

# Fundamentos Parte II

Enrique E. Tarifa, Facultad de Ingeniería, UNJu

# Mapa curricular de la materia

Simulación



Optimización

# Mapa curricular de la materia

Simulación



Optimización

# Mapa curricular de Simulación

Definiciones

Modelo de espacio de estados

Resolución de modelos

Simulación de plantas

# Mapa curricular de Simulación

Definiciones

Modelo de espacio de estados

Resolución de modelos

Simulación de plantas

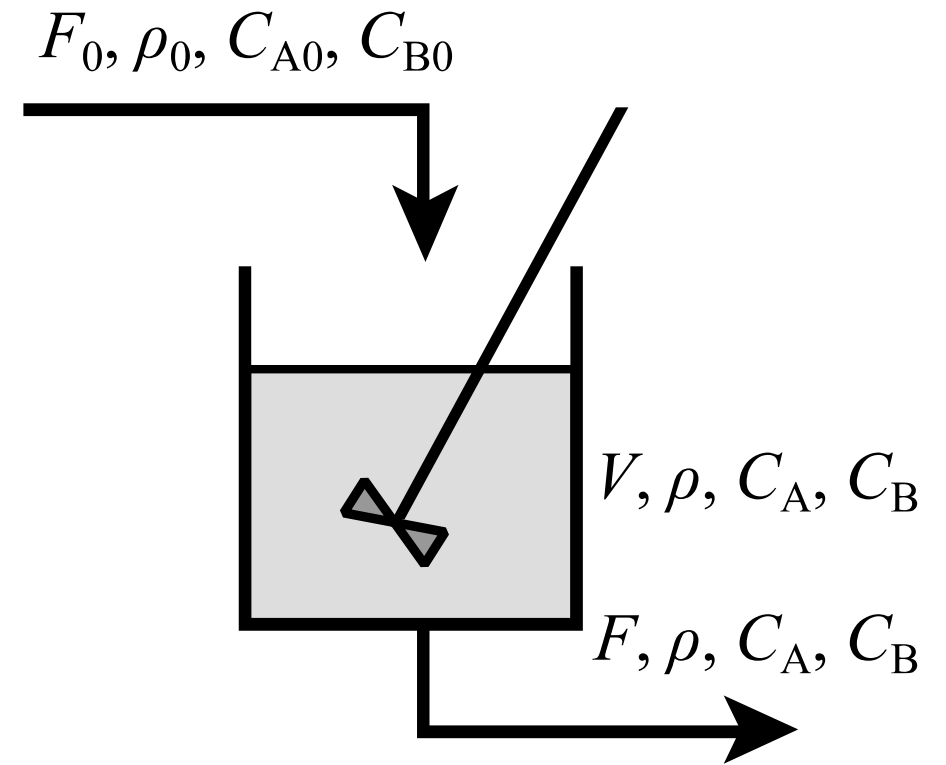
# Mapa curricular de modelado

1. Balance de componentes
2. Dependencia lineal
3. Variación de concentración
4. Análisis dinámico cualitativo
5. Medidas de concentración
6. Mal uso de la IA

Balances de componentes en un  
sistema con parámetros  
concentrados

# Balance de componente

- {vel. de acumulación del comp.} =  
{velocidad de entrada del comp.}  
+ {velocidad de generación del comp.}  
- {velocidad de salida del comp.}
- [materia]/[tiempo]: mol/h
- NC o NC - 1 y el balance de materia global.

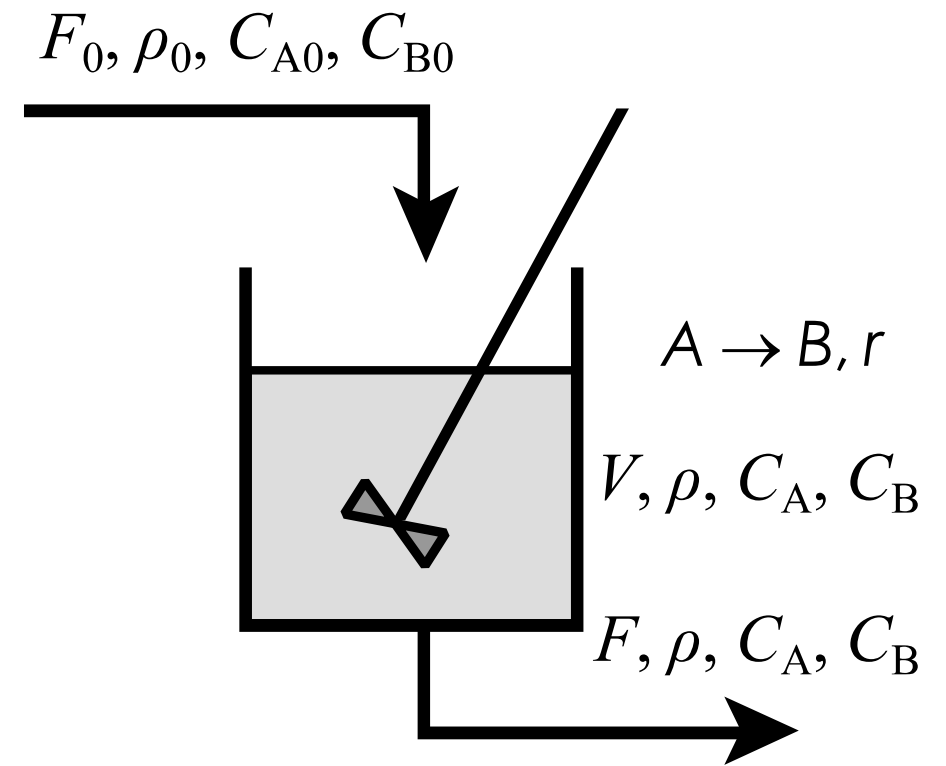


# Balance de componente

- {vel. de acum.} =  $\frac{d(V C_A)}{dt}$
- {vel. de entrada} =  $F_0 C_{A0}$
- {vel. de gener.} =  $V r_A = -V r$
- {vel. de salida} =  $F C_A$

$$\frac{d(V C_A)}{dt} = F_0 C_{A0} - V r - F C_A = 0$$

$$\frac{d(V C_j)}{dt} = \sum_{\forall i \in E} F_i C_{i,j} + V \sum_{\forall k \in R} \alpha_{j,k} r_k - C_j \sum_{\forall i \in S} F_i$$



