PREDICCIÓN DE LA CONCENTRACIÓN QUÍMICA UTILIZANDO INTERPOLACIÓN POLINÓMICA

Lázaro Camasca[1], Ponce Pinedo[2], Sarria Palacios[3], Loayza Pizarro[4]

Facultad de Ciencias[1], *Universidad Nacional de Ingeniería*[1]

Email: elazaroc@uni.pe[1], victor.ponce.p@uni.pe[2],correo-uni-eduardo v[3], fernando.loayza.p@uni.pe[4]

Resumen

Las matemáticas son el pilar de muchas diciplinas tales como la física, química, computación, biología, ingeniería. En concreto la **Interpolación Polinómica** permite expresar datos discretos (concentración/tiempo en este trabajo) en un polinomio aproximado, éste polinomio es muy útil ya que nos permite conocer al detalle cómo transcurre una reacción química. En medicinas, el efecto que producen decaen con el tiempo. Los químicos y biólogos miden las cantidades de monóxido y dióxido de carbono, dióxido de azufre y otros agentes contaminantes para determinar y conocer in situ los niveles de **contaminación del ambiente** del pasado o futuro.

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

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).

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.

$$aA + bB -> cC + dD$$

- **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 * d[A]/d[t] =-1/b * d[B]/d[t] =1/c * d[C]/d[t] =1/d* d[D]/d[t]

- **ORDEN DE LAS REACCIONES**

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

$$Mt^{-1}$$

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: $v = -d[A]/dt = k * [A]$ Resolviendo:

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

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

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

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

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

PARTE NUMÉRICA:

- **INTERPOLACIÓN POLINÓMICA** Dados n+1 puntos $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$ con $x_i \neq$ x$_j$, si $i \neq$j existe un único polinomio P$_n(x)$ de *grado*$\leq$ n tal que P(x$_i$) $= y_i \forall i = 0, 1, \ldots, n$.

- **Datos de Interpolación**: $(x_k, f_k), k = 0, 1, \ldots.., n$. 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. $P(x) = a_0 + a_1 x + +a_n x^n$

- **Problema de Interpolación**: Determinar los coeficientes $a0, a1, \ldots, an$ para que cumplan las condiciones de interpolación:

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

- **MÉTODOS DE INTERPOLACIÓN POLINÓMICA**
- **Método de Lagrange**: Consiste en calcular previamente los polinomios $L_i(x_i), i = 0, 1, \ldots, n$, 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:

  $P(x) = f_0L_0(x) + f_1L_1(x) + +f_nL_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f_iL_i(x)$
- **Método Serie de Potencias**: Este método construye un polinomio interpolante de orden n $P(x) = a_0+a_1*x+...+a_n*x^n$ 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:

  $P(x) = A_0+A_1(x-x_0)+A_2(x-x_0(x-x_1))\ldots+ A_(n-1)(x-x_0(x-x_1)\ldots(x-x_(n-1)))$
  Los coeficientes A_k, que se denominan diferencias divididas de la función f en los puntos $x_0, x_1, \ldots, x_k$, se denotan por $A_k = f[x_0, x_1, \ldots.., x_0]$ y se genera de forma recursiva mediante la fórmula:
  $f[x_0, x_1, \ldots.., x_0] = (f[x_1, x_2, \ldots.., x_k] - f[x_0, x_1, \ldots.., x_{k-1}])/(x_k - x_0)$ Partiendo de $f[x_0] = f(x_0)$.
  Con esta notación, el polinomio de interpolación puede escribirse como:
  $P(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_2) + \ldots. + f[x_0, x_1, \ldots, x_n](x-x_0)(x-x_1)\ldots.(x-x_{n-1})$.
- **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.
- **Interpolacion con Funciones Splines**: Sea $\triangle$ una partición del intervalo $[a.b]$. $\triangle_{:} a = x_0 < x_1 < ... < x_n = b$. Un spline es una función polinómica a trozos en cada uno de los intervalos $[x_i, x_{i+1}]$ de la partición. Notaremos por $S_m^k(\triangle)$ al conjunto de funciones de clase k que son polinomios a trozos de grado m en cada uno de los intervalos de partición:

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

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

  Notaremos: $\triangle = x_0, x_1, \ldots, x_n$ 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 $[x_i, x_{i+1}]$.

  Interpolacion con splines cúbicos: $S_3^2(\triangle)$

  Funciones interpolantes: Splines en $S_3^2(\triangle)$ 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 $s \in S_3^2(\triangle)$ tal que:

$s(x_i) = f_i, i = 0, 1, \ldots .n$, 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.

- **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) $x_0, x_1, ..., x_n$ en el intervalo [a,b]. Para cada valor fijo $x \in [a,b]$ existe $\xi(x) \in <a,b>$ tal que:

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

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 Númerico* Universidad Autónoma Metropolitana **2008** (2010).
3. W. Kincaid, D. Cheney, *Métodos Númericos 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/curzoz/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.