

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

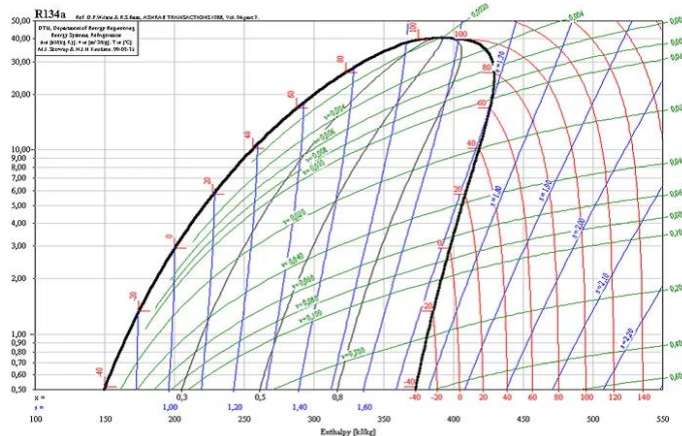
- Consideran los primeros principios.
- Explican el proceso.
- Requieren menos datos.
- El rango de validez está dado por el dominio de las leyes físico-químicas.
- Pueden extrapolar.
- Si el sistema se modifica, generalmente, siguen siendo válidos.
- No siempre es posible o conveniente desarrollarlos.

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

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

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

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

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

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

$$r = kC_A$$

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

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

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

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

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

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

Modelos empíricos

Conductividad del germanio

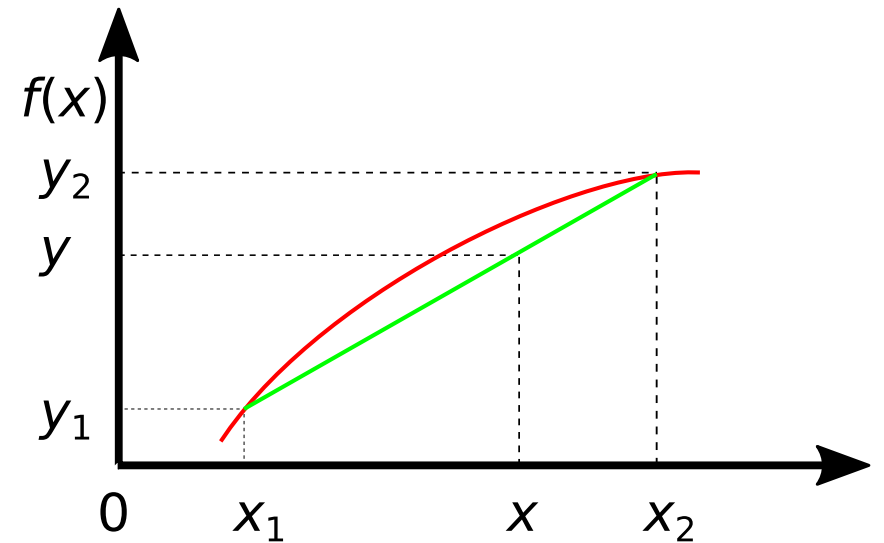
T (K)	σ_{Ge} (10^{-4} S/cm)
400	0.05
500	0.10
600	0.20
700	0.40
800	1.00
900	2.00
1000	4.00



Interpolación lineal

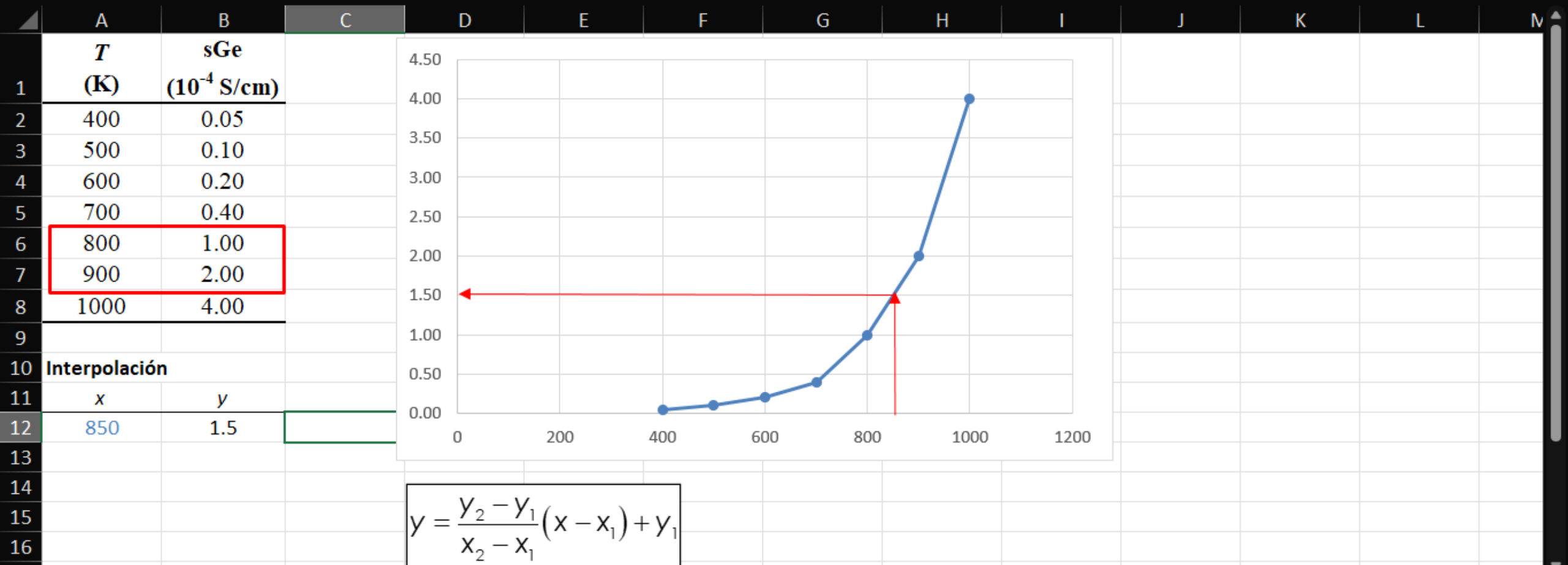
- Interpolación lineal
 - Regla de tres simple con Δ
 - Ecuación de línea recta:

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



Portapapeles Fuente Alineación Número Estilos Celdas Edición Complementos Analizar datos

C12



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

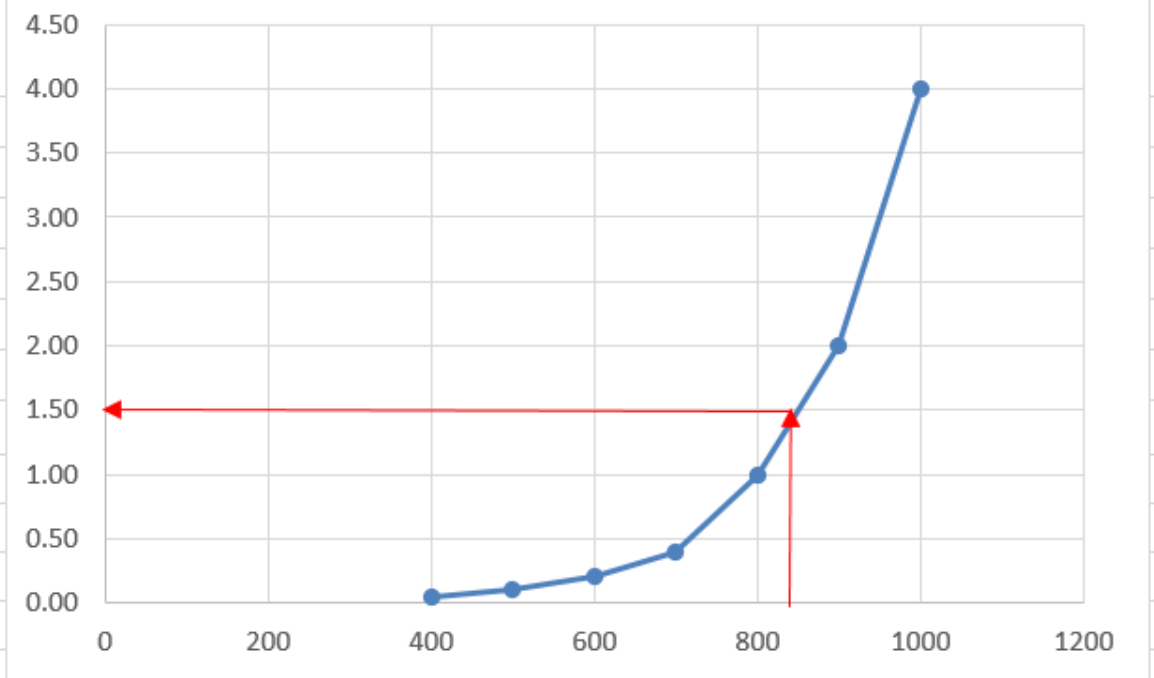
Comentarios Compartir

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

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

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

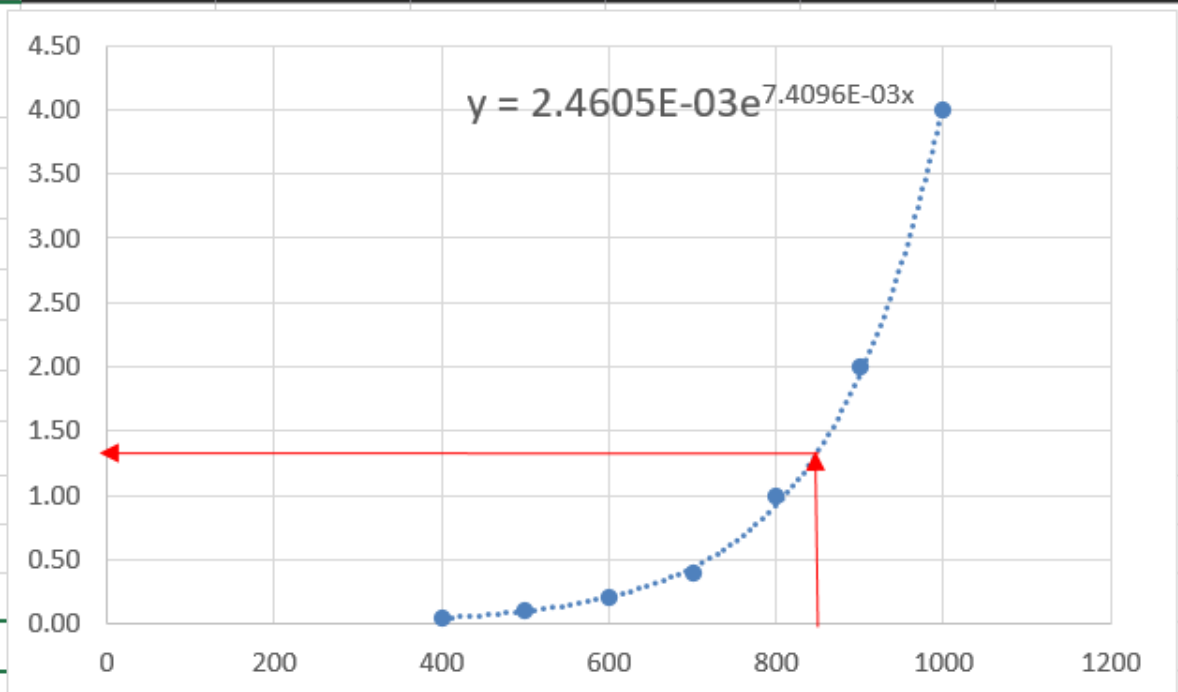
Comentarios Compartir