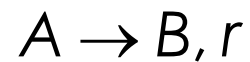
# Dependencia lineal

# Dependencia lineal

$$\begin{array}{l} f(x) = 0 \\ g(x) = 0 \end{array} \quad \longrightarrow \quad h(x) = af(x) + bg(x)$$

$$h(x) = \sum_{i=1}^n w_i f_i(x)$$

# Dependencia lineal del balance de materia



$$PM_A C_A + PM_B C_B = \rho$$

$$PM_A = PM_B$$

$$PM_A \left\{ \frac{d(V C_A)}{dt} = F_0 C_{A0} - V r - F C_A \right\}$$
$$+ PM_B \left\{ \frac{d(V C_B)}{dt} = F_0 C_{B0} + V r - F C_B \right\}$$

---

$$\frac{d(V \rho)}{dt} = F_0 \rho_0 - F \rho$$

# Dependencia lineal del balance de materia

$$\sum_{\forall j \in C} PM_j \frac{d(V C_j)}{dt} = \sum_{\forall j \in C} PM_j \left( \sum_{\forall i \in E} F_i C_{i,j} + V \sum_{\forall k \in R} \alpha_{j,k} r_k - C_j \sum_{\forall i \in S} F_i \right)$$

$$\sum_{\forall j \in C} PM_j C_{i,j} = \rho_i$$

$$\sum_{\forall j \in C} \alpha_{j,k} PM_j = 0$$

$$\frac{d(V \rho)}{dt} = \sum_{\forall i \in E} F_i \rho_i - \rho \sum_{\forall i \in S} F_i$$



$$-3PM_A + 2PM_B + PM_C = 0$$

# Variación de C

# Variación de la propiedad intensiva

$$\frac{d(V C_A)}{dt} = F_0 C_{A0} - V r - F C_A$$

$$\frac{d(V \rho)}{dt} = F_0 \rho_0 - F \rho$$

$$\rho_0 = \rho$$

$$\frac{d\rho}{dt} = 0$$

$$V \frac{dC_A}{dt} + C_A \frac{dV}{dt} = F_0 C_{A0} - V r - F C_A$$

$$-\frac{C_A}{\rho} \left\{ V \frac{d\rho}{dt} + \rho \frac{dV}{dt} = F_0 \rho_0 - F \rho \right\}$$

$$V \frac{dC_A}{dt} - V \frac{C_A}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = F_0 \left( C_{A0} - C_A \frac{\rho_0}{\rho} \right) - V r$$

$$V \frac{dC_A}{dt} = F_0 (C_{A0} - C_A) - V r$$

# Análisis dinámico cualitativo

- Estado estacionario:
  - $dC_A/dt = 0$
- Disminuye  $F_0$ :
  - Disminuye  $C_A(-)$ .

$$V \frac{dC_A}{dt} = F_0 (C_{A0} - C_A) - Vr = 0$$

$< 0$     $> 0$     $< 0$

$< 0$

# Análisis dinámico cualitativo

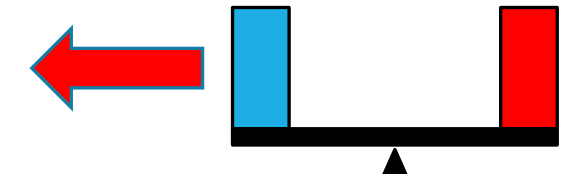
- Estado estacionario:
  - $dC_A/dt = 0$
- Propagación rápida en AEs.
- Aumenta  $x$ , dado  $F_0 = kx$ :
  - Aumenta  $C_A(+)$ .

$$v \frac{dC_A}{dt} = F_0 (C_{A0} - C_A) - Vr = 0$$

The diagram illustrates the dynamic analysis of a system. The equation  $v \frac{dC_A}{dt} = F_0 (C_{A0} - C_A) - Vr = 0$  is shown with brackets under each term. Below the equation, a diagram shows a seesaw with a blue block on the left and a red block on the right. A red arrow points left from the blue block, labeled  $> 0$ . The blue block is labeled  $> 0$ , and the red block is labeled  $< 0$ .

# Análisis dinámico cualitativo

- Estado estacionario:
  - $dC_A/dt = 0$
- Propagación lenta en ODEs y PDEs.
- Disminuye  $F$ , dado  $\frac{dV}{dt} = F_0 - F$ :
  - No cambia  $C_A(0)$ .

$$V \frac{dC_A}{dt} = F_0 (C_{A0} - C_A) - Vr = 0$$


The diagram illustrates a balance scale with a blue block on the left and a red block on the right. A red arrow points from the right side towards the left side, indicating a shift in equilibrium. The scale is shown in a state of imbalance, with the right side being heavier.

# Variable de estado

Variable de estado  $n_A$

$$\frac{d(V C_A)}{dt} = F_0 C_{A0} - Vr - FC_A$$



$$\frac{dn_A}{dt} = F_0 C_{A0} - Vr - FC_A$$

$$C_A = \frac{n_A}{V}$$

Variable de estado  $C_A$

$$V \frac{dC_A}{dt} = F_0 (C_{A0} - C_A) - Vr$$

$$V \frac{dC_j}{dt} = \sum_{\forall i \in E} F_i (C_{i,j} - C_j) + V \sum_{\forall k \in R} \alpha_{j,k} r_k$$

- No se supuso  $V$  constante.
- $X$  es una propiedad intensiva.
- No figura  $F$ .

Plantea el balance de un componente A en un reactor tanque agitado continuo.

Perfecto. Vamos a plantear el **balance de materia para un componente A** en un **reactor tanque agitado continuo** (CSTR, por sus siglas en inglés: Continuous Stirred-Tank Reactor).

