

Introducción Parte IV

Enrique E. Tarifa, Facultad de Ingeniería, UNJu

Modelos empíricos vs. teóricos

Modelos empíricos vs. teóricos

Modelos empíricos

- Consideran la relación entradas-salidas.
- No explican el proceso.
- Requieren numerosos datos.
- El rango de validez está restringido al dominio de los datos.
- No pueden extrapolar.
- Si el sistema se modifica, pierden validez.

Modelos teóricos

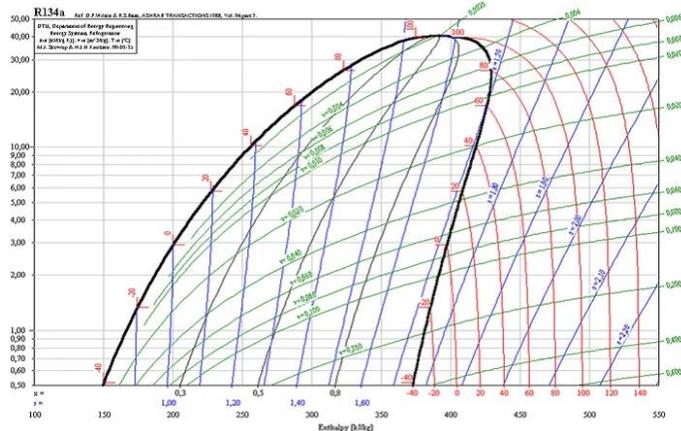
- Consideran los primeros principios.
- Explican el proceso.
- Requieren menos datos.
- Pueden extrapolar.
- El rango de validez está dado por el dominio de las leyes físico-químicas.
- Si el sistema se modifica, generalmente, siguen siendo válidos.
- No siempre es posible o conveniente desarrollarlos.

Modelos empíricos vs. teóricos

Modelos empíricos

- Tablas experimentales
- Gráficos
- Funciones: $\pi_0 = \pi_1^{p_1} \pi_2^{p_2} \pi_3^{p_3} \dots \pi_n^{p_n}$

Diagrama de Molliere



Modelos teóricos

- Modelo de espacio de estados

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

$$V \frac{dC_B}{dt} = F_0(C_{B0} - C_B) - Vr$$

$$V \frac{dC_C}{dt} = F_0(C_{C0} - C_C) + Vr$$

$$V \frac{dC_M}{dt} = F_0(C_{M0} - C_M)$$

$$VCc_p \frac{dT}{dt} = F_0 C_0 C_{p0} (T_0 - T) + Vr(-\Delta H) - Q$$

$$r = kC_A$$

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

$$Q = UA\Delta T_{ml}$$

$$Q = N_{s0} C_{p,s0} (T_s - T_{s0})$$

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T - T_{s0}) - (T - T_s)}{\ln\left(\frac{T - T_{s0}}{T - T_s}\right)}$$

$$C = \sum_{j=A,B,C,M} C_j$$

$$x_j = \frac{C_j}{C} \quad j = A, B, C, M$$

Modelos empíricos

Conductividad del germanio

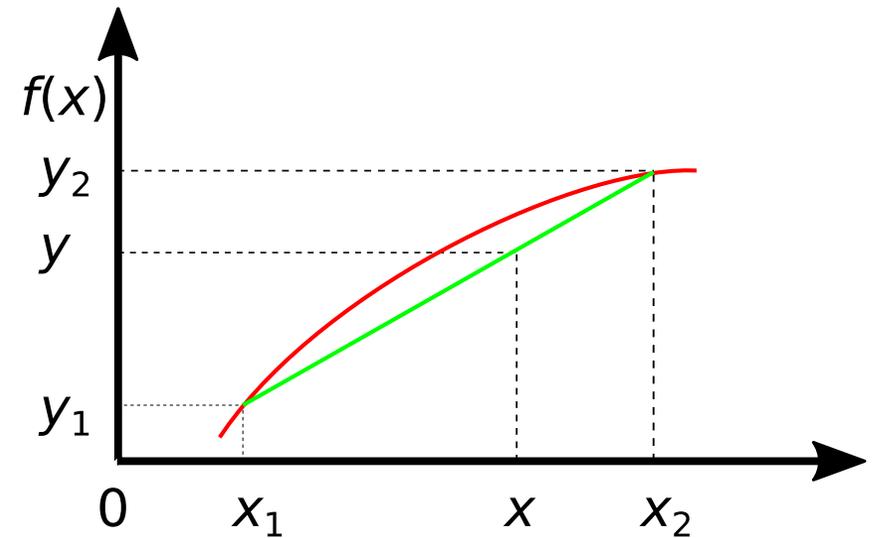
| T (K) | σ_{Ge} (10^{-4} S/cm) |
|------------|---|
| 400 | 0.05 |
| 500 | 0.10 |
| 600 | 0.20 |
| 700 | 0.40 |
| 800 | 1.00 |
| 900 | 2.00 |
| 1000 | 4.00 |



