

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

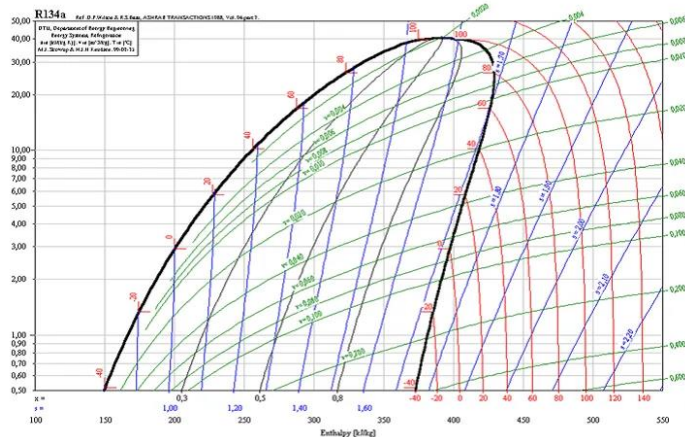
- Consideran los primeros principios.
- Explican el proceso.
- Requieren menos datos.
- Pueden extrapolar.
- El rango de validez está dado por el dominio de las leyes físico-químicas.
- Si el sistema se modifica, generalmente, siguen siendo válidos.
- No siempre es posible o conveniente desarrollarlos.

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

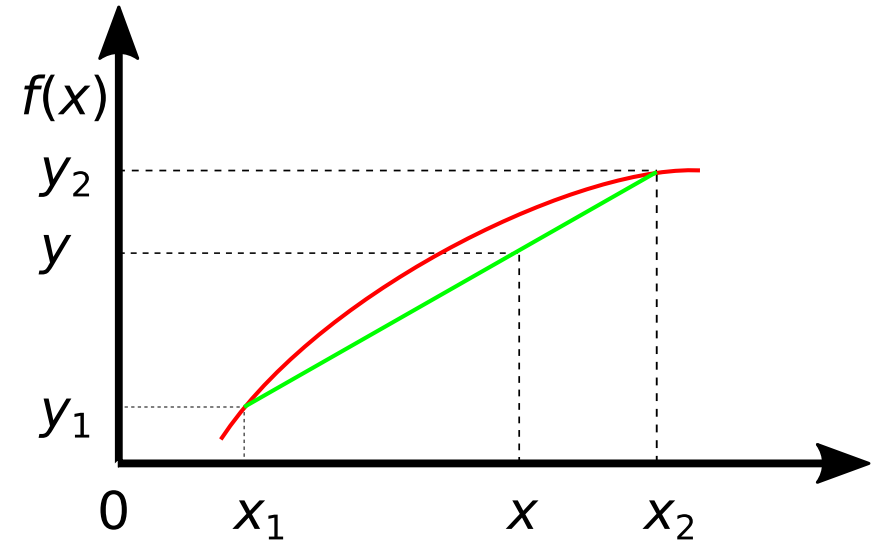
T (K)	σ_{Ge} (10^{-4} S/cm)
400	0.05
500	0.10
600	0.20
700	0.40
800	1.00
900	2.00
1000	4.00