### Supuestos típicos para el modelo

1. El reactor está en **estado estacionario** (opcional: puede extenderse a estado dinámico).
2. El contenido del tanque está **perfectamente mezclado**: la concentración es uniforme en todo el volumen.
3. Hay una reacción que consume o produce el componente A.
4. Puede haber una o más corrientes de entrada y una corriente de salida.


### Notación

- $F_{in}$ : caudal de entrada ( $m^3/s$ )
- $C_{A,in}$ : concentración de A en la entrada ( $mol/m^3$ )
- $F$ : caudal de salida ( $m^3/s$ )
- $C_A$ : concentración de A en el reactor (y también en la salida, por mezcla perfecta)
- $V$ : volumen del reactor ( $m^3$ )
- $r_A$ : velocidad de reacción ( $mol/m^3 \cdot s$ ), positiva si A se genera, negativa si A se consume

## Balance general de componente A

Acumulación = Entrada – Salida + Generación

$$\frac{d}{dt}(C_A V) = F_{in} C_{A,in} - F C_A + V r_A$$

 En estado estacionario ( $\frac{d(C_A V)}{dt} = 0$ ):

$$0 = F_{in} C_{A,in} - F C_A + V r_A$$

## Interpretación

Este balance permite calcular:

- La concentración de salida  $C_A$
- La conversión de A
- O, con cinética conocida, diseñar el volumen  $V$

¿En qué condiciones se puede sacar  $V$  de la derivada para dejar solo  $C_A$ ?

¡Muy buena pregunta! La posibilidad de **sacar  $V$**  fuera de la derivada en el balance dinámico de un componente A en un **reactor tanque agitado continuo (CSTR)** depende de si el **volumen del reactor** es **constante** o **variable**.

### ✓ Recordemos el balance dinámico general:

$$\frac{d}{dt}(C_A \cdot V) = F_{in}C_{A,in} - FC_A + Vr_A$$

Este término de la izquierda incluye la derivada del **producto** de  $C_A(t)$  y  $V(t)$ . Para simplificarlo, debemos analizar si  $V$  es constante o no.

### 🔍 Condición para sacar $V$ de la derivada:

$$\frac{d}{dt}(C_A \cdot V) = V \frac{dC_A}{dt} + C_A \frac{dV}{dt}$$

Entonces:

✓ Si  $V = \text{cte}$ :

$$\frac{d}{dt}(C_A \cdot V) = V \cdot \frac{dC_A}{dt}$$

✓ Podés sacar  $V$  fuera de la derivada.

✗ Si  $V = V(t)$  (volumen variable):

$$\frac{d}{dt}(C_A \cdot V) = V(t) \cdot \frac{dC_A}{dt} + C_A(t) \cdot \frac{dV}{dt}$$

✗ No se puede sacar  $V$  de la derivada, ya que el volumen también varía con el tiempo y contribuye al cambio de la masa de A.

🧠 ¿Cuándo es razonable asumir  $V = \text{cte}$ ?

Cuando:

- El caudal de entrada y salida son iguales (nivel constante)
- El fluido es incompresible (como agua o soluciones diluidas)
- Hay control de nivel automático en el reactor

✅ **Conclusión**

Podés sacar  $V$  de la derivada  $\frac{d}{dt}(C_A \cdot V)$  solo si el volumen es constante.

En ese caso, el **modelo dinámico** del componente A se simplifica a:

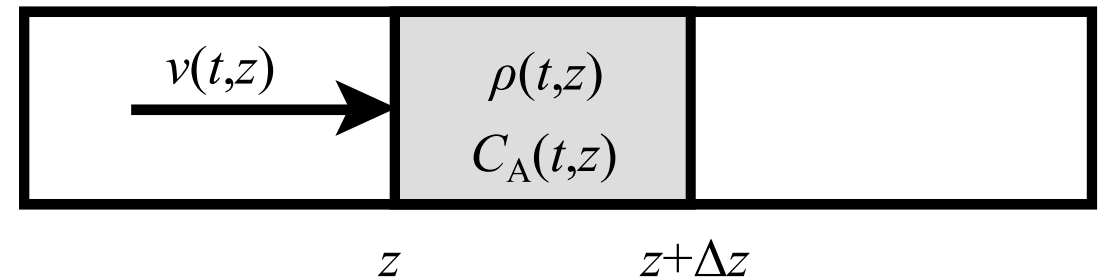
$$V \cdot \frac{dC_A}{dt} = F_{\text{in}} C_{A,\text{in}} - F C_A + V r_A$$

¿Querés que derive el modelo dinámico para un CSTR con volumen variable o que incluya un balance de energía también?

Balances de componentes en un sistema con parámetros distribuidos

# Balance por componente

- {vel. de acum.} =  $\frac{\partial(A \Delta z C_A)}{\partial t}$
- {vel. de entrada} =  $v A C_A|_z$
- {vel. de gener.} =  $r_A A \Delta z = -r A \Delta z$
- {vel. de salida} =  $v A C_A|_{z+\Delta z}$



$$\frac{\partial(A \Delta z C_A)}{\partial t} = v A C_A|_z - r A \Delta z - v A C_A|_{z+\Delta z}$$

$$\Delta z \frac{\partial C_A}{\partial t} = v C_A|_z - r \Delta z - v C_A|_{z+\Delta z}$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -\frac{v C_A|_{z+\Delta z} - v C_A|_z}{\Delta z} - r$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -\frac{\partial(v C_A)}{\partial z} - r = 0$$

# Variación de la propiedad intensiva

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -v \frac{\partial C_A}{\partial z} - r$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -v \frac{\partial \rho}{\partial z}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial z} = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -v \frac{\partial C_A}{\partial z} - C_A \frac{\partial v}{\partial z} - r$$

$$-\frac{C_A}{\rho} \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial t} = -v \frac{\partial \rho}{\partial z} - \rho \frac{\partial v}{\partial z} \right\}$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} - \frac{C_A}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} = -v \frac{\partial C_A}{\partial z} - r + v \frac{C_A}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial z}$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -v \frac{\partial C_A}{\partial z} - r$$

Plantea el balance para un componente en un reactor tubular de flujo pistón.

