

1) Existen diversos algoritmos numéricos que permiten aproximar la derivada primera de una función, los más sencillos corresponden a una aproximación hacia atrás, hacia delante y central.

a) Determine el error total (redondeo más truncamiento) que introducen estos algoritmos en el

cálculo de la derivada primera de $f(x) = \sqrt{1+x^2} + \ln(x+10)$ en el intervalo $[-4,4]$.

b) Grafique el error total cometido en función del incremento (h) en escala doble logarítmica.

c) Determine el error mínimo y el valor óptimo del incremento (h) para cada uno de los algoritmos.

2) Dada la función $g(x) = \frac{1}{0.5 \cdot x \cdot \sqrt{x+\pi}}$; graficar $g(x)$, $g'(x)$ y $g''(x)$ en un mismo par de ejes

cartesianos en el intervalo $[2,10]$. Hacer uso de los métodos numéricos vistos en clase para la obtención de las derivadas.

Para $g'(x)$ utilizar una aproximación de mayor exactitud.

3) Graficar la velocidad y la aceleración de un paracaidista en caída libre a lo largo del transcurso del salto. Utilizar los datos de la distancia recorrida en función del tiempo de la siguiente tabla:

t [seg]	d [m]						
0	0.00	20	784.34	40	1846.00	60	2914.71
1	4.48	21	836.54	41	1899.41	61	2968.16
2	17.17	22	888.95	42	1952.83	62	3021.60
3	36.70	23	941.53	43	2006.25	63	3075.05
4	61.91	24	994.26	44	2059.68	64	3128.49
5	91.86	25	1047.11	45	2113.11	65	3181.93
6	125.75	26	1100.05	46	2166.54	66	3235.38
7	162.92	27	1153.08	47	2219.98	67	3288.82
8	202.81	28	1206.18	48	2273.41	68	3342.27
9	244.98	29	1259.34	49	2326.85	69	3395.71
10	289.04	30	1312.55	50	2380.29	70	3449.16
11	334.68	31	1365.79	51	2433.73		
12	381.62	32	1419.07	52	2487.17		
13	429.66	33	1472.38	53	2540.61		
14	478.60	34	1525.71	54	2594.05		
15	528.29	35	1579.06	55	2647.50		
16	578.62	36	1632.43	56	2700.94		
17	629.47	37	1685.80	57	2754.38		
18	680.75	38	1739.19	58	2807.83		
19	732.40	39	1792.59	59	2861.27		

4) Realizar las gráficas del problema anterior con aproximaciones de mayor exactitud de la derivada primera y segunda.

5) Obtener una aproximación de la derivada segunda a partir de dos puntos hacia delante ($k=1$ y $k=2$). Hallar la estimación del error de truncamiento y compararla con el valor real para la función $f(x)=x^2+3x-1$ utilizando un incremento de $h=0.01$ en $x=-2$.

6) Obtener una aproximación de la derivada primera con un error de truncamiento del orden de h^2 .

7) Estimar como se propaga un error de medición en la temperatura en el cálculo de la presión de vapor del agua utilizando la ecuación ampliada de Antoine:

$$P_v = 10^{-2} e^{\left(65.9278 - \frac{7227.53}{T} - 7.17695 \ln(T) + 4.0313 \times 10^{-6} T^2\right)}$$

La medición actual es de: $T=373.15 \pm 0.5$ K

Comparar la propagación del error con la que se obtiene para una medición de 450 K con la misma incertidumbre y completar la tabla.

	Error relativo en T $\frac{\Delta T}{T^*}$	Error relativo en P_v $\frac{\Delta P_v}{P_v^*}$
T=373.15 K		
T=450 K		

8) La siguiente expresión corresponde a la velocidad de caída de un paracaidista:

$$v(t) = \frac{gm}{c} \left(1 - e^{-(c/m)t}\right)$$

$$g=9.8, c=12.5 \pm 0.5 \text{ y } m=60 \pm 1$$

Como se observa, la medición del coeficiente de fricción (c) y de la masa (m) tiene asociado un error. Estimar cual es la propagación de error de cada una de las mediciones para un tiempo igual a 5 segundos.

Calcular el error relativo de m , c y v .

Calcular cuánto aporta cada variable al error total en v y comentar en cuál de las mediciones conviene entonces ajustar la precisión para mejorar la exactitud.

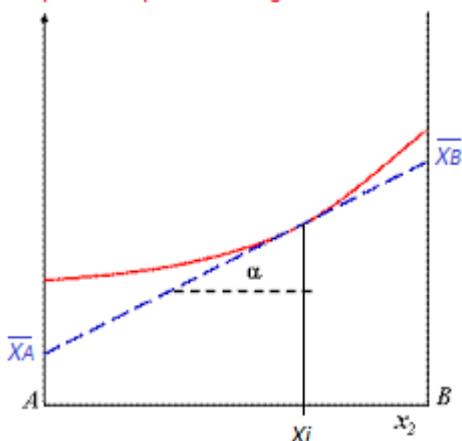
9) A partir de la ecuación de Clausius-Clapeyron y los siguientes datos experimentales, obtener una aproximación del calor de vaporización del agua a diferentes temperaturas:

$$\frac{d \ln(P)}{dT} = \frac{\Delta H_{vap}}{RT^2}$$

#	T [K]	P [bar]
1	298.1437	0.031686
2	313.1398	0.073813
3	323.1371	0.123446
4	333.1344	0.19933
5	343.1318	0.31177
6	353.1292	0.473752
7	373.1244	1.01325

10) Para calcular simultáneamente las propiedades molares parciales (V, H, G, etc) de una mezcla binaria, un método utilizado es el de las *Ordenadas al origen de la tangente*. Como requisito, es fundamental que ambas especies sean totalmente miscibles.