Interpolación lineal

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

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

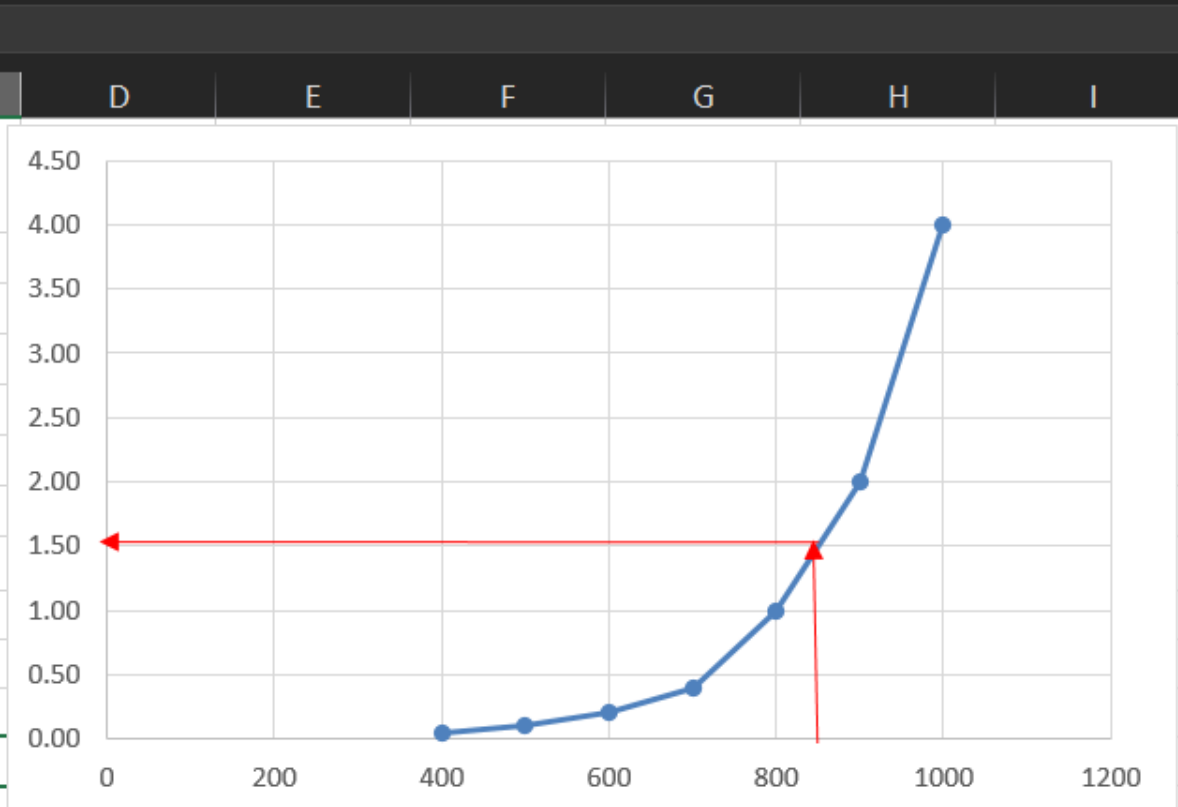


Archivo Inicio Insertar Disposición de página Fórmulas Datos Revisar Vista Programador Ayuda