¡Claro! Vamos a plantear el **balance de materia para un componente  $A$**  en un reactor tubular de flujo pistón (RTFP), también conocido como **PFR (Plug Flow Reactor)**.

### Supuestos del modelo

1. **Flujo pistón:** no hay mezcla axial, pero sí mezcla radial completa.
2. **Estado estacionario** (puede generalizarse a no estacionario si se desea).
3. **Reacción química:** el componente  $A$  puede reaccionar dentro del reactor.
4. **Unidimensional:** concentración varía solo en la dirección axial  $z$ .

### Variables

- $C_A(z)$ : concentración del componente  $A$  a lo largo del reactor ( $\text{mol}/\text{m}^3$ )
- $F_A(z) = C_A(z) \cdot v \cdot A$ : flujo molar de  $A$  ( $\text{mol}/\text{s}$ )
- $v$ : velocidad lineal del fluido ( $\text{m}/\text{s}$ )
- $A$ : área de sección transversal del tubo ( $\text{m}^2$ )
- $r_A(C_A)$ : velocidad de reacción ( $\text{mol}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$ )
- $z$ : coordenada axial ( $\text{m}$ )

## ◆ Forma general del balance para componente A (estado estacionario)

$$\frac{dF_A(z)}{dz} = A \cdot r_A(C_A(z))$$

Recordando que  $F_A = C_A \cdot v \cdot A$ , entonces:

$$\frac{d(C_A v A)}{dz} = A \cdot r_A(C_A) \Rightarrow v \cdot \frac{dC_A}{dz} = r_A(C_A)$$

## ✓ Resultado final – Balance de materia para A en un reactor tubular (PFR):

$$v \cdot \frac{dC_A}{dz} = r_A(C_A)$$

Este es el modelo diferencial en estado estacionario para un PFR. Se resuelve como un problema de valor inicial con condición:

## 🔄 ¿Y en estado no estacionario?

En caso general (no estacionario):

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + v \frac{\partial C_A}{\partial z} = r_A(C_A)$$

Esto es una ecuación en derivadas parciales (EDP) que describe la evolución de la concentración con el tiempo y el espacio.

# Medidas de concentración

# Medidas de concentración

- Densidad de la solución [masa]/[volumen]:  $\rho = \sum_{j=1}^{NC} \rho_j$
- Concentración de masa del componente  $j$ :  $\rho_j = C_j PM_j$
- Fracción másica de  $j$ :  $w_j = \frac{\rho_j}{\rho}$

# Medidas de concentración

- Densidad molar [mol]/[volumen]:  $C = \sum_{j=1}^{NC} C_j$
- Concentración molar de  $j$ :  $C_j = \frac{\rho_j}{PM_j}$
- Fracción molar de  $j$ :  $x_j = \frac{C_j}{C}$
- Peso molecular medio:  $PM = \frac{\rho}{C}$

# Relaciones útiles

$$1. \sum_{j=1}^{NC} x_j = 1$$

$$2. \sum_{j=1}^{NC} w_j = 1$$

$$3. \sum_{j=1}^{NC} x_j PM_j = PM$$

$$4. \sum_{j=1}^{NC} \frac{w_j}{PM_j} = \frac{1}{PM}$$

$$5. x_j = PM \frac{w_j}{PM_j}$$

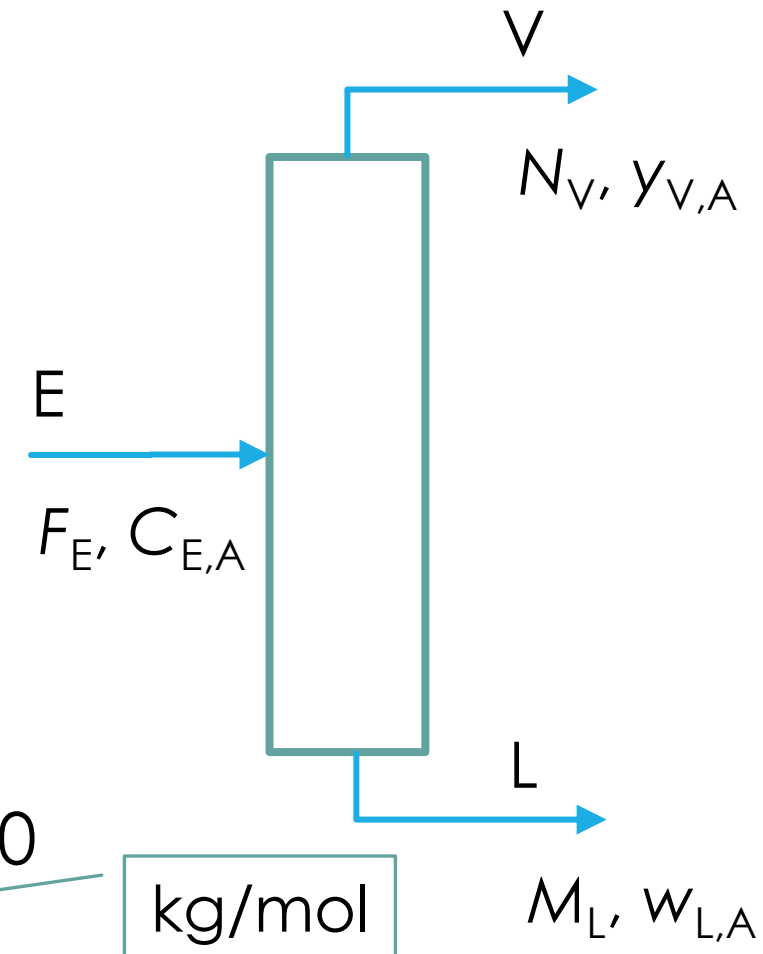
$$6. w_j = \frac{x_j PM_j}{PM}$$

# Balance en estado estacionario de A

- $F$ : flujo volumétrico ( $\text{m}^3/\text{h}$ )
- $C$ : concentración molar ( $\text{mol}/\text{m}^3$ )
- $N$ : flujo molar ( $\text{mol}/\text{h}$ )
- $y$ : fracción molar
- $M$ : flujo másico ( $\text{kg}/\text{h}$ )
- $w$ : fracción másica

$$F_E C_{E,A} - F_V C_{V,A} - F_L C_{L,A} = 0$$

$$F_E C_{E,A} - N_V y_{V,A} - \frac{M_L w_{L,A}}{PM_A} = 0$$



Mal uso de la IA

# Problema

- Encontrar la solución analítica de  $\psi$  en función de  $t_d$ .
- Dado:  $t_d = 1 - \{\gamma^F \psi^3 + \gamma^A [3\psi^2 - 2\psi^3] + \gamma^R \psi\}$
- Donde:  $\gamma^F + \gamma^A + \gamma^R = 1$
- Todas las variables son adimensionales y están normalizadas a  $[0,1]$ .