Propiedad X para un rango de concentraciones



El método consiste en:

- Trazar la curva de la propiedad con respecto a la fracción molar (x_i) o másica (w_i). La propiedad y la fracción deben estar en la misma base (por ej, Volumen específico vs fracción másica o Volumen molar vs fracción molar).
- Encontrar la recta tangente correspondiente a cada concentración.
- Prolongar esa recta y encontrar la intersección cuando $x=0$ y $x=1$ para la propiedad de A y B respectivamente.

Observación: tener en cuenta que este método solo debe aplicarse a mezclas binarias totalmente miscibles. En los casos donde la fracción de un componente sea igual a 1 o a 0, la propiedad parcial será la misma que la del compuesto puro.

10 – a) Grafique el volumen molar parcial de cada especie para todo rango de concentraciones de una mezcla de 1-propanol (PM 60.09 g/mol) con N,N-Dimetilformamida (PM 73.09g/mol) a 288.15K. Se sabe que ambos compuestos son los correspondientes a la Tabla 9.a. Los datos se obtienen para distintas fracciones molares de 1-propanol (X_{1-prop}).

10 – b) Se quiere determinar el Volumen Parcial de cada especie en una mezcla binaria de Agua y Etanol másicas a 298K. Haciendo un ensayo en el laboratorio se obtienen los resultados de la Tabla 9.b para distintas fracciones másicas del etanol (W_{etanol}).

Determine el volumen específico parcial de cada componente cuando la concentración de etanol es $W_{Etanol} = 0.30$. Compárelo con el volumen específico de cada uno de los componentes puros.

Tabla 9.a	
LABORATORIO	
X1-prop	ρ Mezcla g/cm3
0,0000	0,95839
0,0299	0,95485
0,0517	0,95218
0,0610	0,95102
0,0701	0,94987
0,0884	0,94753
0,0999	0,94604
0,1499	0,93945
0,2000	0,93269
0,3045	0,91821
0,4001	0,90466
0,5012	0,89007
0,6013	0,87533
0,7002	0,86041
0,7999	0,84489
0,8999	0,82867
1,0000	0,81152

Tabla 9.b	
LABORATORIO	
WEtanol	ρ Mezcla g/cm3
0,00	1,00000
0,05	0,99106
0,10	0,98330
0,20	0,96922
0,30	0,95345
0,40	0,93421
0,50	0,91251
0,60	0,88959
0,70	0,86593
0,80	0,84157
0,90	0,81600
0,96	0,79939
0,99	0,79045
1,00	0,78736

11) La velocidad de reacción (r) de un compuesto en un volumen constante se define como la velocidad de aparición o desaparición del compuesto con respecto al tiempo. En una reacción a volumen constante de la forma $aA \rightarrow bB$:

- Para el reactivo, la velocidad será:

$$r_A = -\frac{dC_A}{dt} \text{ o } (-r_A) = \frac{dC_A}{dt} \text{ (el signo menos se agrega para evitar trabajar con velocidades negativas)}$$

- Para el producto:

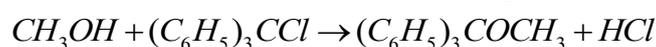
$$r_B = \frac{dC_B}{dt}$$

Estas se relacionan mediante la siguiente expresión:

$$\frac{(-r_A)}{a} = \frac{r_B}{b}$$

La experiencia se realiza en el laboratorio, se toman muestras a diferentes tiempos, se analiza la concentración del compuesto en la muestra mediante titulación u otro método y se anotan los valores obtenidos en una tabla.

11 – a) La reacción en fase líquida de metanol con trifenilo tiene lugar en un reactor intermitente a 25°C.



Para una alimentación equimolar se obtuvieron los siguientes datos de concentración-tiempo para metanol.

$C_{\text{metanol}} \text{ (mol/dm}^3\text{)}$	0.1	0.0847	0.0735	0.0526	0.0357
$t \text{ (h)}$	0	1	2	5	10

Grafique la velocidad de desaparición del etanol con respecto al tiempo.

¿Se puede calcular con los datos obtenidos la velocidad de aparición del producto de esta reacción? En ese caso grafique dicha velocidad de reacción.