Interpolación lineal

- Interpolación lineal
 - Regla de tres simple con Δ
 - Ecuación de línea recta:

$$y = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} (x - x_1) + y_1$$

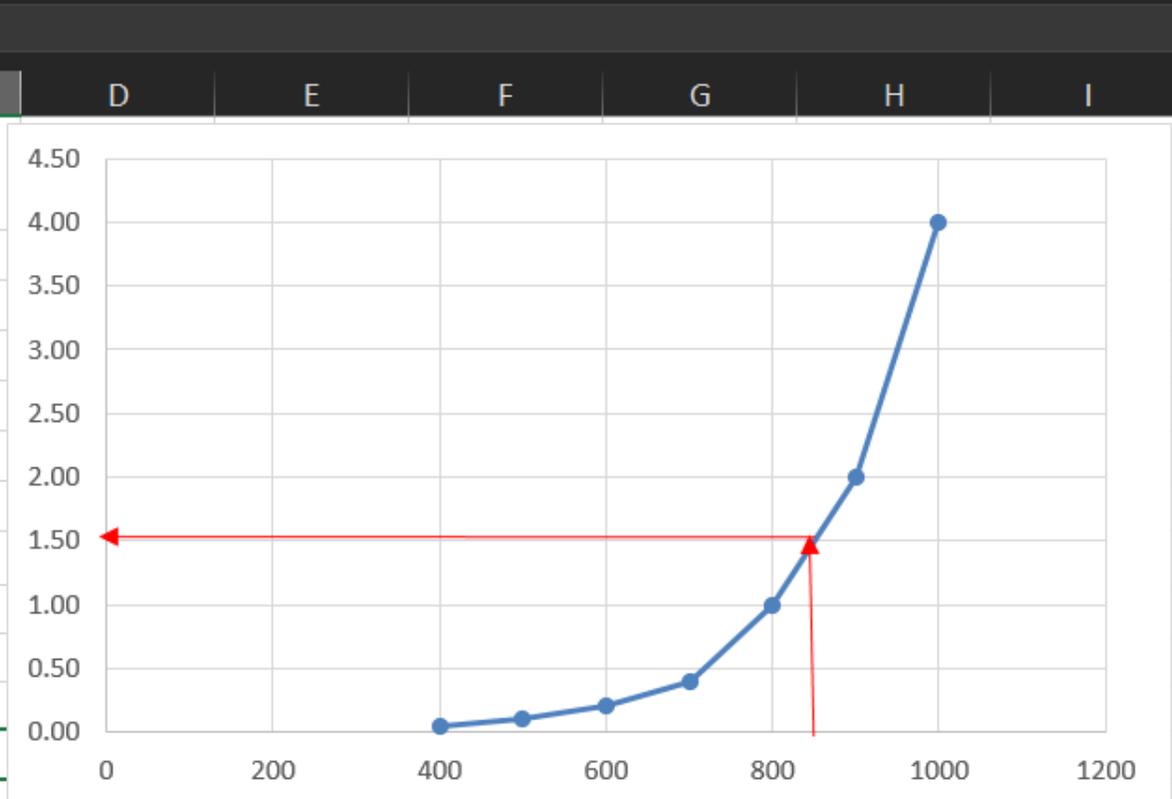


Archivo Inicio Insertar Disposición de página Fórmulas Datos Revisar Vista Programador Ayuda

Comentarios Compartir

Calibri 11 Fuente Alineación Número Estilos Celdas Edición Complementos Analizar datos

| T (K) | sGe (10 ⁻⁴ S/cm) |
|-------|-----------------------------|
| 400 | 0.05 |
| 500 | 0.10 |
| 600 | 0.20 |
| 700 | 0.40 |
| 800 | 1.00 |
| 900 | 2.00 |
| 1000 | 4.00 |



| Interpolación | |
|---------------|-----|
| x | y |
| 850 | 1.5 |

$$y = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}(x - x_1) + y_1$$

Archivo Inicio Insertar Disposición de página Fórmulas Datos Revisar Vista Programador Ayuda