resuelve  $t = 1 - (f \cdot x^3 + a(3x^2 - 2x^3) + r \cdot x)$  para  $x$



LENGUAJE NATURAL

ENTRADA MATEMÁTICA



TECLADO EXTENDIDO

EJEMPLOS

CARGAR



Interpretación de la entrada:

resuelve

$$t = 1 - (f x^3 + a(3 x^2 - 2 x^3) + r x)$$

para

$x$

Resultado:

Más raíces

Más dígitos

Formas exactas

Solución paso a paso

$$x \approx \frac{1}{2a - f}$$

$$0,26457 \left( 54 a^3 + 54 a^2 r + 108 a^2 t - 108 a^2 + \sqrt{(4(-9 a^2 - 6 a r + 3 f r))^3 + (54 a^3 + 54 a^2 r + 108 a^2 t - 108 a^2 - 27 a f r - 108 a f t + 108 a f + 27 f^2 t - 27 f^2)^2} - 27 a f r - 108 a f t + 108 a f + 27 f^2 t - 27 f^2 \right)^{(1/3)} -$$

$$(0,41997(-9 a^2 - 6 a r + 3 f r)) / \left( (2 a - f) \left( 54 a^3 + 54 a^2 r + 108 a^2 t - 108 a^2 + \sqrt{(4(-9 a^2 - 6 a r + 3 f r))^3 + (54 a^3 + 54 a^2 r + 108 a^2 t - 108 a^2 - 27 a f r - 108 a f t + 108 a f + 27 f^2 t - 27 f^2)^2} - 27 a f r - 108 a f t + 108 a f + 27 f^2 t - 27 f^2 \right)^{(1/3)} + \frac{a}{2 a - f} \right) \text{ y } 2 a - f \neq 0$$

$$x \approx -\frac{1}{2a - f} (0,13228 - 0,22912 i) \left( 54 a^3 + 54 a^2 r + 108 a^2 t - 108 a^2 + \sqrt{(4(-9 a^2 - 6 a r + 3 f r))^3 + (54 a^3 + 54 a^2 r + 108 a^2 t - 108 a^2 - 27 a f r - 108 a f t + 108 a f + 27 f^2 t - 27 f^2)^2} - 27 a f r - 108 a f t + 108 a f + 27 f^2 t - 27 f^2 \right)^{(1/3)} +$$

$$(1/3) + \frac{a}{2a - f} \text{ y } 2a - f \neq 0$$

$$(1/3) + \frac{a}{2a - f} \text{ y } 2a - f \neq 0$$

$$x \approx -\frac{1}{2a - f} (0,13228 - 0,22912 i) \left( 54 a^3 + 54 a^2 r + 108 a^2 t - 108 a^2 + \sqrt{(4(-9 a^2 - 6 a r + 3 f r))^3 + (54 a^3 + 54 a^2 r + 108 a^2 t - 108 a^2 - 27 a f r - 108 a f t + 108 a f + 27 f^2 t - 27 f^2)^2} - 27 a f r - 108 a f t + 108 a f + 27 f^2 t - 27 f^2 \right)^{(1/3)} +$$

$$(1/3) + \frac{a}{2a - f} \text{ y } 2a - f \neq 0$$

$$(1/3) + \frac{a}{2a - f} \text{ y } 2a - f \neq 0$$

Soluciones:

2 para  $2a - f = 0$

3 para  $2a - f \neq 0$



Nuevo chat

Buscar chats

LOGO DESIGNER

Explorar GPT

Proyectos

Nuevo proyecto

Jorgelina

abril

Enrique

Reciente

Cálculo en GNU Octave

Intervalo de r en MATLAB

Intervalo de p

Modelo del núcleo no reacci...

Especialista en Moodle

Recientes

Unidad 1 Pedagogía Escolar

Familia Tarifa Plus

$$x = \frac{1}{3 \sqrt[3]{2} (2a-f)}$$

$$\left( (54a^3 + 54a^2r + 108a^2t - 108a^2 + \sqrt{4(-9a^2 - 6ar + 3fr)^3} + (54a^3 + 54a^2r + 108a^2t - 108a^2 - 27afr - 108aft + 108af + 27f^2t - 27f^2)^2) - 27afr - 108aft + 108af + 27f^2t - 27f^2 \right)^{1/3} - \sqrt[3]{2}(-9a^2 - 6ar + 3fr) / \left( 3(2a-f)(54a^3 + 54a^2r + 108a^2t - 108a^2 + \sqrt{4(-9a^2 - 6ar + 3fr)^3} + (54a^3 + 54a^2r + 108a^2t - 108a^2 - 27afr - 108aft + 108af + 27f^2t - 27f^2)^2) - 27afr - 108aft + 108af + 27f^2t - 27f^2 \right)^{1/3} + \frac{a}{2a-f}$$

Programa la expresión que te envío para calcularla en GNU Octave. Si analizas la expresión, verás que hay un grupo que se repite dos veces, el que está elevado a la (1/3). Define la variable w igual a ese grupo y úsala para simplificar el cálculo.