11 – b) Para la reacción del ácido sulfúrico con sulfato de dietilo en solución acuosa a 22.9 °C



M. Hellin y J. C. Jungers. Bull. soc.chim. France. 386. determinaron los datos de la tabla.

Las concentraciones iniciales de H_2SO_4 y $(C_2H_5)_2SO_4$ son en ambos casos 5.5 mol/litro.

a) Calcular la velocidad de reacción del H_2SO_4 .

t (min)	0	41	48	55	75	96	127	146	162	180	194	212	267	318	368	379	410
$C_{C_2H_5SO_4H}$ (mol/L)	0	1.18	1.39	1.63	2.24	2.75	3.31	3.76	3.81	4.11	4.31	4.45	4.86	5.15	5.32	5.35	5.42

12) Crear una **function** de SCILAB que resuelva un sistema de ecuaciones lineales utilizando como argumentos de entrada las matrices de la descomposición PLU y el vector de términos independientes del sistema. La **function** internamente deberá implementar los algoritmos de sustitución hacia atrás y adelante. Corroborar su correcto funcionamiento con algún ejemplo.

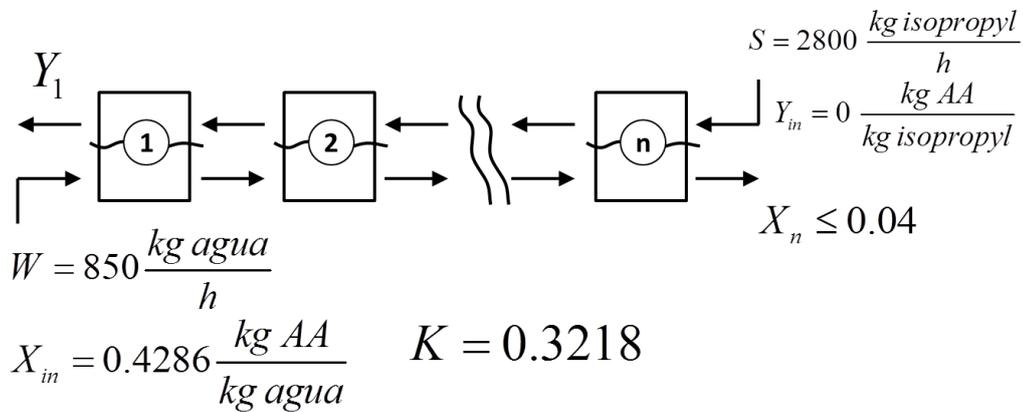
Ayuda: La función es del tipo $x=PLU(P,L,U,b)$

13) Crear una **function** de SCILAB que resuelva un sistema de ecuaciones lineales utilizando el método de Thomas. Recordar que este algoritmo solo se aplica cuando la matriz de coeficientes es tridiagonal en banda.

Ayuda: la función es del tipo $x = Thomas(A,b)$

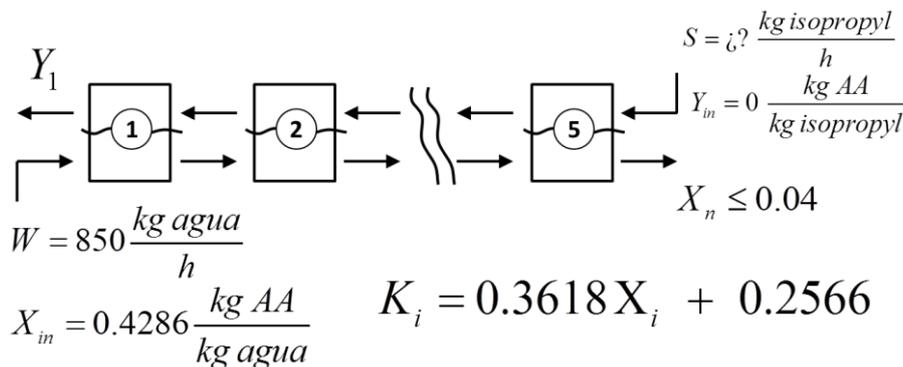
14) Se requiere tratar una corriente de agua para poder reducir su contenido de ácido acético. Para esto se pondrá en contacto con una corriente de isopropilo en un extractor en etapas.

a) Utilizar la **function** Thomas.m creada en el ejercicio anterior para encontrar la cantidad de etapas necesarias para el extractor líquido-líquido de la siguiente figura.



- b) Luego de una nueva regulación ambiental se dispone que la salida del equipo debe contener menos de 0.02 kg de ácido acético por cada kg de agua. ¿Cuál será el número de etapas necesario en este caso?
- c) Analice cómo puede solucionar este problema para poder seguir usando el equipo inicial con el que contaba la planta a pesar de que la regulación cambie. Pruebe en el programa armado qué otro parámetro puede variar el ingeniero de procesos en este caso para mantener el número de etapas inicial. Explique cómo se le ocurre que este cambio puede llevarse a cabo en la realidad.

- 15) Utilizando la **function** Thomas.m creada anteriormente, encontrar el caudal de solvente necesario para el extractor liq-liq de la siguiente figura.



- 16) Un investigador ha realizado un experimento para determinar la tasa de crecimiento de las bacterias k (por d), como una función de la concentración de oxígeno c (mg / L). Ajustar los datos experimentales obtenidos a la siguiente ecuación propuesta y calcular la norma del residuo.

c	0.5	0.65	0.8	1.1	1.5	2.5	4
k	1.1	1.6	2.4	3.2	5.3	7.6	8.9

$$k = \frac{k_{\max} c^2}{c_s + c^2}$$

- 17) Al examinar el comportamiento viscoso de un fluido es práctica común graficar la tasa de corte

(gradiente de velocidad) $\frac{dv}{dy} = \gamma$ en las abscisas versus el esfuerzo cortante (τ) en las ordenadas.