Calibri 11 Fuente Alineación Número Estilos Celdas Edición

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

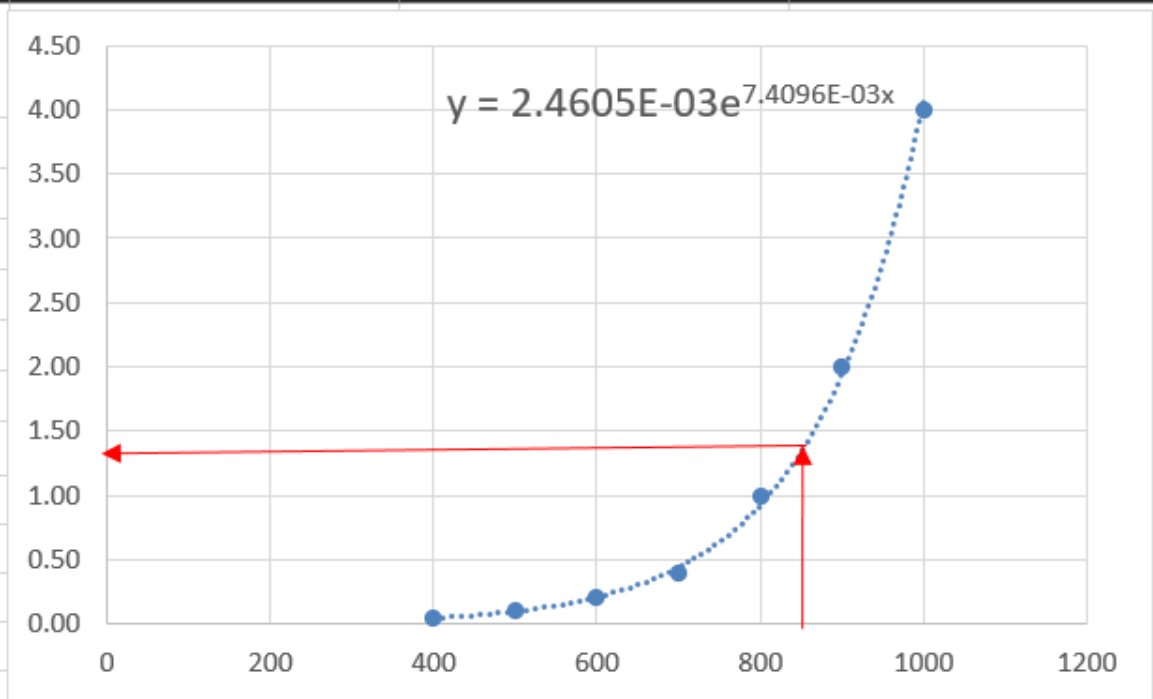
Comentarios Compartir

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

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

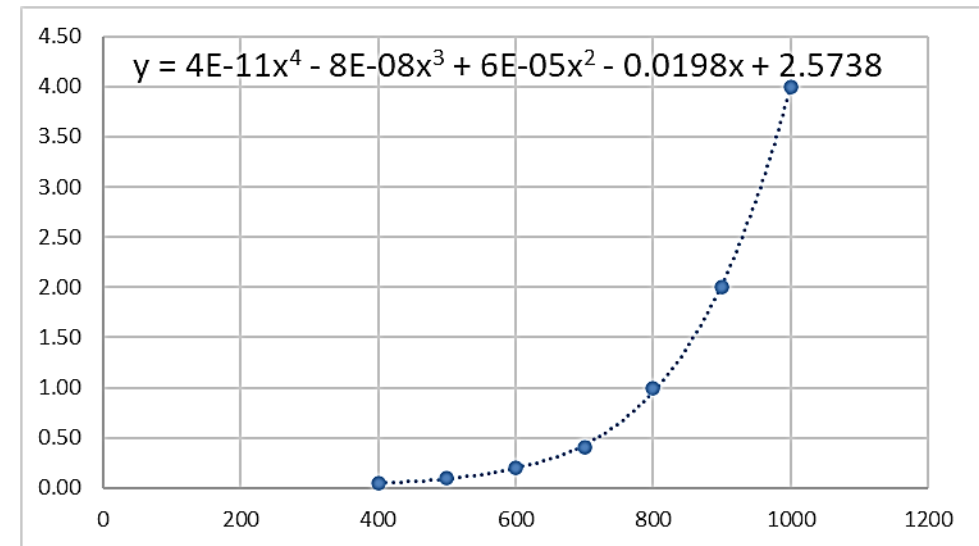
$$E_R = \frac{y(x) - y}{y}$$

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

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

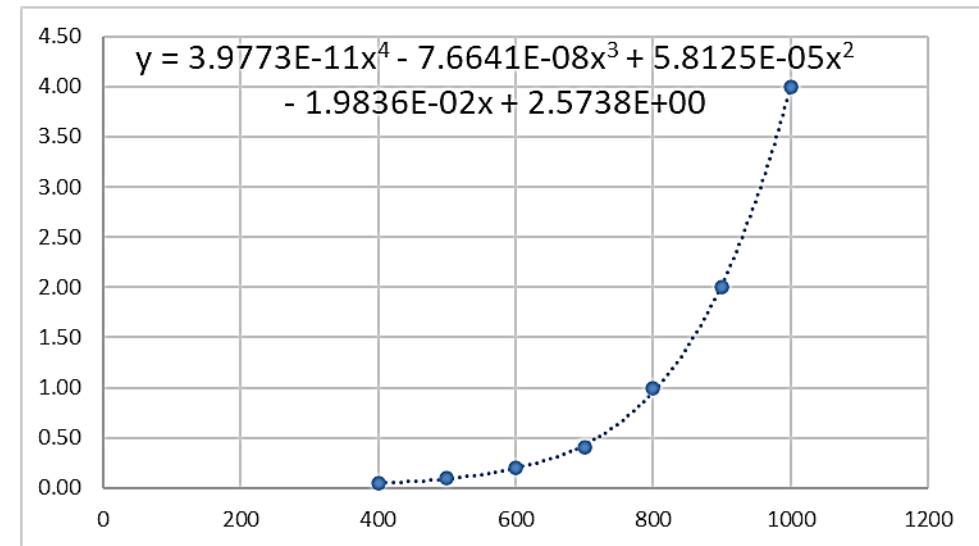
Ejemplos con 4 c. s.