Pensado durante 1m 12s

Sí. Una forma clara de programarla en GNU Octave, usando la repetición del grupo elevado a 1/3, es esta:

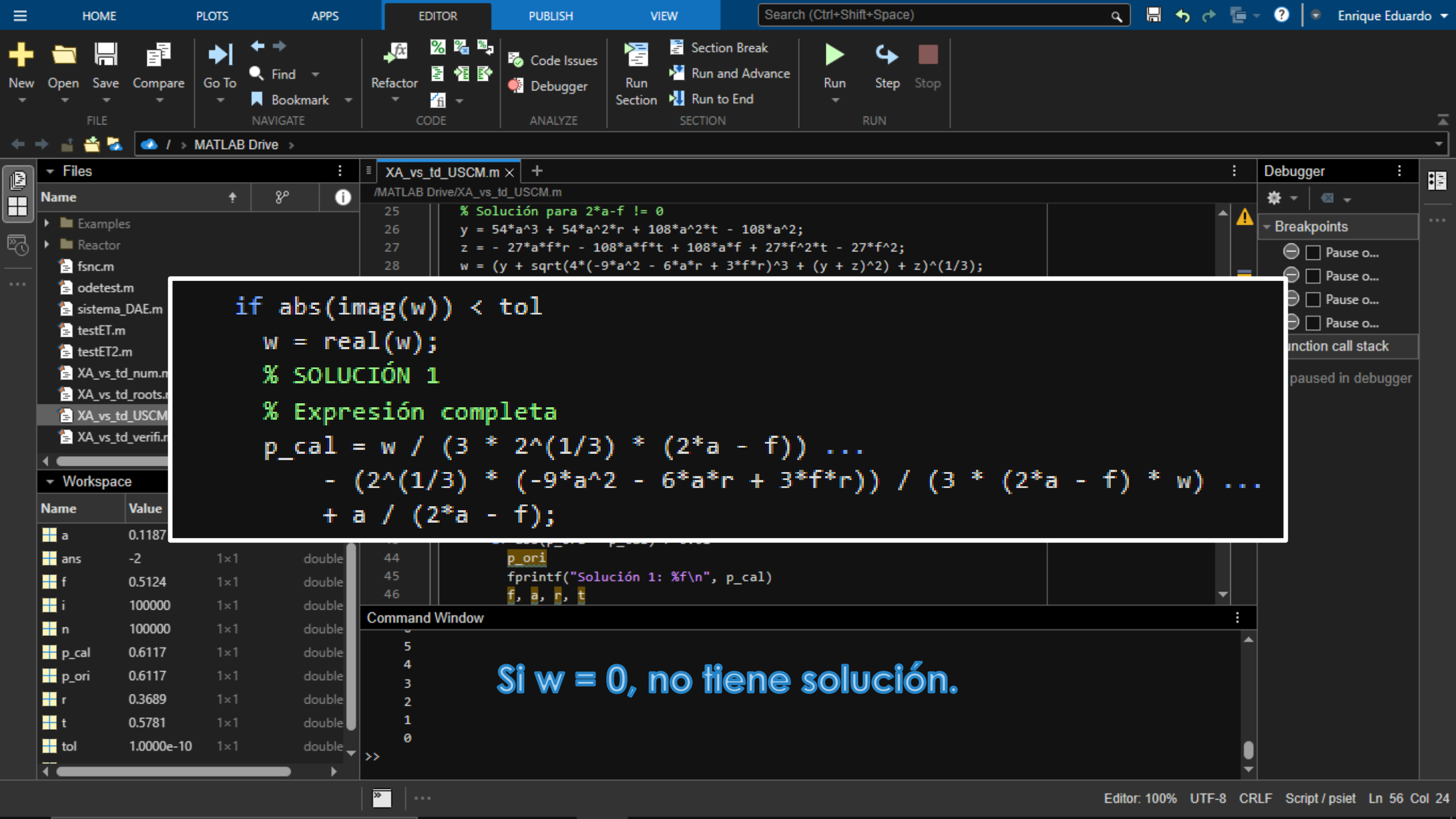
```

</> octave
% Definir variables
a = ...;
f = ...;
r = ...;
t = ...;

% Grupo repetido

```

+ Pregunta lo que quieras



```
if abs(imag(w)) < tol
    w = real(w);
    % SOLUCIÓN 1
    % Expresión completa
    p_cal = w / (3 * 2^(1/3) * (2*a - f)) ...
            - (2^(1/3) * (-9*a^2 - 6*a*r + 3*f*r)) / (3 * (2*a - f) * w) ...
            + a / (2*a - f);
```

Command Window

```
5
4
3
2
1
0
>>
```

Si w = 0, no tiene solución.

# Problema

- Encontrar la solución analítica de  $\psi$  en función de  $t_d$ .
- Dado:  $t_d = 1 - \{\gamma^F \psi^3 + \gamma^A [3\psi^2 - 2\psi^3] + \gamma^R \psi\}$
- Donde:  $\gamma^F + \gamma^A + \gamma^R = 1$
- Todas las variables son adimensionales y están normalizadas a  $[0,1]$ .
- Solución obtenida muy compleja y poco robusta.
- Analizando:  $(\gamma^F - 2\gamma^A)\psi^3 + 3\gamma^A\psi^2 + \gamma^R\psi + t_d - 1 = 0$