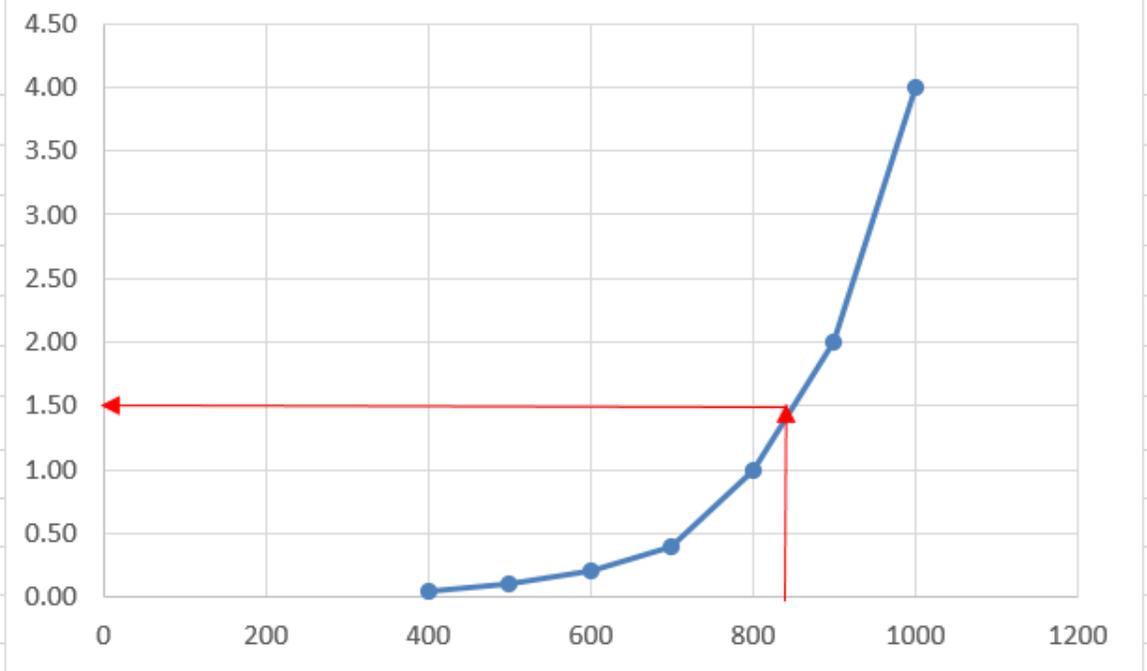
Comentarios Compartir

Calibri 11 Fuente Alineación Número Estilos Celdas Edición Complementos Analizar datos

B12 = (B7-B6)/(A7-A6)*(A12-A6)+B6

| T (K) | sGe (10 ⁻⁴ S/cm) |
|-------|-----------------------------|
| 400 | 0.05 |
| 500 | 0.1 |
| 600 | 0.2 |
| 700 | 0.4 |
| 800 | 1 |
| 900 | 2 |
| 1000 | 4 |

| Interpolación | |
|---------------|-------------------------------|
| x | y |
| 850 | = (B7-B6)/(A7-A6)*(A12-A6)+B6 |



$$y = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} (x - x_1) + y_1$$

Regresión

Datos

| x | y |
|-------|-------|
| x_1 | y_1 |
| x_2 | y_2 |
| x_3 | y_3 |
| ... | ... |
| x_n | y_n |

Modelo

$$P(x) = a_0 + \sum_{j=1}^m a_j x^j$$

$$\min_a \sum_{i=1}^n (y_i - P(x_i))^2$$

El modelo puede ser una $f(x)$

Redes neuronales

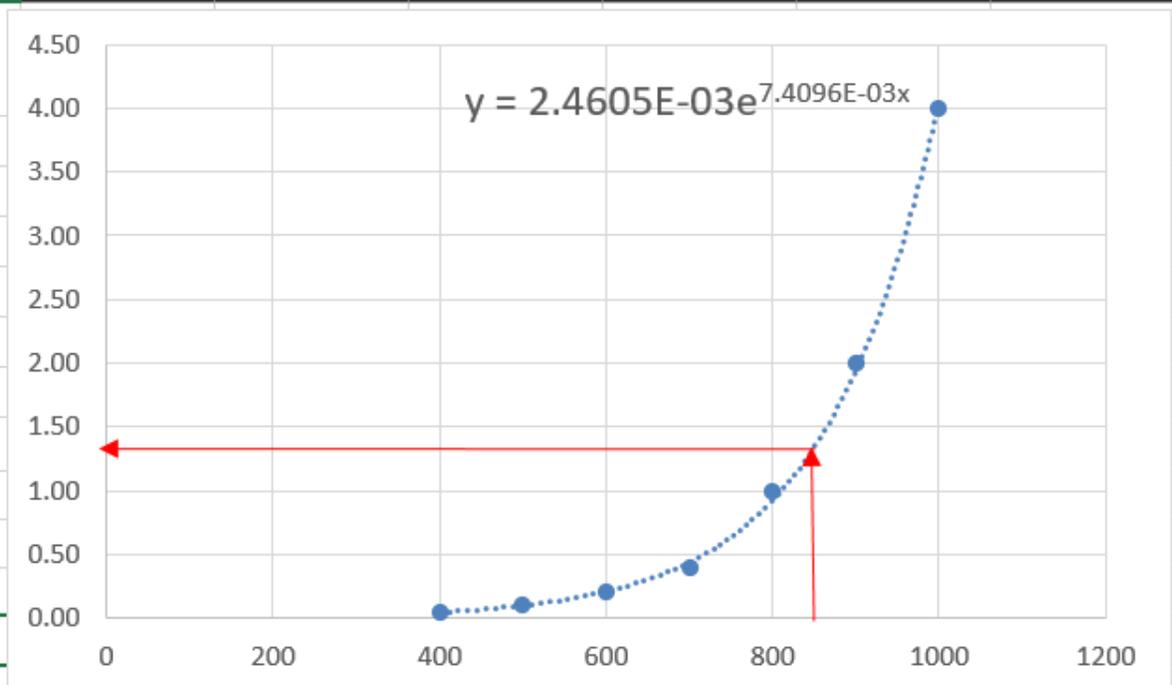
Conductividad Ge – Regresión.xlsx

Archivo Inicio Insertar Disposición de página Fórmulas Datos Revisar Vista Programador Ayuda

Comentarios Compartir

Calibri 11 Fuente Alineación Número Estilos Celdas Edición Complementos Analizar datos

| T (K) | sGe (10 ⁻⁴ S/cm) |
|-------|-----------------------------|
| 400 | 0.05 |
| 500 | 0.10 |
| 600 | 0.20 |
| 700 | 0.40 |
| 800 | 1.00 |
| 900 | 2.00 |
| 1000 | 4.00 |



| Regresión | |
|-----------|------|
| x | y |
| 850 | 1.34 |

$$y = a \exp(bx)$$

$$y = 2.4605 \times 10^{-3} \exp(7.4096 \times 10^{-3} x)$$

Archivos Inicio Insertar Disposición de página Fórmulas Datos Revisar Vista Programador Ayuda