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

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



Coeficientes con 5 c. s.

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

Cifras significativas

$$y = 3.9773E-11x^4 - 7.6641E-08x^3 + 5.8125E-05x^2 - 1.9836E-02x + 2.5738E+00$$

Ctrl+C

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



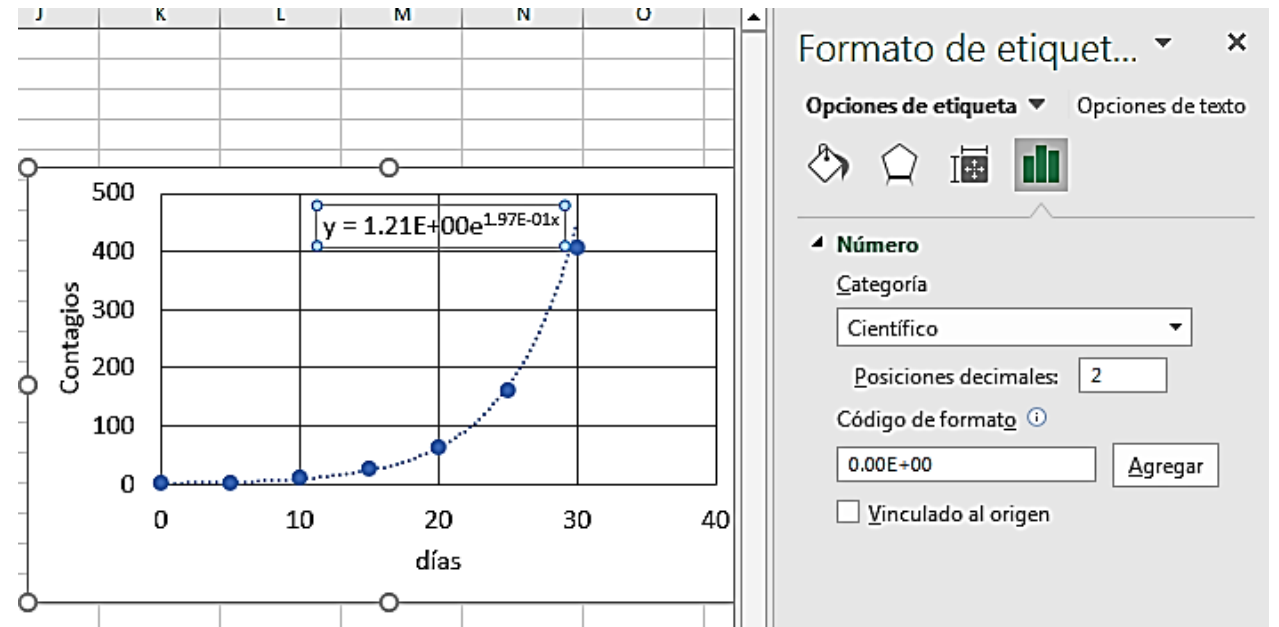
Buscar: x
Reemplazar: *A2^|

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

Regresión

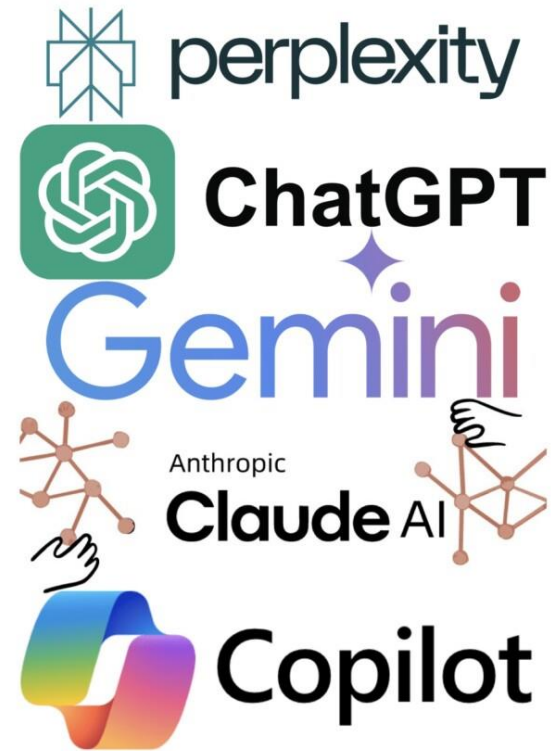
- Línea de tendencia en Excel
- Modelo adecuado
- Formato científico:
 - c. s. = decimales + 1
- Coeficiente de determinación R^2 :
 - Está entre 0 y 1.

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (f(x_i) - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} = \frac{Var(F)}{Var(Y)}$$



Modelo adecuado

Actúa como un experto en Ingeniería Química. Si tengo un conjunto de datos experimentales de medidas de densidad en función de la temperatura para una sustancia pura, ¿cómo puedo elegir entre una función y otra función alternativas ajustadas por regresión a esos datos?

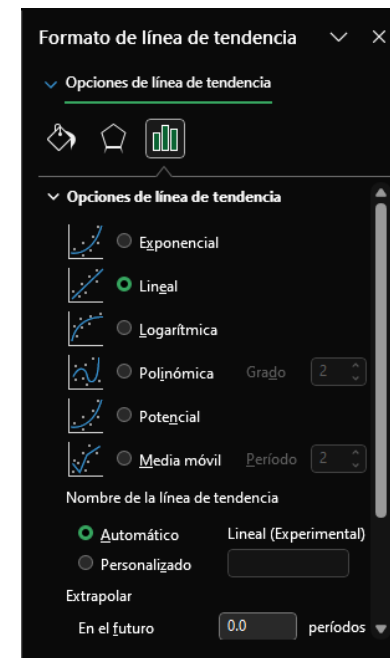


Línea de tendencia

Modelo de optimización

- Lineal: Utiliza mínimos cuadrados.
- Polinómica: Utiliza mínimos cuadrados.
- Media móvil: No optimiza. Calcula promedio.
- Restantes: Linealiza y aplica mínimos cuadrados. ¡Cuidado!