- Cuando un fluido muestra un comportamiento en línea recta entre esas dos variables, se denomina *fluido newtoniano*, y la relación resultante es

$$\tau = \mu\gamma$$

Donde μ es la viscosidad del fluido. Los fluidos que no se comportan de esa manera se llaman *no newtonianos*.

- Para los *plásticos Bingham*, hay un esfuerzo inducido τ_y que debe superarse para que el flujo comience

$$\tau = \tau_y + \mu\gamma$$

- Para los *seudoplásticos*, el esfuerzo cortante se eleva a la potencia n ,

$$\tau = \mu\gamma^n$$

Los datos siguientes muestran la relación entre el esfuerzo cortante y la tasa de tensión cortante para un fluido. Proponga un modelo de los anteriores que represente el comportamiento de este fluido y obtenga los valores de los parámetros correspondientes.

Esfuerzo τ	50	70	90	110	130
Tasa de tensión cortante γ	6.01	7.48	8.59	9.19	10.21

18) En un trabajo reciente se han publicado los datos tabulados a continuación. Encontrar los parámetros de ajuste de la función propuesta por los autores:

x	1	2	3	4	5
y	0.5	2	2.9	3.5	4

$$x = e^{(y-b)/a}$$

19) Ajustar los datos tabulados la siguiente ecuación:

x	0.5	1	2	3	4
y	10.4	5.8	3.3	2.4	2

$$y = \left(\frac{a + \sqrt{x}}{b\sqrt{x}} \right)^2$$

20) Ajustar los datos tabulados la siguiente ecuación:

x	1	2	3	4	5
y	2.2	2.8	3.6	4.5	5.5

$$y = a + bx + \frac{c}{x}$$

21) Los siguientes datos corresponden al calor de vaporización del Etanol. Obtener los parámetros de la ecuación modificada de Watson.

$T [K]$	298.15	320.03	334.87	351.4	413.85	469.2
$\Delta H [J/mol]$	42300	41031	39994	38600	31953	22574

$$\Delta H_v = A \left(1 - \frac{T}{513.92} \right)^n$$

22) Los siguientes datos corresponden a la viscosidad de Acetona en estado líquido. Obtener los parámetros de la ecuación de Vogel.

$T [K]$	183	213	273	303	333
$\eta [cP]$	2.075	0.982	0.389	0.292	0.226

$$\ln \mu_l = A + \frac{B}{T + C}$$

23) Majer and Svoboda (1985) recomiendan la siguiente ecuación para representar el calor de vaporización de compuestos puros:

$T [K]$	298.15	337.15	393.25	416.85	443.35	476.85
$\Delta H [J/mol]$	37450.8	35281.6	30949	28550	25236	19616

$$\Delta H_v = A(1 - T_r)^\beta e^{-\alpha T_r}$$

Los datos corresponden al Metanol ($T_c=512.64$)

24) Encontrar los parámetros de la ecuación de Antoine que mejor se ajusten a los datos experimentales de la piperidina (Blanco et al.1994).

$T [K]$	339.35	339.70	344.50	350.25	352.50	354.90	357.5	359.05	360.55
$P_v [kPa]$	26.44	26.66	32.17	39.57	42.84	46.61	50.75	53.55	56.22

$$\ln(P) = A - \frac{B}{T + C}$$

25) Seleccionar datos de presión de vapor (vapor pressure) de alguno de los compuestos disponibles en la siguiente web: <http://www.ddbst.com/en/EED/PCP/PCPindex.php>

Se deben utilizar datos de vapor y líquido en equilibrio. Ajustar los valores experimentales a la ecuación de Antoine.

26) Silva y Weber reportan valores de la presión de vapor para el refrigerante R152a. Ajustar los datos experimentales a la siguiente ecuación propuesta por los autores:

$$\ln\left(\frac{P}{P_c}\right) = \frac{T_c}{T} (k_1 R + k_2 R^{1.5} + k_3 R^{2.5} + k_4 R^5)$$

donde: $R = 1 - \frac{T}{T_c}$; $P_c = 4514.73 \text{ kPa}$ y $T_c = 386.41 \text{ K}$

Presión de vapor del R152a

T [K]	P [kPa]	T [K]	P [kPa]	T [K]	P (kPa)
219.921	22.723	237.938	60.052	256.519	138.939
223.082	27.322	239.528	64.912	258.11	148.355
224.67	29.885	241.295	70.666	259.745	158.511
225.959	32.125	242.822	75.955	261.31	168.744
227.85	35.645	244.149	80.807	262.679	178.124
229.278	38.501	245.844	87.351	264.757	193.084
230.924	42.018	247.489	94.123	266.603	207.226
232.567	45.792	249.262	101.864	268.321	221.084
234.081	49.497	250.77	108.836	268.206	220.076
235.54	53.303	250.126	105.788	269.918	234.549
234.902	51.588	251.534	112.496	271.573	249.218
236.496	55.911	253.219	120.958	273.139	263.726
236.059	54.7	254.768	129.162		

27) Para el cálculo de la densidad de un líquido en ebullición (Metanol) suele utilizarse la siguiente variante de la ecuación de Rackett:

$$\rho = AB \left(1 - \frac{T}{512.598}\right)^n$$

En la siguiente tabla se muestra un conjunto de valores experimentales ([fuente](#)).