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

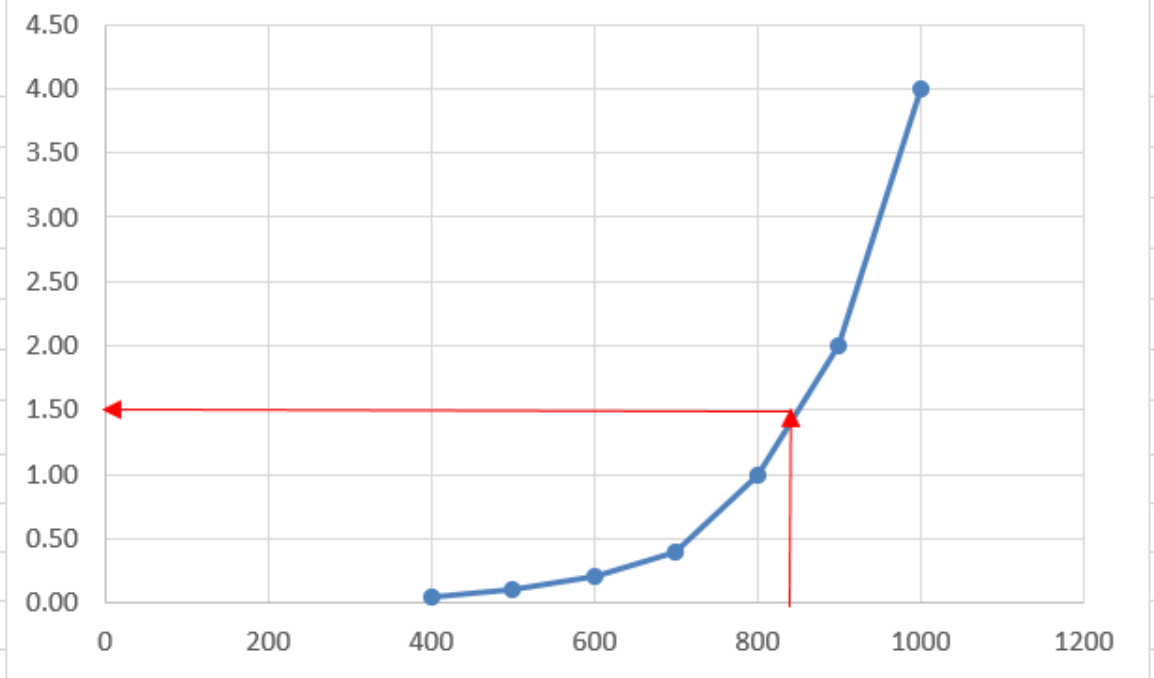
Comentarios Compartir

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

Formato condicional Dar formato como tabla Estilos de celda

Insertar Eliminar Formato

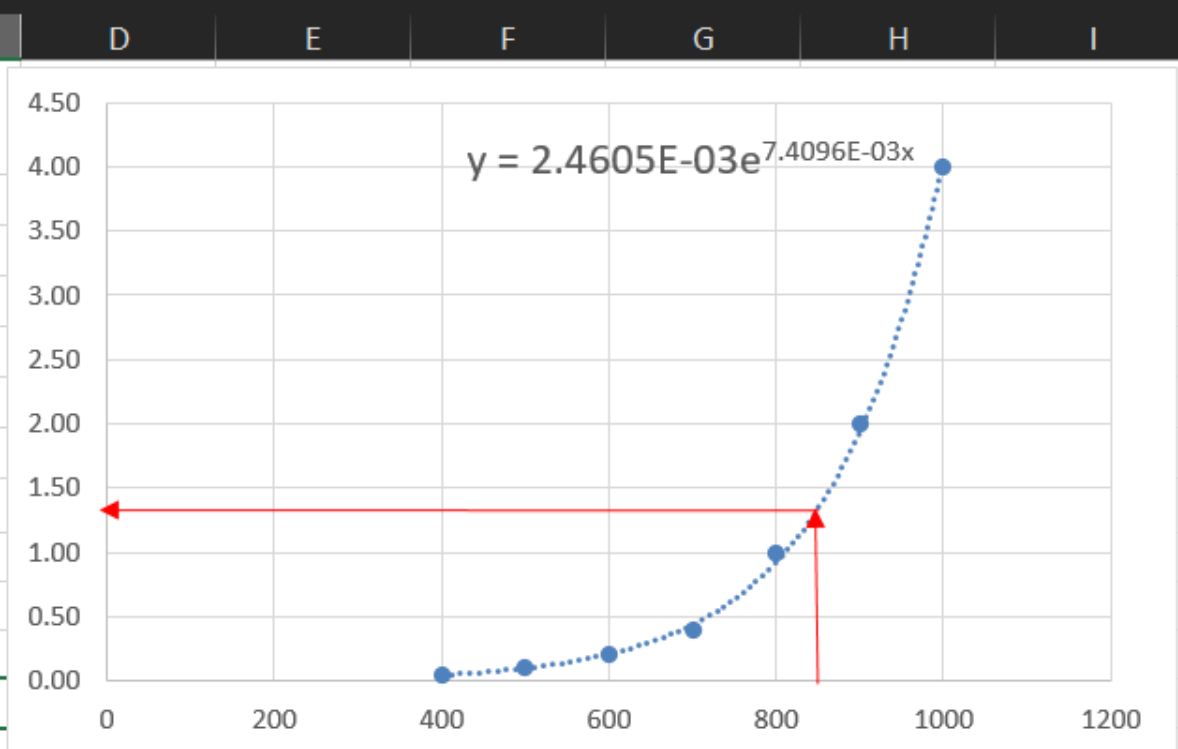
Ordenar y filtrar Buscar y seleccionar

Complementos Analizar datos

C12