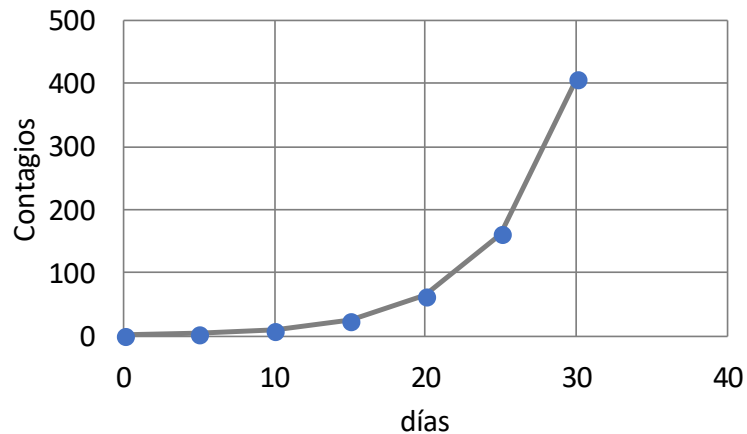
Funciones



Interpolación vs. regresión

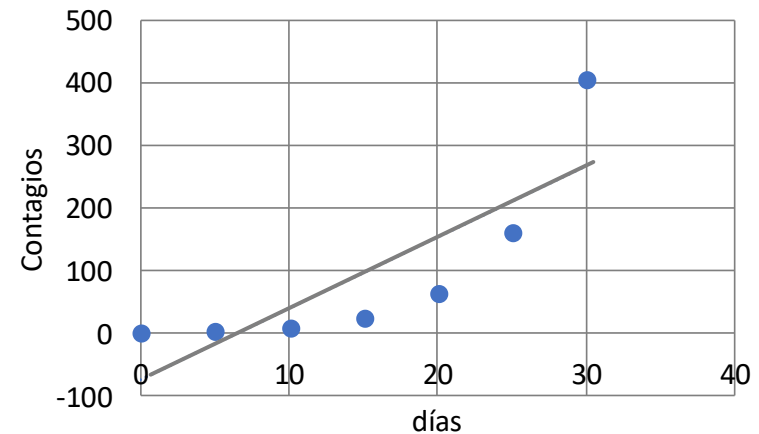
Interpolación

- 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.