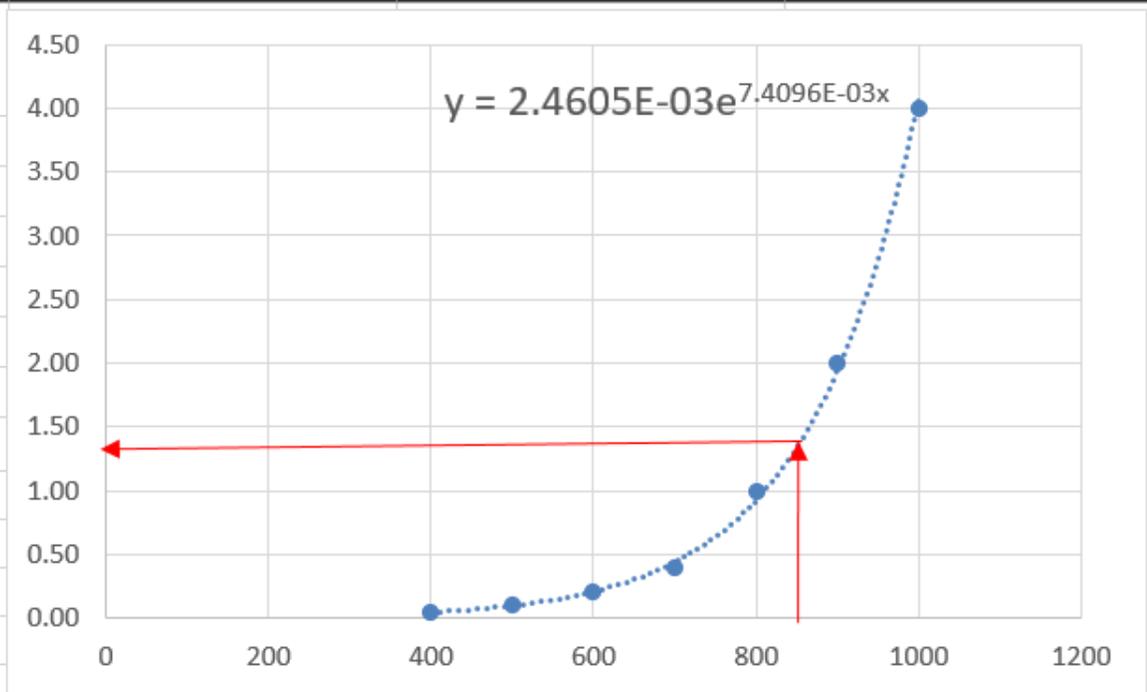
Comentarios Compartir

Calibri 11 Fuente Alineación Número Estilos Celdas Edición Complementos Analizar datos

B12 =0.0024605*EXP(0.0074096*A12)

| T (K) | sGe (10 ⁻⁴ S/cm) |
|-------|-----------------------------|
| 400 | 0.05 |
| 500 | 0.1 |
| 600 | 0.2 |
| 700 | 0.4 |
| 800 | 1 |
| 900 | 2 |
| 1000 | 4 |

| Regresión | |
|-----------|-------------------------------|
| x | y |
| 850 | =0.0024605*EXP(0.0074096*A12) |



$$y = a \exp(bx)$$

$$y = 2.4605 \times 10^{-3} \exp(7.4096 \times 10^{-3} x)$$

Errores

Función como base

$$E = y - y(x)$$

$$E_R = \frac{y - y(x)}{y(x)}$$

$$E\% = 100 \frac{y - y(x)}{y(x)}$$

Datos como base

$$E = y(x) - y$$

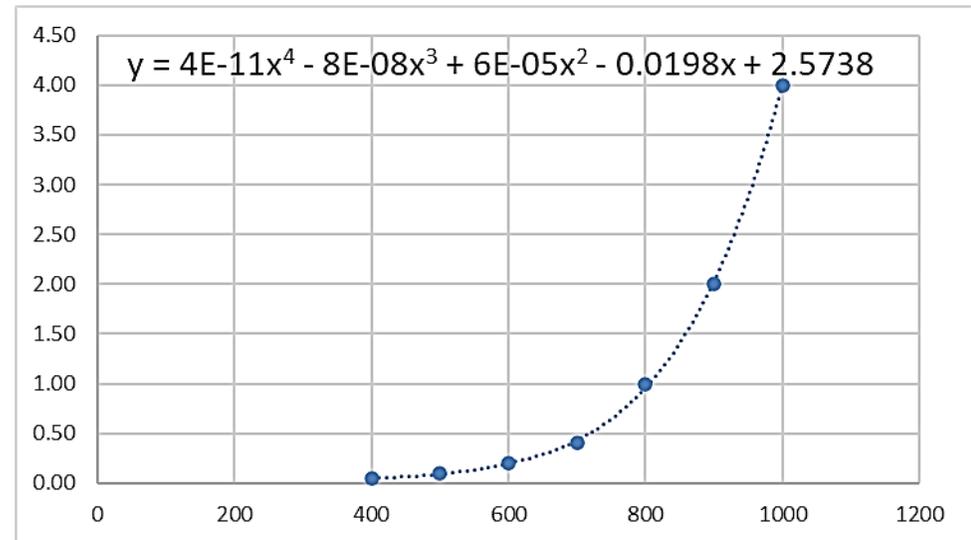
$$E_R = \frac{y(x) - y}{y}$$

$$E\% = 100 \frac{y(x) - y}{y}$$

Cifras significativas

| T (K) | S_{Ge} (10^{-4} S/cm) | $\sigma_{Ge}(T)$ | <i>Error %</i> |
|------------|-------------------------------|------------------|----------------|
| 400 | 0.05 | 0.16 | 216 |
| 500 | 0.10 | 0.17 | 74 |
| 600 | 0.20 | 0.20 | -1 |
| 700 | 0.40 | 0.28 | -31 |
| 800 | 1.00 | 0.56 | -44 |
| 900 | 2.00 | 1.28 | -36 |
| 1000 | 4.00 | 2.77 | -31 |