Densidad del Metanol liquido en ebullición

T [K]	ρ [g/ml]	T [K]	ρ [g/ml]	T [K]	ρ [g/ml]	T [K]	ρ [g/ml]	T [K]	ρ [g/ml]	T [K]	ρ [g/ml]
180	0.9	363.15	0.722	273.15	0.81	483.15	0.525	494.178	0.481	480	0.527
190	0.89	373.15	0.711	283.15	0.801	493.15	0.49	501.279	0.449	490	0.495
200	0.879	383.15	0.699	293.15	0.791	498.15	0.467	506.223	0.417	500	0.452
210	0.87	393.15	0.687	303.15	0.782	503.15	0.441	509.029	0.385	510	0.372
220	0.86	403.15	0.675	313.15	0.774	505.15	0.429	510.633	0.352	298.12	0.787
230	0.85	413.15	0.661	323.15	0.765	507.15	0.414	512.001	0.32	322.83	0.763
240	0.841	423.15	0.647	333.15	0.755	509.15	0.395	330	0.756	342.83	0.743
250	0.831	433.15	0.631	343.15	0.746	510.15	0.385	340	0.742	362.9	0.722
260	0.822	443.15	0.615	353.15	0.735	511.15	0.371	350	0.735	381.6	0.7
270	0.813	453.15	0.596	363.15	0.725	511.65	0.363	360	0.724	402.34	0.676
280	0.804	463.15	0.575	373.15	0.714	403.161	0.672	370	0.713	411.61	0.649
290	0.794	473.15	0.551	383.15	0.702	413.166	0.657	380	0.701	441.9	0.617
300	0.785	375.748	0.707	393.15	0.69	423.17	0.642	390	0.689	463.06	0.576
310	0.775	424.224	0.645	403.15	0.677	433.175	0.626	400	0.676	478.62	0.539
320	0.766	442.521	0.615	413.15	0.664	443.179	0.608	410	0.662	488.86	0.506
298.15	0.787	448.744	0.603	423.15	0.649	453.184	0.589	420	0.645	510.898	0.355
313.15	0.772	474.525	0.546	433.15	0.634	463.188	0.568	430	0.633		
323.15	0.763	484.996	0.516	443.15	0.616	473.193	0.545	440	0.616		
333.15	0.753	496.354	0.473	453.15	0.598	483.197	0.517	450	0.597		
343.15	0.743	504.367	0.43	463.15	0.577	493.201	0.481	460	0.577		
353.15	0.732	508.505	0.397	473.15	0.553	503.204	0.432	470	0.554		

- Ajustar el modelo para $n=0.2745$ y para $n=0.2385$.
- ¿Cuál de los dos valores propuestos de n realiza un mejor ajuste?

28) Proponer un valor de n que mejore el ajuste obtenido en el ejercicio anterior.

29) El reactivo A se descompone en un reactor intermitente: $A \rightarrow \text{productos}$. Se mide la concentración de A en el reactor a varios tiempos con los resultados que se muestran en la tabla. Se proponen dos modelos para representar los datos. Indique cuál de los dos modelos es más adecuado a los datos y calcule sus parámetros.

TIEMPO	CONCENTRACIÓN
t (s)	Ca (mol/L)
0	10
20	8
40	6
60	5
120	3
180	2
300	1

Modelo $n=1$:

$$\ln(Ca) = B - k * t$$

Modelo $n=1,5$:

$$\frac{1}{Ca^{0,5}} = B + k * t * 0,5$$

Para ambos casos se considera $x = \begin{pmatrix} B \\ k \end{pmatrix}$

30) La isomerización irreversible $A \rightarrow B$ se efectúa en un reactor batch y los datos de concentración-tiempo que se obtienen son:

t (min)	0	3	5	8	10	12	15	17.5
Ca(mol/dm ³)	4.0	2.89	2.25	1.45	1.0	0.65	0.25	0.07

Se investiga que el comportamiento de esta reacción se ajusta a una cinética del tipo

$$-r_a = k \cdot C_a^n$$

Donde $-r_a$ es la velocidad de desaparición de A, k es la velocidad de reacción específica y n es el orden de reacción.

- Calcule los parámetros del modelo propuesto usando los datos experimentales de la tabla para calcular la velocidad $-r_a$.
- Se cree que el técnico cometió un error de dilución en la concentración medida a 17.5 minutos. Con ayuda de las respuestas del apartado a) comente si cree que esta sospecha puede ser cierta.
- Se encuentra en cierta fuente que los valores de regresión obtenidos fueron $k=0.2$ y $n=0.5$. ¿Son estos valores mejores a los obtenidos? Justifique. En casos de que estos sean mejores analice los pasos seguidos para la obtención de los parámetros e identifique dónde podría estar la mayor causa de error.

Basado en Fogler, *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas tercera edición (2001)*, P5-3, página 270.