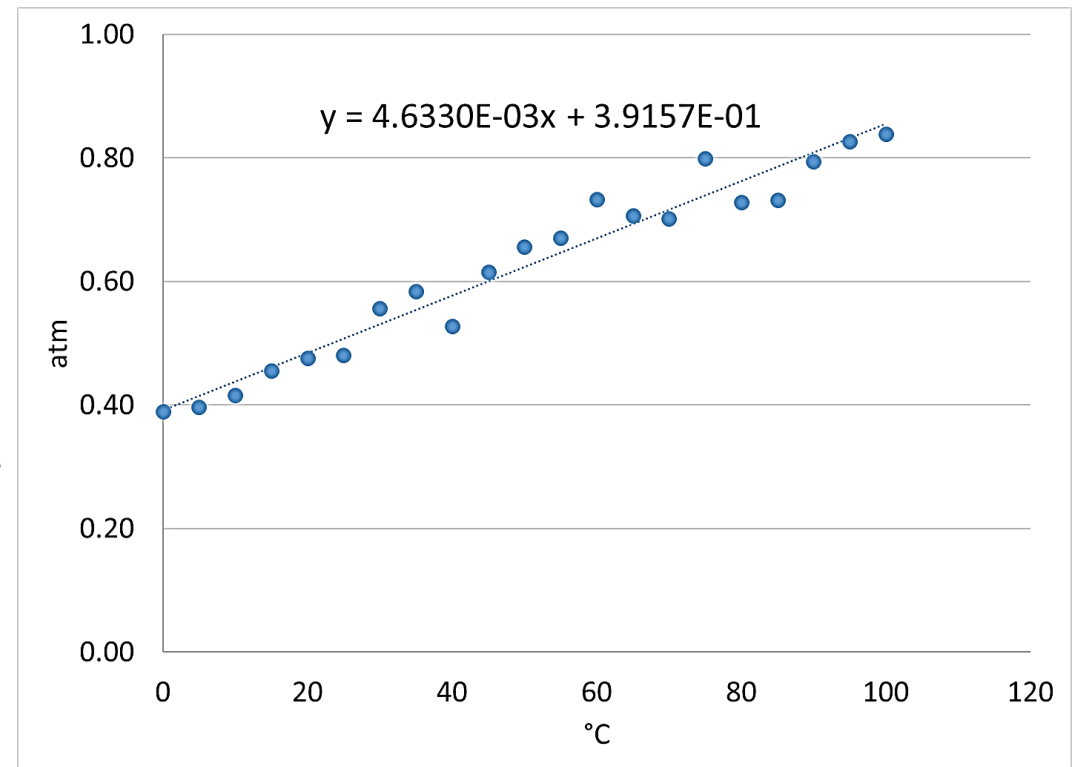
Depósito de gas

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

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

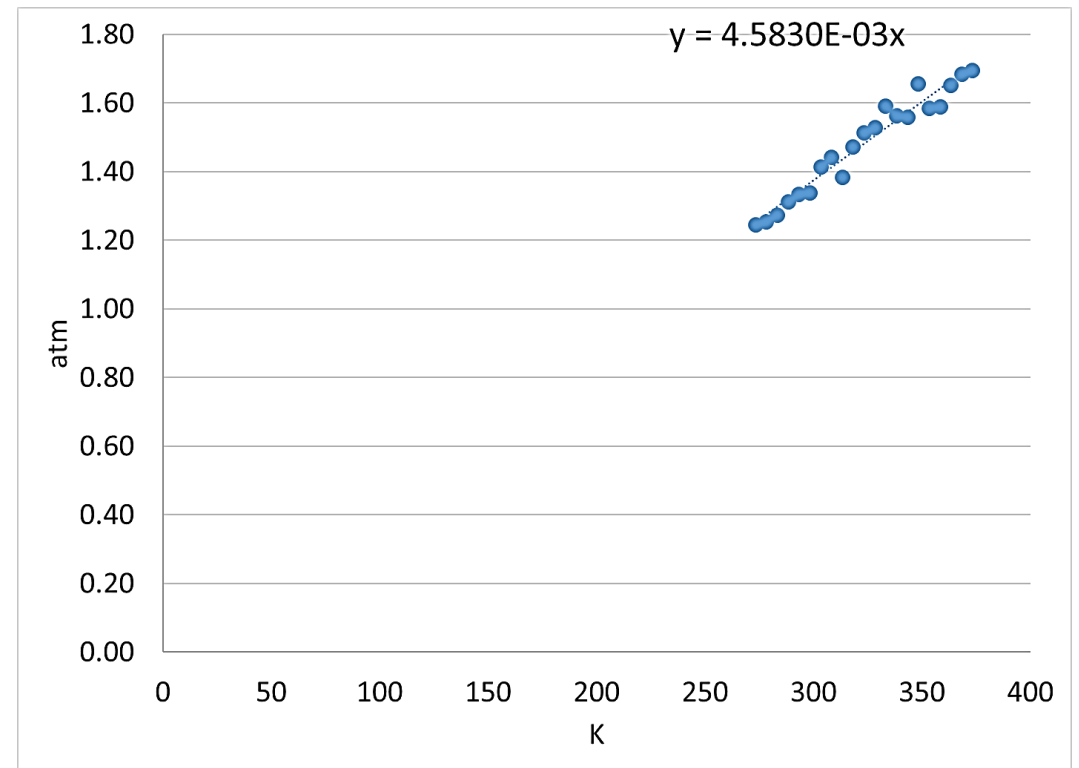


Depósito de gas

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

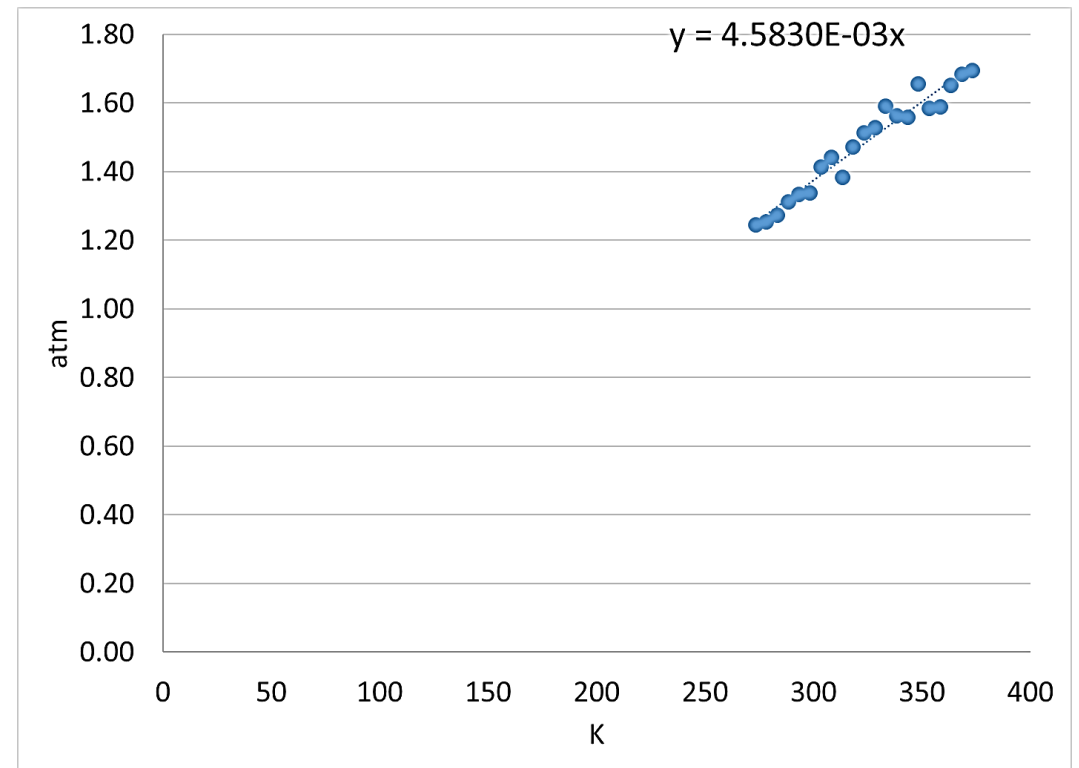
En el futuro periodos

En el pasado periodos

Señalar intersección

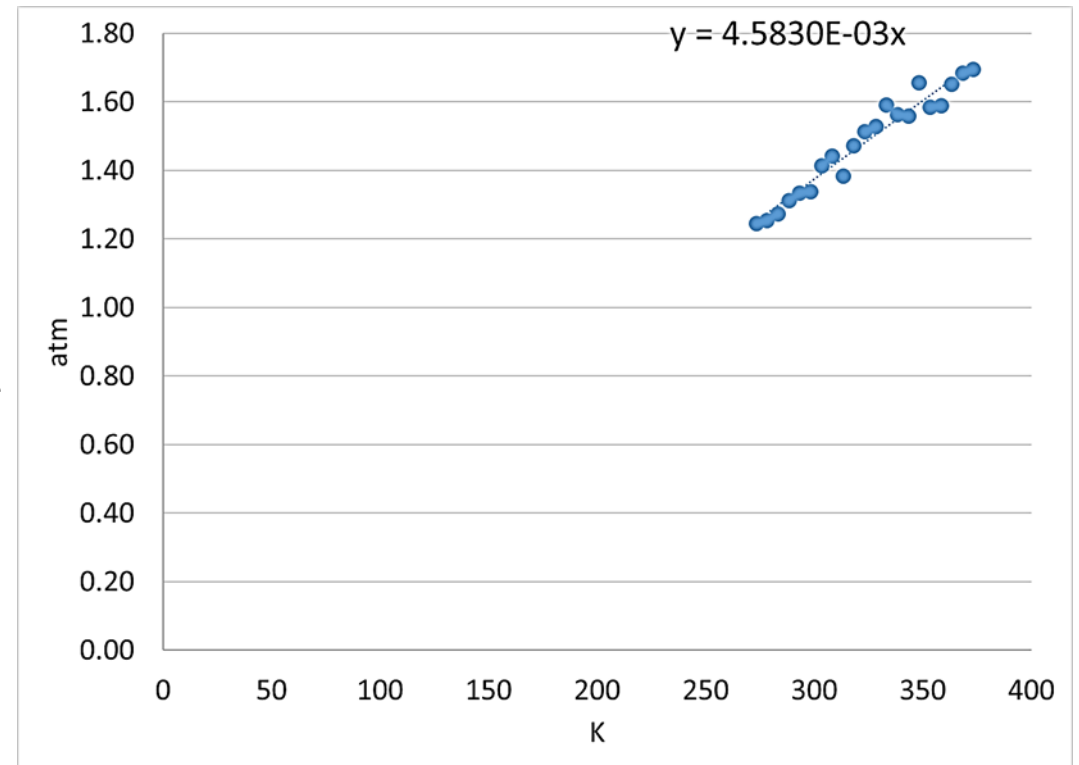
Presentar ecuación en el gráfico

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



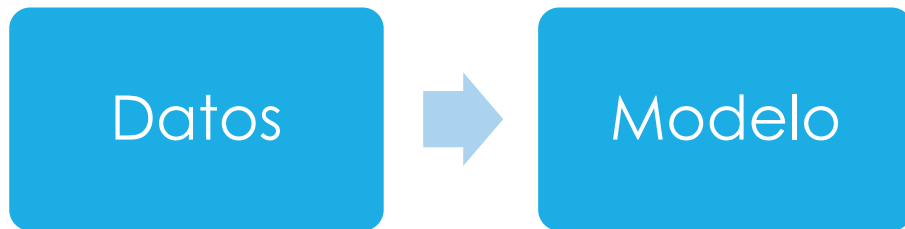
Inteligencia artificial generativa

Inteligencia artificial generativa

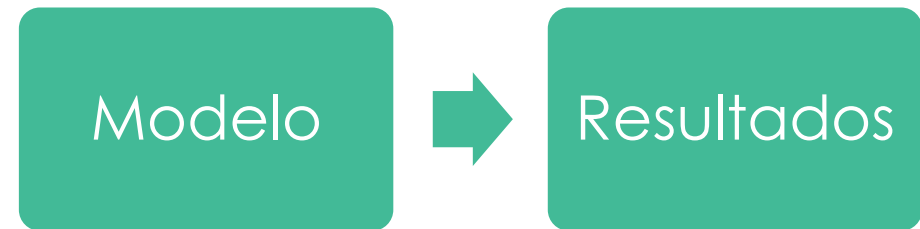
La inteligencia artificial generativa o IA generativa es un tipo de sistema de inteligencia artificial (IA) capaz de generar texto, imágenes u otros medios en respuesta a comandos. Los modelos de IA generativa aprenden los patrones y la estructura de sus datos de entrenamiento de entrada y luego generan nuevos datos que tienen características similares.

Etapas de un modelo de IA generativa

Entrenamiento



Inferencia



¿qué es interpolar?, ¿qué es extrapolar?

IA generativas según entradas y salidas

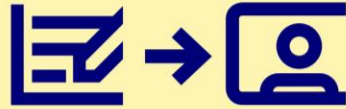
Texto a texto



Traducir, resumir, buscar información, aprendizaje en general, corregir textos.

ChatGPT, Peer, Perplexity, Bard, Copilot, Copymatic, Jasper, TutorAI, Bing.

Texto a imagen



Generar imágenes, inspirarse, crear arte, crear avatares, crear logos.

Midjourney, DALL-E, Bing Image Creator, Stable Diffusion, Adobe Firefly, Fotor, Craiyon.