$$=(C2-B2)/B2*100$$



$$=4E-11*A2^4-8E-8*A2^3+6E-5*A2^2-1.98E-2*A2+2.5738$$

Cifras significativas

Definición

- Las cifras significativas son las que aportan alguna información.
- El 0 a la izquierda no es significativo.
- El 0 antes del punto decimal es ambiguo.
- Notación científica: $\#.#####E##$
 - $3.56E5 = 3.56 \times 10^5$
- c. s. = decimales + 1

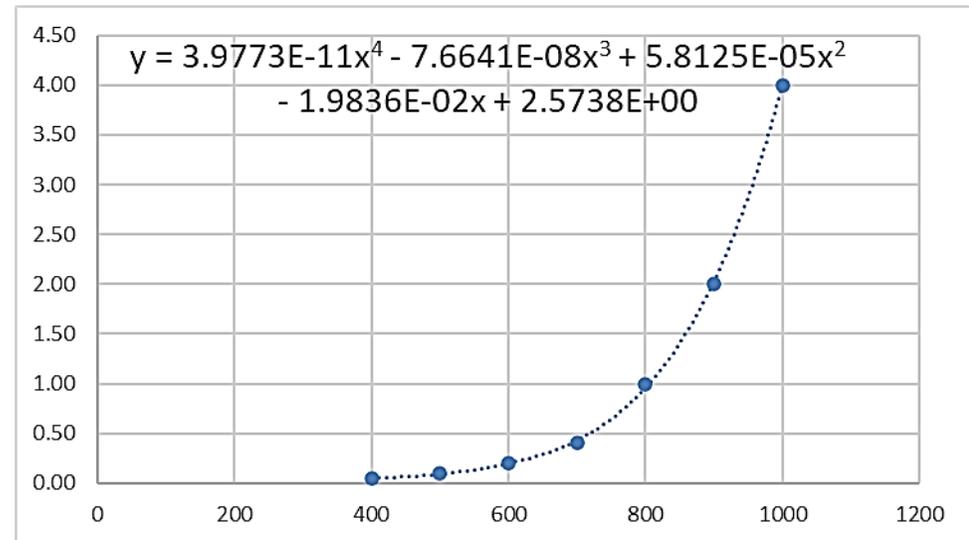
Ejemplos con 4 c. s.

| General | Científica |
|---------|------------------------|
| 1234 | 1.234×10^3 |
| 1.234 | 1.234×10^0 |
| 0.01234 | 1.234×10^{-2} |
| 1003 | 1.003×10^3 |
| 1234000 | 1.234×10^5 |
| 1200 | 1.200×10^3 |

Cifras significativas

| T (K) | S_{Ge} (10^{-4} S/cm) | $\sigma_{Ge}(T)$ | <i>Error %</i> |
|------------|-------------------------------|------------------|----------------|
| 400 | 0.05 | 0.05 | 5 |
| 500 | 0.10 | 0.09 | -7 |
| 600 | 0.20 | 0.20 | -1 |
| 700 | 0.40 | 0.43 | 8 |
| 800 | 1.00 | 0.96 | -4 |
| 900 | 2.00 | 2.03 | 1 |
| 1000 | 4.00 | 3.99 | 0 |

