forma de Newton y a continuación escribimos la forma compacta de las ecuación:

$$f(x_k) = \sum_{i=0}^k a_i \prod_{j=0}^{i-1} (x_k - x_j)$$

donde  $(0 \leq k \leq n)$ .

Las ecuaciones se pueden resolver para las  $a_i$  correspondientes, iniciando con  $a_0$ . Entonces vemos que  $a_0$  depende de  $f(x_0)$ , que  $a_1$  depende de  $f(x_0)$  y  $f(x_1)$ , y así sucesivamente. En general,  $a_k$  depende de  $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$ . En otras palabras,  $a_k$  depende de los valores de  $f$  en los nodos  $x_0, x_1, \dots, x_k$ . La notación tradicional es:

$$a_k = f[x_0, x_1, \dots, x_k]$$

Esta ecuación define  $f[x_0, x_1, \dots, x_k]$ . La cantidad  $f[x_0, x_1, \dots, x_k]$  se llama **diferencia dividida de orden  $k$**  para  $f$ .

## 2.3. Mínimos Cuadrados

Hasta ahora se ha enfocado en encontrar un polinomio de aproximación que pase **por los puntos** dados en forma tabular. Sin embargo, a veces la información (dada en la tabla) tiene errores significativos. En estas circunstancias no tiene sentido pasar un polinomio de aproximación por los puntos dados, sino sólo cerca de ellos.

No obstante, esto crea un problema, ya que se puede pasar un número infinito de curvas **entre los**

**puntos**. Para determinar **la mejor** curva se establece un criterio que la fije y una metodología que la determine. El criterio más común consiste en pedir la suma de distancia calculadas entre el valor de la función que aproxima  $p(x_i)$  y el valor de la función  $f(x_i)$  dada en la tabla, sea mínima, además para evitar problemas de derivabilidad más adelante, se acostumbra utilizar las distancias  $d_i$  elevadas al cuadrado; es decir, que

$$\sum_{i=1}^m [p(x_i) - f(x_i)]^2 = \sum_{i=1}^m [d_i]^2 = \text{mínimo}$$

si queremos aproximar una función en forma tabular con un polinomio de grado  $n$ , el procedimiento es minimizar la función:

$$\sum_{i=1}^m [a_0 + a_1 x_i + \dots + a_n x_i^n - f(x_i)]^2$$

el cual se obtiene derivándola parcialmente con respecto a cada coeficiente  $a_j$ ,  $(0 < j < n)$  e igualando a cero cada una de estas derivadas, con esto se llega la siguiente sistema lineal:

$$\begin{aligned} a_0 m + a_1 \sum x + \dots + a_n \sum x^n &= \sum y \\ a_0 \sum x + a_1 \sum x^2 + \dots + a_n \sum x^{n+1} &= \sum xy \\ a_0 \sum x^2 + a_1 \sum x^3 + \dots + a_n \sum x^{n+2} &= \sum x^2 y \\ &\vdots \\ a_0 \sum x^n + a_1 \sum x^{n+1} + \dots + a_n \sum x^{n+n} &= \sum x^n y \end{aligned}$$

## 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

- Registrar puntos característicos, aquellos que tengan mayor relevancia en el proceso de experimentación, a partir de estos - Aplicaciones impactantes con interpolación y mínimos cuadrados - Investigaciones realizándose actualmente con interpolación o mínimos cuadrados La interpolación y Mínimos cuadrados son la base para muchas investigaciones en

ingeniería y ciencias como la física, química, hasta en temas más recientes como el Machine Learning, específicamente en las Redes neuronales donde se usa los mínimos cuadrados para encontrar el valor de la conexión entre neuronas al momento del entrenamiento.

- Si se tiene 2 intervalos  $[a' < b'] < [a, b]$  y se realiza la interpolación en cada una, entonces se aproxima mejor en  $[a' < b']$  que en  $[a < b]$ .

- Comparar la data de problema con otra data de mayor tamaño. - Puntos característicos: aquellos que describan mejor a la curva, puntos como el máximo, mínimo, puntos de inflexión en la función. Estos se obtienen de replicar muchas veces el experimento.

Cuando mayor es la cantidad de puntos mayor será la aproximación.

- Combinación de ambos métodos, encontrar el polinomio con interpolación polinomial, luego generamos más puntos adicionales, luego lo ajustamos con mínimos cuadrados, Tal vez genera mejores resultados.

#### 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>.