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



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

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

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

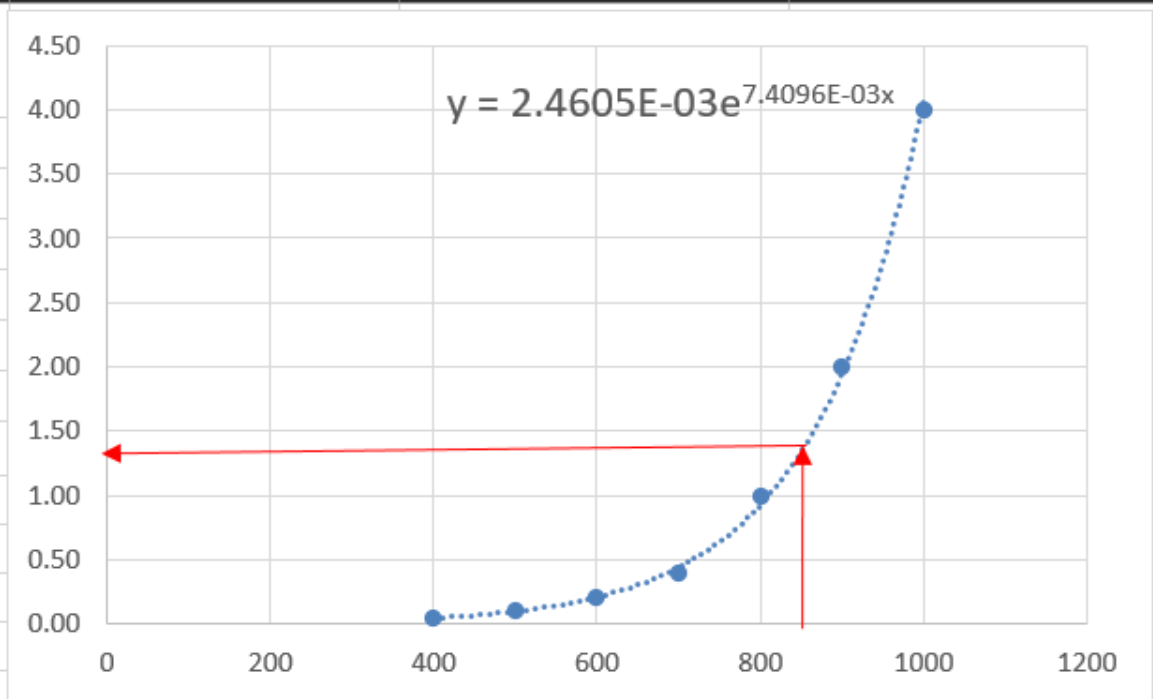
Comentarios Compartir

Calibri 11 Fuente Alineación Número Estilos Celdas Edición Complementos Analizar datos