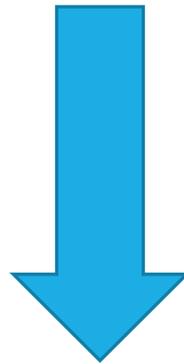
$$=(C2-B2)/B2*100$$



$$=3.9773E-11*A2^4-7.6641E-8*A2^3+5.8125E-5*A2^2-1.9836E-2*A2+2.5738$$

Cifras significativas

$$=3.9773E-11x^4-7.6641E-8x^3+5.8125E-5x^2-1.9836E-2x+2.5738$$

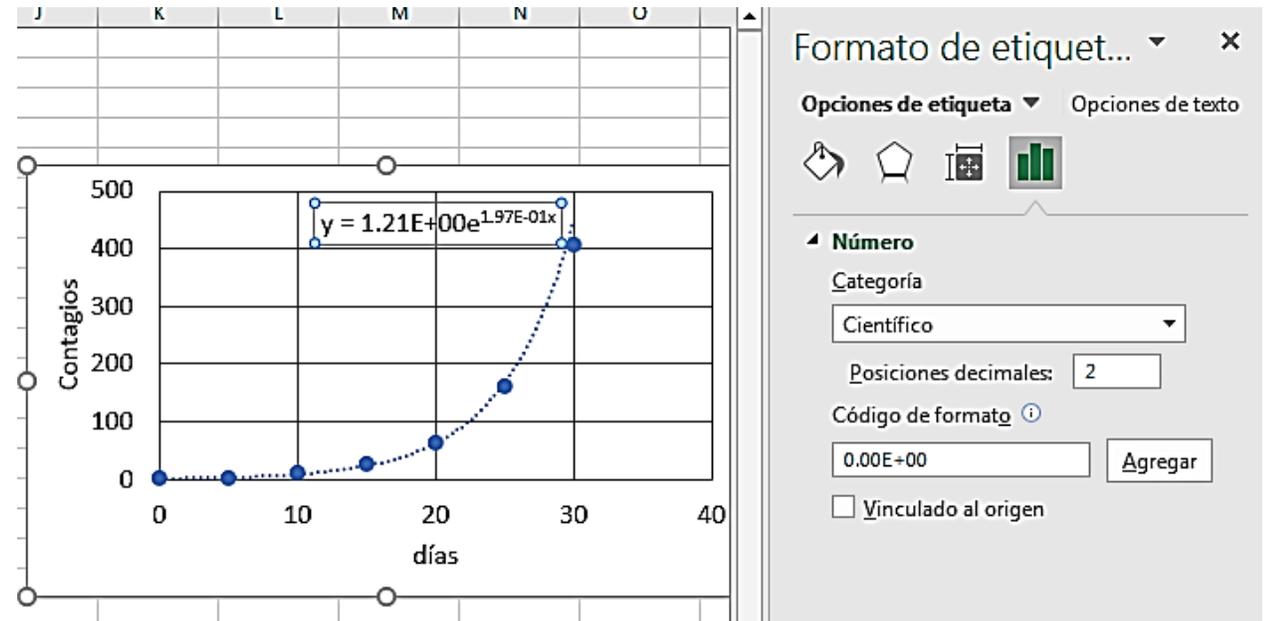


| | |
|-------------|-------|
| Buscar: | x |
| Reemplazar: | "A2^" |

$$=3.9773E-11*A2^4-7.6641E-8*A2^3+5.8125E-5*A2^2-1.9836E-2*A2^+2.5738$$

Regresión

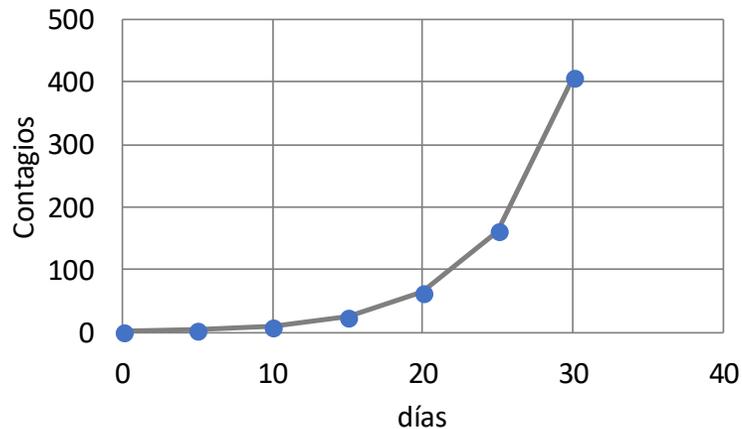
- Línea de tendencia en Excel
- Dar formato científico a los coeficientes:
 - c. s. = decimales + 1
- Coeficiente de determinación R^2 :
 - Está entre 0 y 1.
 - $$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (f(x_i) - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} = \frac{Var(F)}{Var(Y)}$$



Interpolación vs. regresión

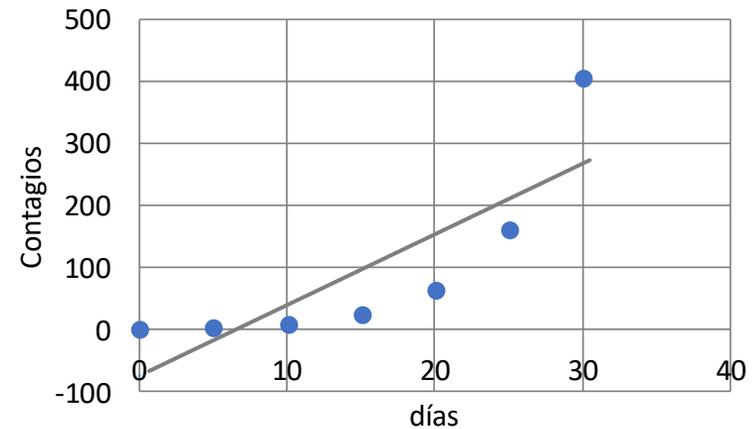
Interpolación

- Supone que los datos no tienen error.
- Los errores afectan.
- Emplea datos cercanos.
- Fórmula sencilla.



Regresión

- Considera que los datos tienen error.
- Los errores son atenuados.
- Emplea todos los datos.
- Fórmulas complejas.