Texto a audio



Generar ficheros de audio, audiolibros, pódcast, crear locuciones con voces de otras personas o la propia, traducir vídeos, crear temas musicales con parámetros seleccionados, modificar otros temas musicales.

AudioLM, Whisper, Jukebox, Murf, Mubert, AudioStrip (per separar música i veu), Boomy.

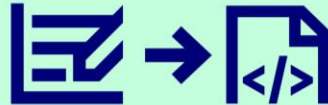
Texto a vídeo



Generar vídeos con características específicas seleccionadas, editar vídeos, traducir vídeos.

Phenaki, Sundify, Synthesia

Texto a código



Generar o mejorar el propio código, documentarlo.

Alphacode, Codex, GitHub, Copilot, Ghostwriter, Tabnine, SourceAI.

Texto a ciencia



Obtener respuestas con base científica, hacer una lluvia de ideas con la investigación existente, encontrar artículos científicos relacionados con las respuestas de la IA.

Elicit, Consensus, Scite.

Texto a 3D



Generar imágenes para utilizar en videojuegos, obtener una imagen más completa y profunda de un objeto, mejorar las simulaciones o el diseño de elementos de realidad virtual.

Dreamfusion, Magic3d.

Imagen a texto



Proveer descripciones más precisas o resumidas de imágenes, mejorar la accesibilidad en el caso de discapacidades visuales.

Flamingo, VisualGPT.

Otras



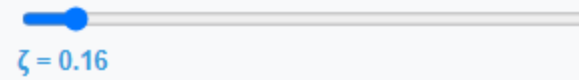
Descubrir nuevos algoritmos, realizar multitud de tareas de IA más allá del nivel de especialización que ahora mismo tienen las herramientas de IA. También el caso de las IA multimodales que pueden procesar diferentes tipos de datos

Alphatensor, GATO, CoDI.