B12 =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

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

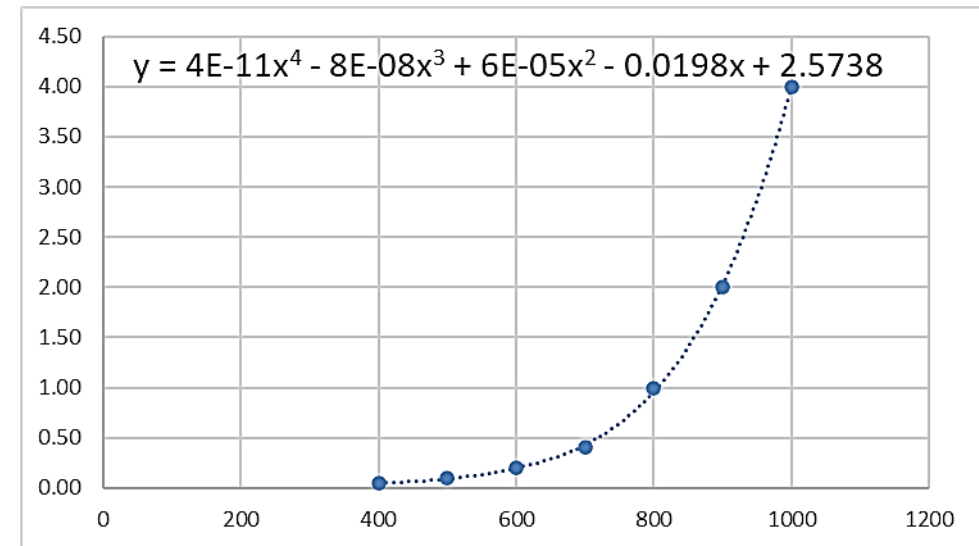
$$E_R = \frac{y(x) - y}{y}$$

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

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

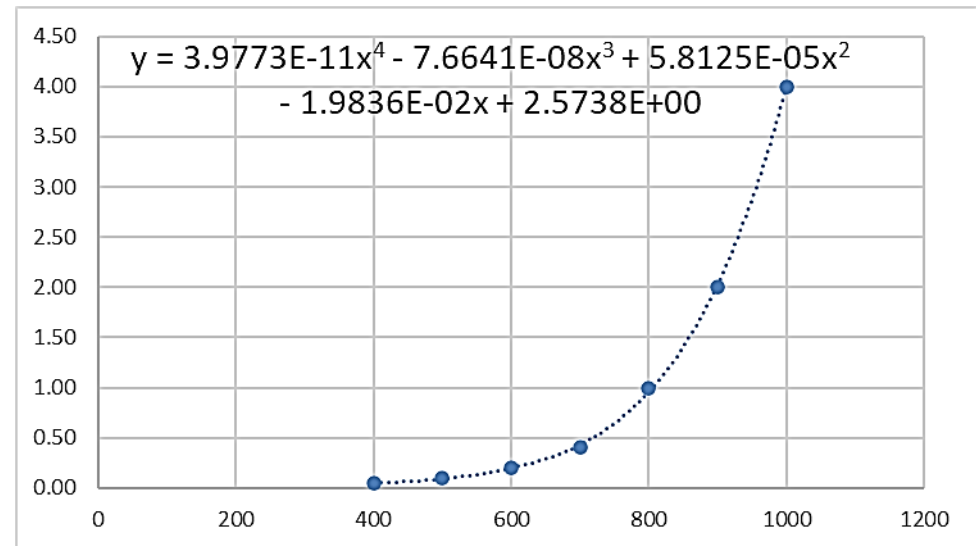
Ejemplos con 4 c. s.