Ejercitación adicional

EN1: Dado el polinomio:

$$P(x) = 25x^3 - 6x^2 + 7x$$

Utilice aproximaciones en diferencias finitas hacia adelante, hacia atrás de orden h y centradas de orden h^2 para:

- Estimar la primera derivada de $P(x)$ en $x = 2$ y el error absoluto exacto de truncamiento evaluándolo como $|E_{trunc. \text{ exacto}}| = |P'_{\text{ exacta}} - P'_{\text{ numérica}}|$. Utilice un incremento $h = 0.25$.
- Evaluar los errores de truncamiento en $x = 2$ utilizando las expresiones analíticas que surgen de las deducciones de los respectivos algoritmos, utilizando desarrollos en Series de Taylor.
- Compare los resultados obtenidos y concluya.

EN.2: Deduzca una aproximación de orden h^2 de $f'(x_0)$ utilizando los puntos:

$$x_0 \qquad x_1 = x_0 + h \qquad x_2 = x_0 + 2h$$

- ¿Cuál es el error que se comete al utilizar esta fórmula (incluidos el error de truncamiento y el error de redondeo)?

EN.3: La ley de Stefan Boltzmann se emplea para estimar la tasa de energía radiante H emitida desde una superficie, así: $H = Ae\sigma T^4$ donde H se expresa en Watts, A representa la superficie radiante expresada en m^2 , e la emisividad que caracteriza a las propiedades emisivas de la superficie (adimensional), $\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$ es una constante universal denominada constante de Boltzmann y T la temperatura absoluta expresada en grados Kelvin (K).

- Utilice el desarrollo en serie de Taylor para calcular el error aproximado $\Delta H_{\text{aprox.}}$ que se comete en la determinación de H para un plato de acero de superficie $A = 0.15 \text{ m}^2$, $e = 0.90$ y $T = (650 \pm 25)$

$$K. \text{ Comparar el resultado con el error exacto } \Delta H|_{\text{verdadero}} = \frac{H(T_0 + \Delta T) - H(T_0 - \Delta T)}{2}$$

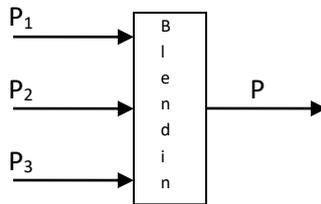
- Repetir el cálculo con $T = (650 \pm 50) \text{ K}$
- Interprete los resultados.

- Utilice el desarrollo en serie de Taylor para calcular el error aproximado $\Delta H_{\text{aprox.}}$ que se comete en la determinación de H para una esfera de cobre de radio $r = (0.15 \pm 0.02) \text{ m}$, $e = (0.90 \pm 0.05)$ y $T = (550 \pm 25) \text{ K}$.

- Comparar el resultado con el error exacto:

$$\Delta H|_{\text{verdadero}} = \frac{H(r_0 + \Delta r, e_0 + \Delta e, T_0 + \Delta T) - H(r_0 - \Delta r, e_0 - \Delta e, T_0 - \Delta T)}{2}$$

EL.1: Dadas tres corrientes provenientes de diferentes líneas de producción se desea mezclarlas para obtener un único producto que cumpla con las especificaciones requeridas.



La descarga (P) debe tener un flujo másico de 32 kg/h, 84 kg/h y 34 kg/h de componentes A, B y C respectivamente. Según análisis realizados, la composición (fracción de masa) de cada corriente que ingresa es:

$$A_{P1} = 0.2; B_{P1} = 0.6 \text{ y } C_{P1} = 0.2$$

$$A_{P2} = 0.4; B_{P2} = 0.6 \text{ y } C_{P2} = 0$$

$$A_{P3} = 0.1; B_{P3} = 0.5 \text{ y } C_{P3} = 0.4$$

Se desea determinar qué cantidad de cada corriente debe ingresar al equipo para obtener el producto deseado.

- Realice un balance de materia por componentes para obtener el SEAL que representa al equipo. Exprese el sistema de ecuaciones en forma matricial.
- Resuelva utilizando la descomposición PLU de la matriz A de coeficientes del SEAL:

La descomposición PLU de la matriz A es:

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & -1 & 1 \end{pmatrix} U = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & \frac{3}{5} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{5} & -\frac{1}{15} \\ 0 & 0 & \frac{1}{6} \end{pmatrix}$$

$$A = P \times L \times U$$

EL.2: Es el comienzo de la pandemia y te estás preparando para volver a casa. Mirando alrededor de tu cocina descubres que te sobran cuatro tazas de manteca, ocho tazas de harina y cuatro tazas de azúcar, así como una selección bastante buena de especias. Si bien estás feliz de llevar las especias de vuelta a casa (¡son bastante caras en estos días!), deseas deshacerte del resto de los ingredientes horneando galletas para tus amigos. Al revisar tu ejemplar del libro *El Placer de Cocinar*, encontraste las siguientes recetas de galletas, con los ingredientes necesarios:

Mantecadas: 1 taza de mantequilla, 2 tazas de harina, 1/2 taza de azúcar

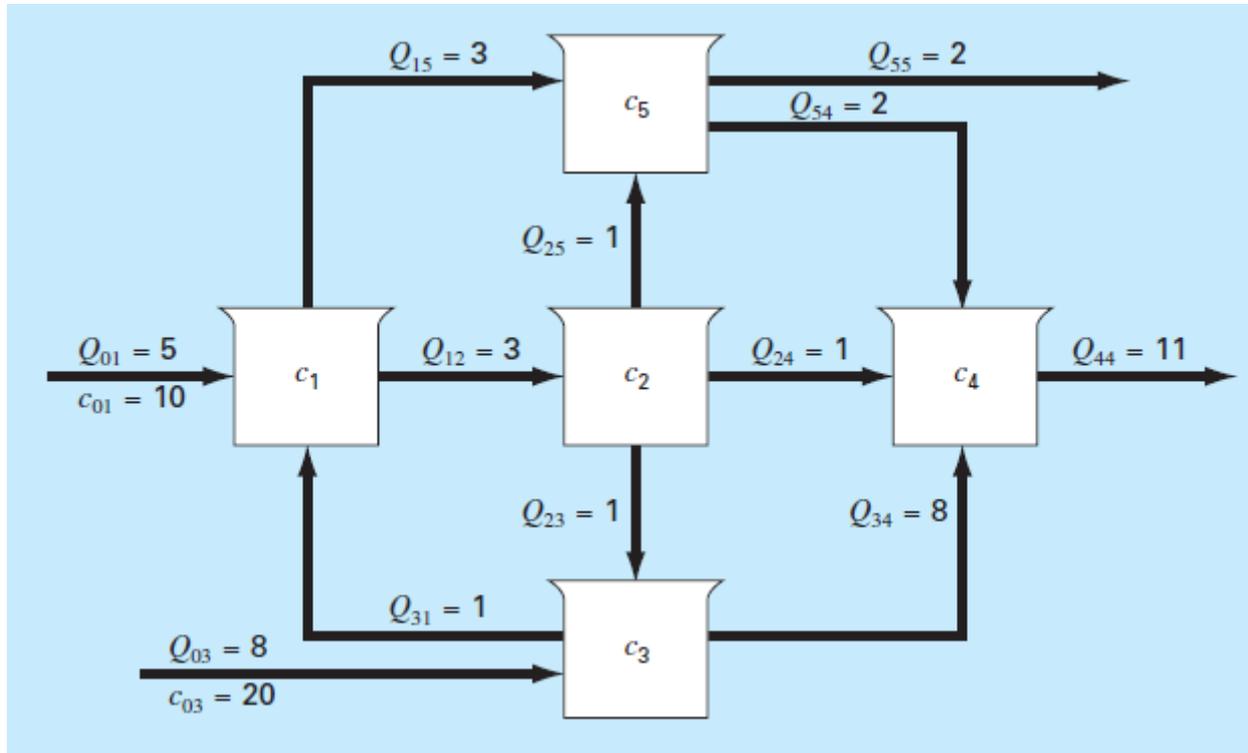
Roll cookies: 1/2 taza de mantequilla, 2 1/2 tazas de harina, 1/2 taza de azúcar

Brandy snaps: 1/2 taza de mantequilla, 1 taza de harina, 3/4 taza de azúcar

Plantea este problema como un problema de la forma $A \cdot x = b$ y resuélvelo usando eliminación Gaussiana con pivoteo parcial. Descubres que tienes todas las especias adicionales que requieren estas recetas. ¿Cuántas recetas de cada tipo de galleta se necesita hacer para consumir exactamente toda la mantequilla, harina y azúcar?

EL.3: Una familia tiene tres hijos, Jorge, Isabel y Alfredo. Si la suma de sus edades es 27, Alfredo es cuatro años mayor que Isabel y Jorge tiene la mitad de edad que la suma de las edades de Alfredo e Isabel, ¿Cuáles son las edades de los tres niños? Plantee este problema como un SEAL de la forma $A x = b$ y resuélvalo usando eliminación Gaussiana.

EL.4: Dada la configuración de reactores de la Figura:



con dos tubos de entrada y dos tubos de salida donde los caudales Q están en metros cúbicos por minuto, y las concentraciones c están en miligramos por metro cúbico.

- Efectúe un balance de materia suponiendo mezcla perfecta y que los reactores operan en estado estacionario.
- Utilizando la factorización LU de la matriz de coeficientes A del SEAL, determine las concentraciones de cada reactor. La factorización LU de A ha suministrado las siguientes matrices:

$$A = \begin{bmatrix} 6 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -3 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 9 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -8 & 11 & -2 \\ -3 & -1 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3} & -\frac{49}{53} & 1 & 0 \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{3} & -\frac{4}{53} & 0 & 1 \end{bmatrix}; U = \begin{bmatrix} 6 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{53}{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 11 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

Ayuda: El balance de materia obtenido es

$$\begin{aligned} 6c_1 - c_3 &= 50 \\ -3c_1 + 3c_2 &= 0 \\ -c_2 + 9c_3 &= 160 \\ -c_2 - 8c_3 + 11c_4 - 2c_5 &= 0 \\ -3c_1 - c_2 + 4c_5 &= 0 \end{aligned}$$

RL.1: Los siguientes datos representan la temperatura como una función de la profundidad vertical dentro de un lago.