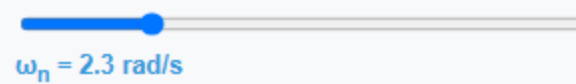
Simulador de Sistema de Segundo Orden

Función de transferencia: $G(s) = \omega_n^2 / (s^2 + 2\zeta\omega_n s + \omega_n^2)$

Coefficiente de amortiguamiento (ζ):



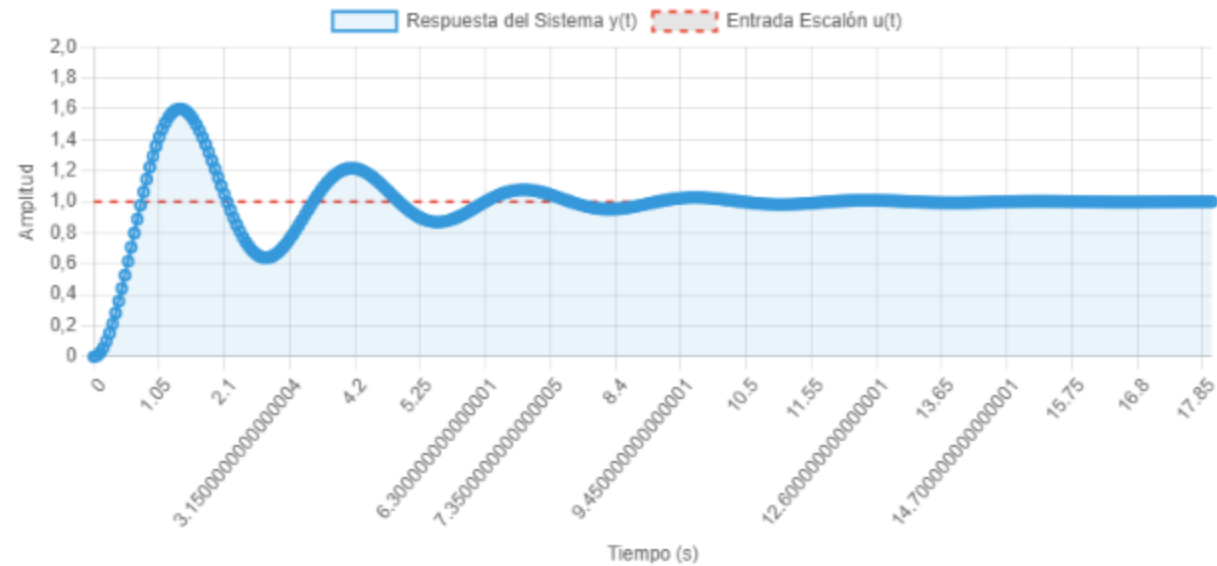
Frecuencia natural (ω_n):



Tipo de respuesta: Subamortiguada

Reiniciar Simulación

Respuesta al Escalón Unitario






ESTRUCTURA DE PROMPT UNIVERSAL PARA LOS PRINCIPALES LLMs

vicentgadea.com

COMPONENTES

DESCRIPCIÓN

1	Persona/rol		Define el rol desde el cual debe responder el modelo.
2	Objetivo/Tarea		Especifica claramente la acción o resultado esperado.
3	Contexto		Proporciona información relevante y antecedentes detallados.
4	Fuente		Indica datos o adjunta documentos específicos.
5	Formato		Define el formato, tono o nivel de detalle.
6	Instrucciones paso a paso		Sugiere pasos secuenciales si es necesario.
7	Ejemplos		Incluye ejemplos relevantes.
8	Delimitadores		Usa comillas o símbolos para segmentar el prompt.
9	Iteración/Refinamiento		Proceso iterativo recomendado para ajustes.

Estructura de un *prompt*

ChatGPT 4o ▾

27/3/2025

Actúa como un ingeniero químico. Dime cuál es la presión de vapor del agua a 40 °C en kPa.

Como ingeniero químico, te informo que la **presión de vapor del agua a 40 °C** es aproximadamente:

7.38 kPa

Este valor se obtiene a partir de **tablas de propiedades del agua** (por ejemplo, del Manual de Perry, NIST o IAPWS). Representa la presión a la cual el agua pura entra en equilibrio con su vapor a esa temperatura.



[ChatGPT](#)

Estructura de un *prompt*

ChatGPT 4o ▾

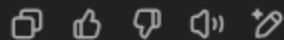
27/3/2025

Actúa como un ingeniero químico. Dime cuál es la presión de vapor del agua a 45 °C en kPa.

Como ingeniero químico, te informo que la **presión de vapor del agua a 45 °C** es aproximadamente:

7.937 kPa

Este valor proviene de **tablas de propiedades termodinámicas del agua**, y representa la presión a la cual el agua líquida entra en equilibrio con su fase de vapor a esa temperatura. Es útil en cálculos de humedad, diseño de equipos de evaporación, secado y transferencia de masa.



[ChatGPT](#)

Verificación

ChatGPT:

- 40 °C, 7.38 kPa 
- 45 °C, 7.937 kPa 

Fuente 1

$t_{\text{sat}}(^{\circ}\text{C})$	$p_{\text{sat}}(\text{kPa})$
0	0.6105
5	0.8722
10	1.228
20	2.338
30	4.243
40	7.376
50	12.33
60	19.92
70	31.16
80	47.34
90	70.10
100	101.3

Fuente 2

T(°C)	PSAT(kpa)
0,01	0,6113
5	0,8721
10	1,2276
15	1,7051
20	2,339
25	3,169
30	4,246
35	5,628
40	7,384
45	9,593
50	12,349
55	15,758
60	19,94

Chats con IA

- [ChatGPT \(OpenAI\)](#)
- [Google Gemini](#)
- [Microsoft Copilot](#)
- [Claude AI \(Anthropic\)](#)
- [Perplexity AI](#)