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

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

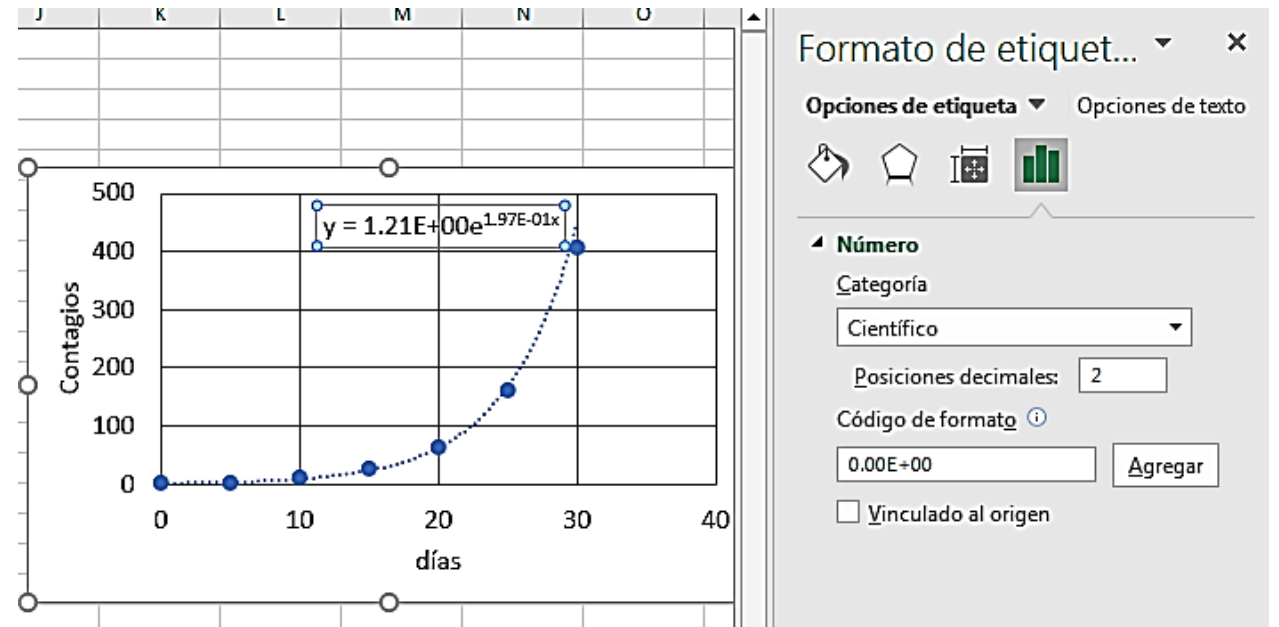


Buscar:	x
Reemplazar:	"A2"

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

Regresión

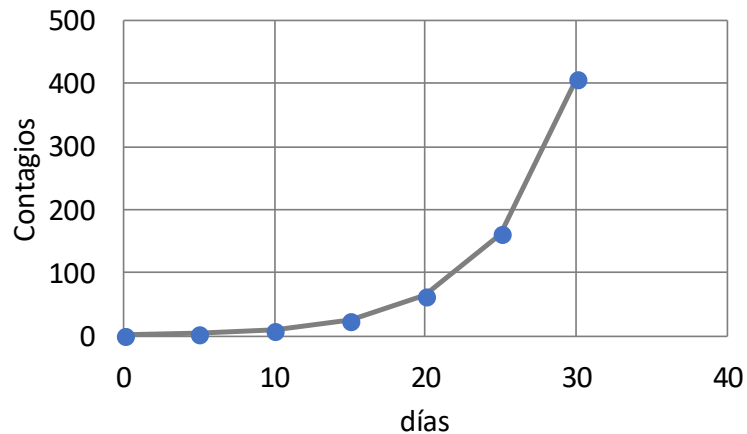
- Línea de tendencia en Excel
- Dar formato científico a los coeficientes:
 - c. s. = decimales + 1
- Coeficiente de determinación R^2 :
 - Está entre 0 y 1.
 - $$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (f(x_i) - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} = \frac{Var(F)}{Var(Y)}$$



Interpolación vs. regresión

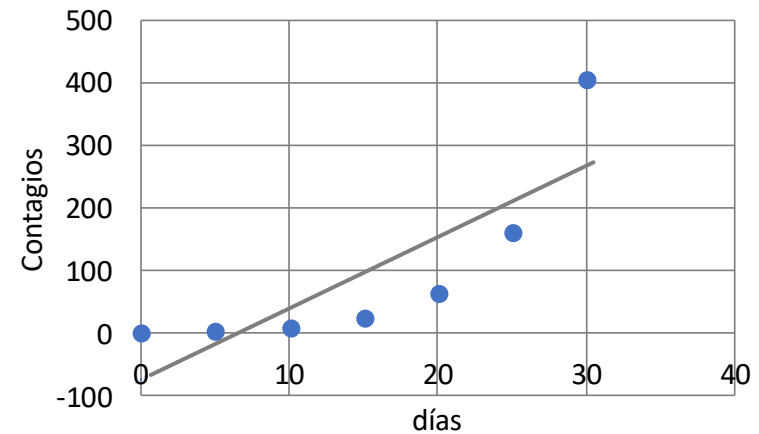
Interpolación

- 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.