+

↺ ↻ ⚙ ⏪

1 -10 10

2  $a = 0.7765$  X

↺ -10 10

3  $r = 1 - f - a$  X  
 $0 \leq \theta \leq 2\pi$   
= 0.0285

4  $g(x) = (f - 2*a)*x^3 + 3*a*x^2 + r*x +$  X

5  $t = 1$  X

↺ -10 10

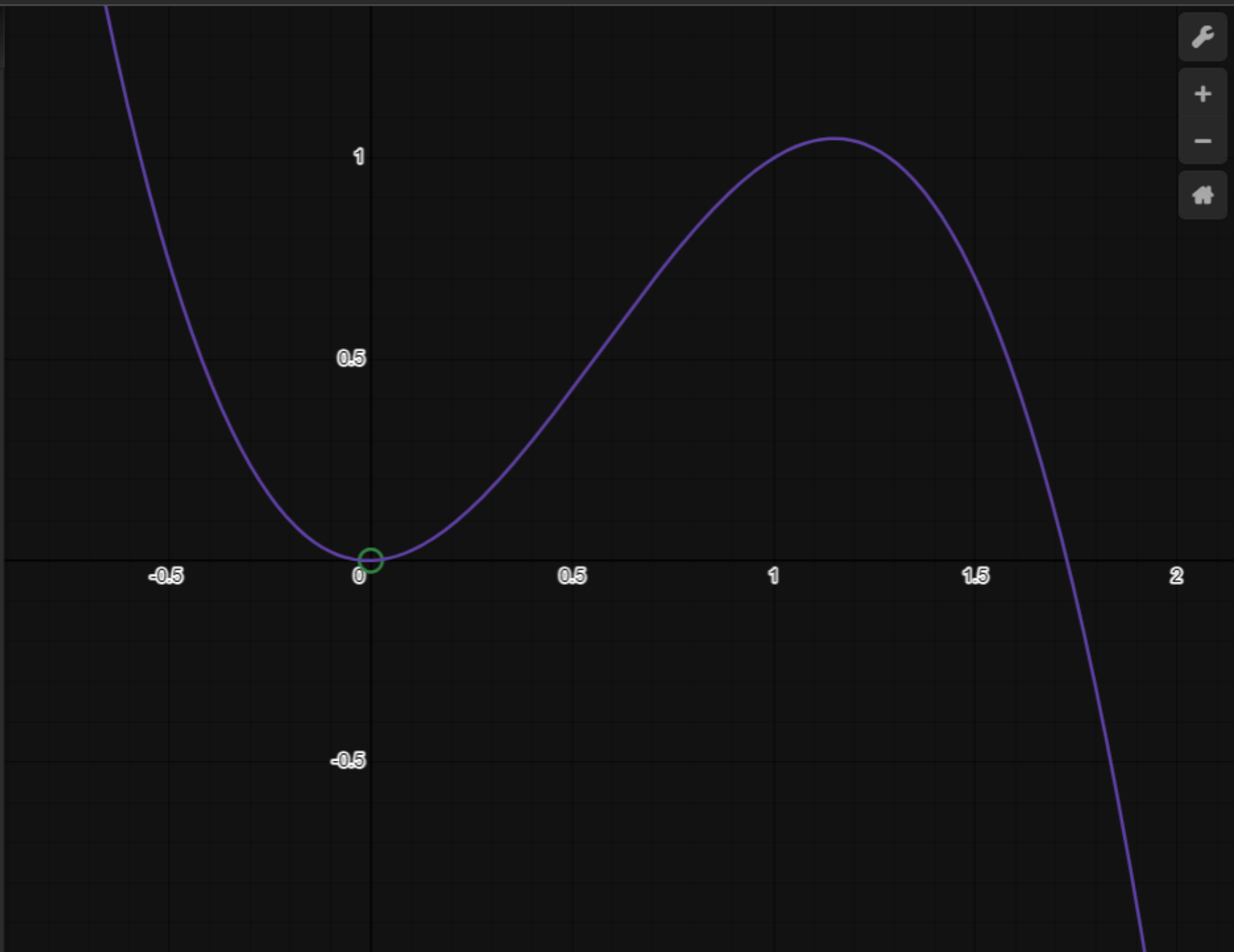
6 X

7 X

8

¡Inicia sesión o regístrate para guardar tus bellas matemáticas! X

impulsado por desmos



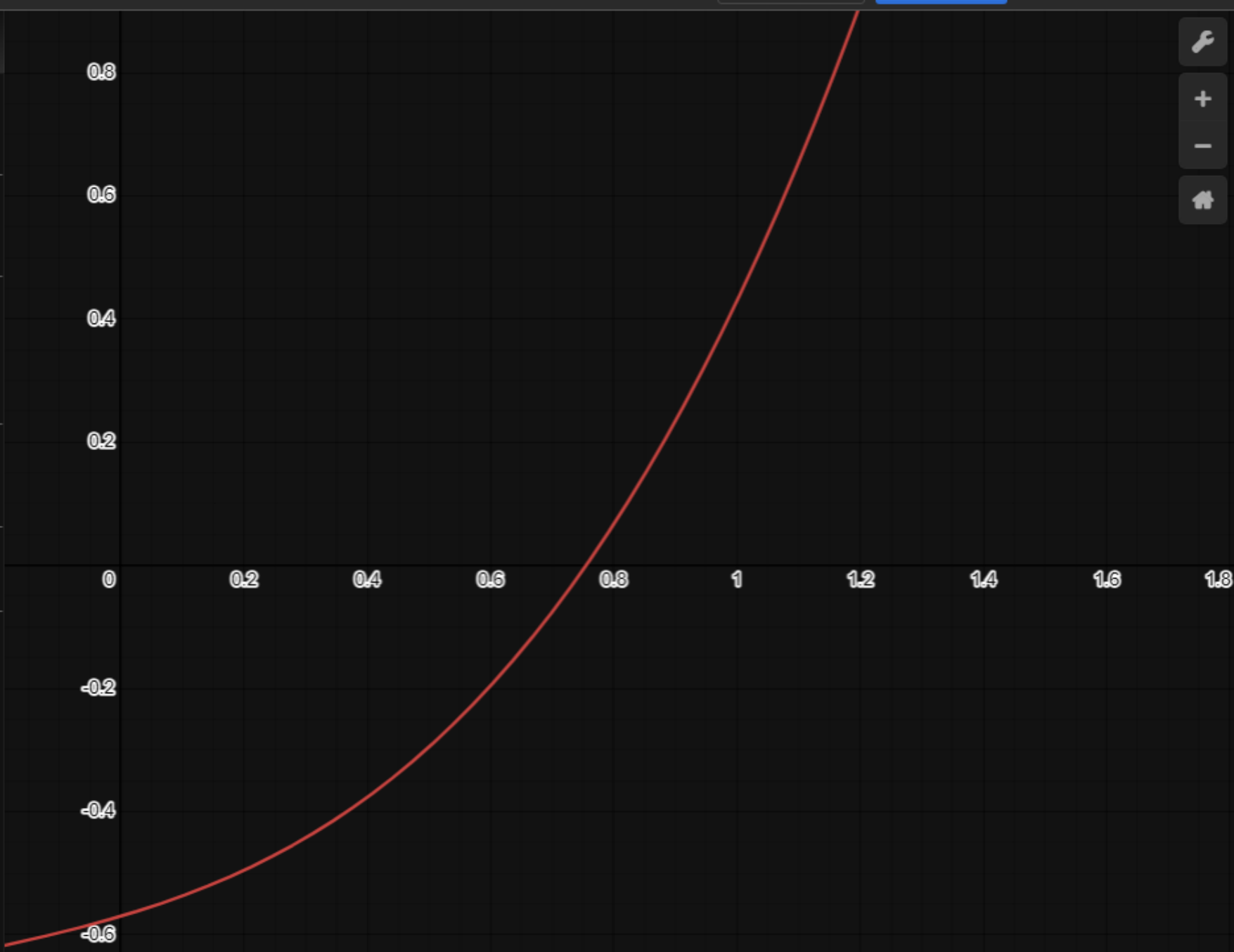
1  $f = 0.6$

2  $a = 0.104$

3  $r = 1 - f - a$   
 $0 \leq \theta \leq 12\pi$   
= 0.296

4  $t = 0.43$

5  $g(x) = (f - 2*a)*x^3 + 3*a*x^2 + r*x + t$



¡Inicia sesión o regístrate para guardar tus bellas matemáticas!

[« Inicio de Documentación](#)[« MATLAB](#)[« Matemáticas](#)[« Matemáticas elementales](#)[« Polinomios](#)

## Raíces de polinomios

EN ESTA PÁGINA

[Raíces numéricas](#)[Raíces mediante sustitución](#)[Raíces en un intervalo específico](#)[Raíces simbólicas](#)[Consulte también](#)[Documentación](#)[Ejemplos](#)[Funciones](#)[Apps](#)[Vídeos](#)[Respuestas](#)

# Raíces de polinomios

R2025b

Este ejemplo muestra varios métodos diferentes para calcular las raíces de un polinomio.

- Raíces numéricas
- Raíces mediante sustitución
- Raíces en un intervalo específico
- Raíces simbólicas

## Raíces numéricas

La función `roots` calcula las raíces de un polinomio con una única variable representado por un vector de coeficientes.

Por ejemplo, cree un vector para representar el polinomio  $x^2 - x - 6$  y, después, calcule las raíces.

```
p = [1 -1 -6];  
r = roots(p)
```

```
r =
```

```
    3
```

```
   -2
```

Por convención, MATLAB® devuelve las raíces en un vector columna.

La función `poly` convierte de nuevo las raíces en coeficientes de polinomios. Cuando se opera con vectores, `poly` y `roots` son funciones inversas, de forma que `poly(roots(p))` devuelve `p` (hasta un error de redondeo, orden y escalado).

```
p2 = poly(r)
```

```
p2 =
```

```
    1    -1    -6
```

Cuando se opera con una matriz, la función `poly` calcula el polinomio característico de la matriz. Las raíces del polinomio característico son los valores propios de la matriz. Por lo tanto, `roots(poly(A))` y `eig(A)` devuelven la misma respuesta (hasta un error de redondeo, orden y escalado).