Z (m)	0.1	0.8	3.6	12.0
T (°C)	21.2	27.3	31.80	35.6

Se desea ajustar los datos a una apropiada curva de tendencia. Para este propósito se proponen dos modelos o expresiones funcionales de la dependencia de la temperatura con la profundidad de lago:

(1) Lineal: $T = a + bz$

(2) Logarítmica: $T = a + b \ln(z)$

- d) Escriba el problema de mínimos cuadrados para ambos modelos, identificando claramente la matriz de las funciones de modelización, el vector de parámetros y el vector de términos independientes (valores medidos).
- e) Resuelva el problema de mínimos cuadrados aplicando la factorización QR de la matriz A de funciones de modelización. Ayuda: La factorización QR generó las matrices:

$$Q_1 = \begin{pmatrix} -0.5000 & -0.4253 & -0.5053 & -0.5601 \\ -0.5000 & -0.3514 & -0.0821 & 0.7873 \\ -0.5000 & -0.0555 & 0.8254 & -0.2562 \\ -0.5000 & 0.8322 & -0.2379 & 0.0290 \end{pmatrix}; R_1 = \begin{pmatrix} -2.0000 & -8.2500 \\ 0 & 9.4630 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

y

$$Q_2 = \begin{pmatrix} -0.5000 & 0.7307 & 0.0793 & 0.4580 \\ -0.5000 & 0.1491 & -0.4887 & -0.6992 \\ -0.5000 & -0.2716 & 0.7840 & -0.2483 \\ -0.5000 & -0.6083 & -0.3745 & 0.4896 \end{pmatrix}; R_2 = \begin{pmatrix} -2.0000 & -0.6201 \\ 0 & -3.5753 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

correspondientes a los modelos (1) y (2), respectivamente.

- f) A partir de los datos presentados, determine cual modelo presenta un mejor ajuste desde el punto de vista de los mínimos cuadrados.

RL.2: Se desea determinar las constantes a , b y E que mejor ajusten a la siguiente ecuación:

$$k = aT^b e^{-\frac{E}{RT}}$$

empleando los siguientes datos:

T [°K]	k
273	0.682
298	1.973
305	2.580
315	3.711
323	4.891

- Muestre como puede convertir el problema (modelo) a una forma lineal, identificando claramente los nuevos parámetros y funciones de modelización.
- Escriba el problema de mínimos cuadrados en la forma matricial dada en clase, presentando explícitamente a la matriz A y al vector b .
- Transforme este problema a ecuaciones normales (Ayuda: Este nuevo problema deberá conducirnos a un sistema cuadrado de ecuaciones lineales de 3 x 3).
- Resuelva este problema por eliminación Gaussiana.

Nota: $R = 1.98$ [cal/mol-°K]

RL.3: Se propone correlacionar los datos de transferencia calórica a una esfera por convección forzada a través de la siguiente ecuación:

$$Nu = 2 + a(Re)^n$$

donde Nu representa al número de Nusselt y Re al número de Reynolds.

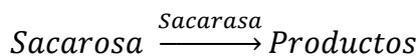
Para la transferencia de calor por convección forzada de aire a esferas se obtuvieron los siguientes datos (McAdams, 1954):

Re	Nu
10	2.8
100	6.3
1000	19.0

- Muestre como puede convertir el problema (modelo) a una forma lineal, identificando claramente los nuevos parámetros y funciones de modelización.
- Escriba el problema de mínimos cuadrados en la forma matricial dada en clase, presentando explícitamente a la matriz A y al vector b .

- c) Transforme este problema a ecuaciones normales (Ayuda: Este nuevo problema deberá conducirnos a un sistema cuadrado de ecuaciones lineales de 2×2).
- d) Resuelva este problema por eliminación Gaussiana.

RL.4: La sacarosa se hidroliza por la acción catalítica de la enzima sacarasa:



En un reactor discontinuo se han obtenidos datos de concentración de sacarosa vs. tiempo.

Tiempo (hr.)	Ca (mmol/lit.)
0	1
1	0,84
2	0,68
3	0,54
4	0,39
5	0,27

Estos datos sirven para ajustar una ecuación cinética del tipo Michaelis-Menten:

$$-r_A = \frac{k_1 C_A}{1 + k_2 C_A}$$

Para esto necesitamos los datos de velocidad de reacción frente a la concentración. La velocidad de reacción, r_A , es la derivada de la concentración con respecto al tiempo.

- Obtenga los datos de velocidad de reacción vs concentración derivando numéricamente estos valores. Utilice la *derivada hacia adelante* para el primer punto, la *derivada hacia atrás* para el último y la *central* para los puntos intermedios.
- Muestre como puede convertir el problema (modelo) a una forma lineal identificando claramente los nuevos parámetros y funciones de modelización.
- Escriba el problema de mínimos cuadrados en la forma matricial dada en clase, presentando explícitamente la matriz **A** y el vector **b**.
- Transforme el problema a ecuaciones normales.
- Obtenga los valores de las constantes cinéticas k_1 y k_2 resolviendo el problema eliminación Gaussiana.