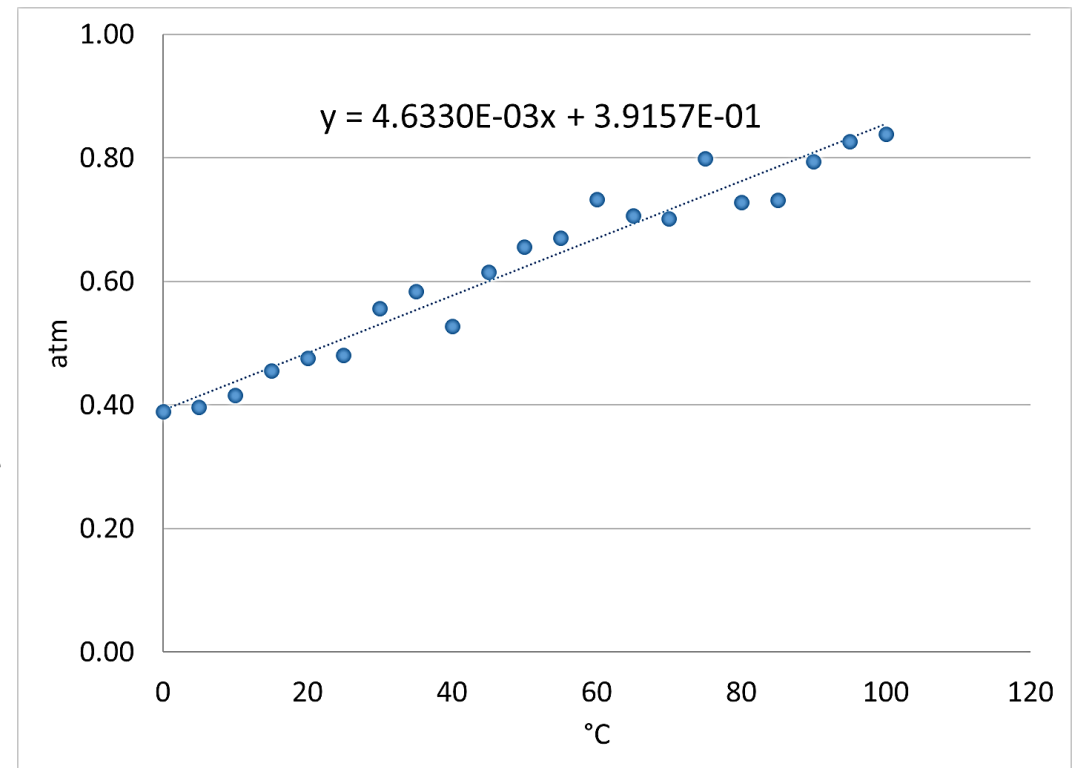
Depósito de gas

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

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

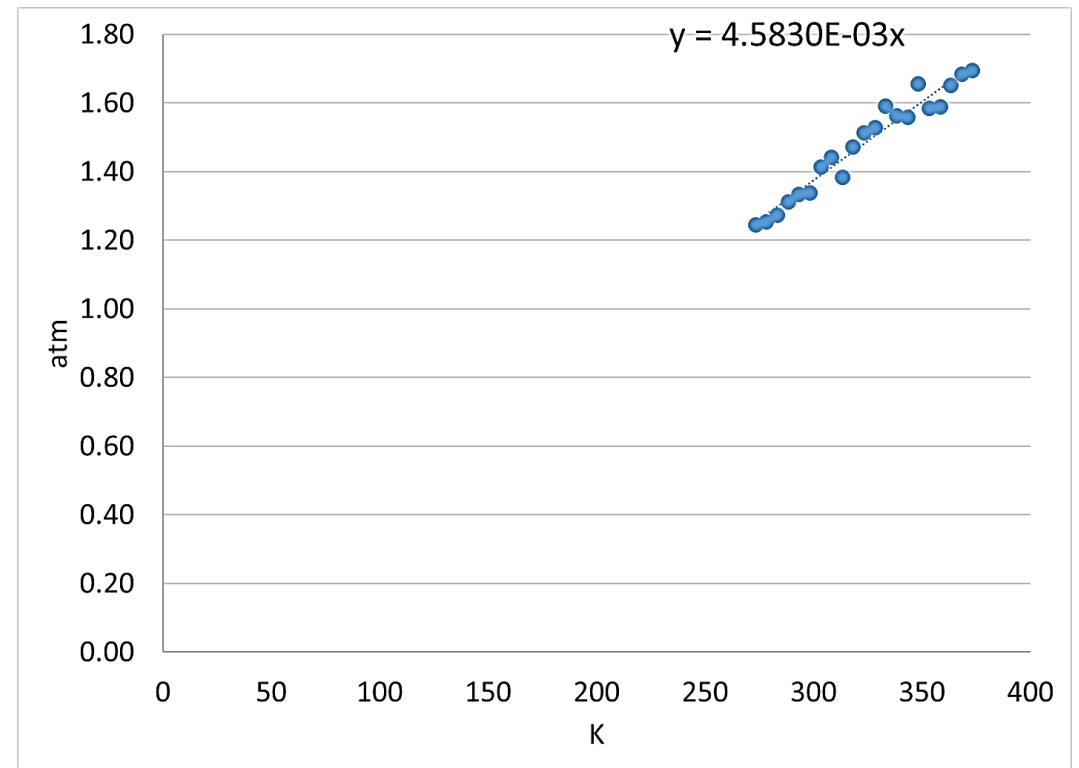