## Command Window

```
>> % 3*x^2 - 5*x + 10 = 0  
>> roots([3 -5 10])  
ans =  
    0.8333 + 1.6245i  
    0.8333 - 1.6245i
```

Prueba para ver si encuentra todas la raíces, aun si son complejas.

## Command Window

```
>> % 3*x^2 - 5*x + 10 = 0
>> roots([3 -5 10])
ans =
    0.8333 + 1.6245i
    0.8333 - 1.6245i
>> % 0*x^2 - 5*x + 10 = 0
>> roots([0 -5 10])
ans =
     2
>> |
```

Prueba para ver si resuelve un polinomio de menor grado.

XA\_vs\_td\_roots.m × +

/MATLAB Drive/XA\_vs\_td\_roots.m

```
1  % Solución analítica de X en función de td para el modelo
2  % Unreacted Shrinking Core Model
3  clc
4  function p_cal = psiet(tol,f,a,r,t)
5  % (f-2*a)*x^3+3*a*x^2+r*x+t-1 = 0;
6  c = [f-2*a 3*a r t-1];
7
8  % Ecuación cúbica
9  x = roots(c);
10
11 % Se sabe que existe una solución real y es única en [0,1].
12 for k = 1:length(x)
13     if abs(imag(x(k))) < tol && x(k) >= 0 && x(k) <= 1
14         p_cal = real(x(k));
15         return
16     end
17 end
18 end
```

**APROBADO**

# Solución analítica vs. numérica

- Para  $10^6$  de evaluaciones en *MATLAB online*.
- Método analítico (función `roots`): 13.16 s.
- Método numérico (con la función `solve`):
  - Inicialización  $p = 0.5$ , 12120 fallos, 10.95 s.
  - Inicialización  $p = 1 - t$ , 650 fallos, 11.13 s.



# Solución analítica vs. numérica

## MATLAB

- Para  $10^5$  de evaluaciones.
- Método analítico: 12.43 s.
- Método numérico:
  - Inicialización  $p = 0.5$ , 1239 fallos, 27.07 s.
  - Inicialización  $p = 1 - t$ , 61 fallos, 25.23 s.

## GNU Octave

- Para  $10^5$  de evaluaciones.
- Método analítico: 69.88 s.
- Método numérico:
  - Inicialización  $p = 0.5$ , 3684 fallos, 328.53 s.
  - Inicialización  $p = 1 - t$ , 570 fallos, 313.75 s.

En notebook: Intel® Core™ i7-2620M CPU @2.70 GHz, 8 GB  
Windows 10



# Mapa curricular de modelado

1. Balance de componentes
2. Dependencia lineal
3. Variación de concentración
4. Análisis dinámico cualitativo
5. Medidas de concentración
6. Mal uso de la IA