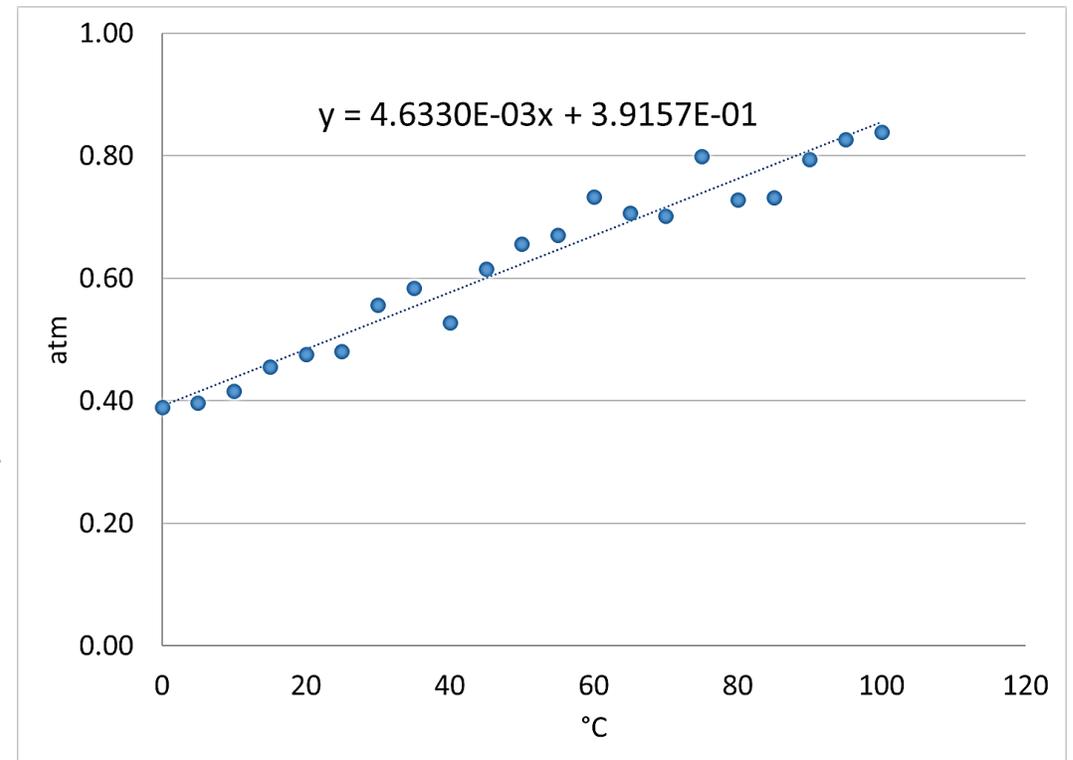
Depósito de gas

| T (°C) | P_{mr} (atm) | T (°C) | P_{mr} (atm) |
|----------|----------------|----------|----------------|
| 0 | 0.39 | 55 | 0.67 |
| 5 | 0.40 | 60 | 0.73 |
| 10 | 0.42 | 65 | 0.71 |
| 15 | 0.46 | 70 | 0.70 |
| 20 | 0.48 | 75 | 0.80 |
| 25 | 0.48 | 80 | 0.73 |
| 30 | 0.56 | 85 | 0.73 |
| 35 | 0.58 | 90 | 0.79 |
| 40 | 0.53 | 95 | 0.83 |
| 45 | 0.62 | 100 | 0.84 |
| 50 | 0.66 | | |



Depósito de gas

- $P_{\text{mr}} = 4.6330 \times 10^{-3} T + 3.9157 \times 10^{-1}$
- P_{mr} (atm), T (°C)
- ¿Cómo cambia si la cantidad de gas se redujera a la mitad?