Depósito de gas

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

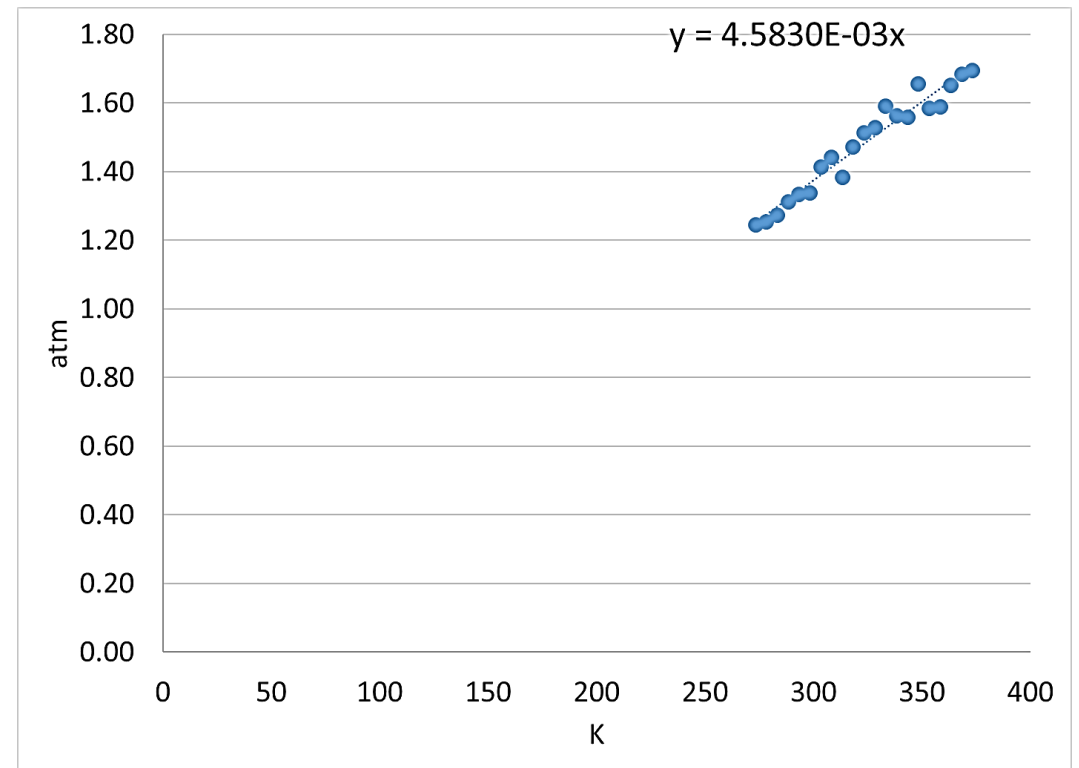
En el futuro periodos

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?
- $a = \frac{nR}{V}$