Modelos teóricos

Depósito de gas

- $P = \frac{nRT}{V}$

- $P = aT$

- $P = P_{\text{mr}} + P_{\text{atm}}$

- $P_{\text{atm}} = 0.858 \text{ atm}$

- T en K

- $T(\text{K}) = T(^{\circ}\text{C}) + 273.15$

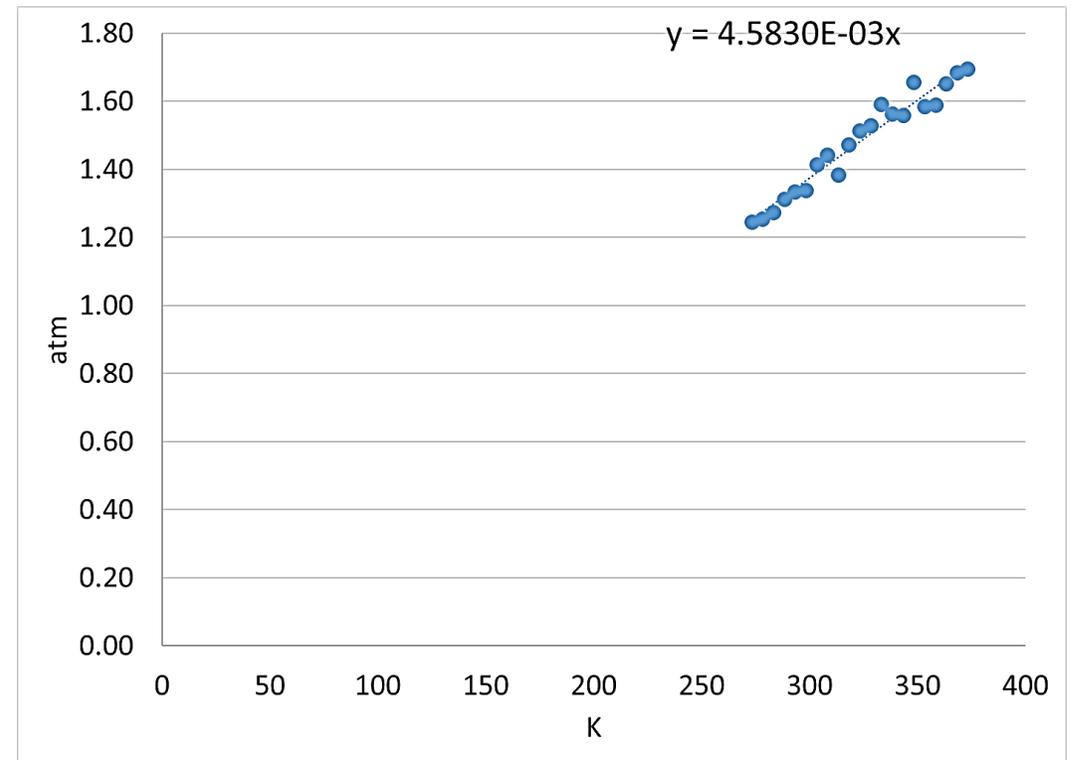


Depósito de gas

| T (°C) | T (K) | P_{mr} (atm) | P_{atm} (atm) | P (atm) |
|----------|---------|----------------|-----------------|-----------|
| 0 | 273.15 | 0.39 | 0.858 | 1.25 |
| 5 | 278.15 | 0.40 | 0.858 | 1.25 |
| 10 | 283.15 | 0.42 | 0.858 | 1.27 |
| 15 | 288.15 | 0.46 | 0.858 | 1.31 |
| 20 | 293.15 | 0.48 | 0.858 | 1.33 |
| 25 | 298.15 | 0.48 | 0.858 | 1.34 |
| 30 | 303.15 | 0.56 | 0.858 | 1.41 |
| 35 | 308.15 | 0.58 | 0.858 | 1.44 |
| 40 | 313.15 | 0.53 | 0.858 | 1.39 |
| 45 | 318.15 | 0.62 | 0.858 | 1.47 |
| 50 | 323.15 | 0.66 | 0.858 | 1.51 |
| 55 | 328.15 | 0.67 | 0.858 | 1.53 |

$=A2+273.15$

$=C2+D2$



Depósito de gas

Opciones de línea de tendencia ▾

📈

▲ Opciones de línea de tendencia

- Exponencial
- Lineal
- Logarítmica
- Polinómica Grado
- Potencial
- Media móvil Período

Nombre de la línea de tendencia

- Automático Lineal (P (atm))
- Personalizado

Extrapolar

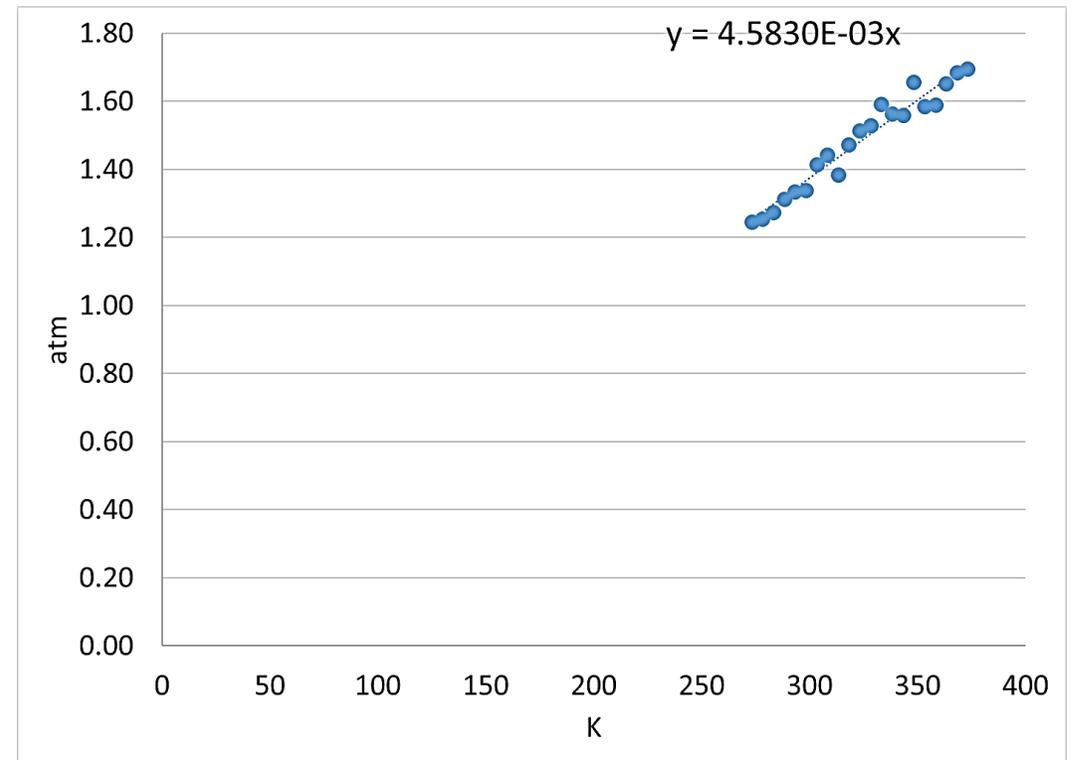
En el futuro periodos

En el pasado periodos

Señalar intersección

Presentar ecuación en el gráfico

Presentar el valor R cuadrado en el gráfico



Depósito de gas

- $P = 4.5830 \times 10^{-3}T$
- P (atm), T (K)
- ¿Cómo cambia si la cantidad de gas se redujera a la mitad?
- $a = \frac{nR}{V}$

