controle_qualidade_aps2

June 25, 2018

```
In [1]: Pkg.add("DataFrames");
        using DataFrames;
        Pkg.add("Gadfly");
        using Gadfly;
```

```
INFO: Package DataFrames is already installedINFO: METADATA is out-of-date  you may not have the
```

0.1 Atividade Prática Supervisionada

Apresente propostas para o ensino do tema *calibração* utilizando as propriedades da tabela periódica, como mostra no artigo anexado.[1]

Exemplo: Selecione cerca de 5 elementos, construa a curva de calibração e forneça os valos dos coeficientes: linear e angular, do coeficiente de correlação e da equação da reta.

Apresente ao menos duas propostas.

0.1.1 Primeira proposta

Utilizando somente a tabela de propriedades dos elementos fornecida pelo artigo, minha proposta é relacionar o raio atômico com a eletronegatividade, que é uma abordagem simples e comumente utilizada em cursos de Química Geral.

0.1.2 Segunda proposta

Utilizando novamente somente os valores fornecidos pela tabela anexa ao artigo, essa proposta visa relacionar a densidade do elemento com seu calor específico.

0.1.3 Terceira proposta

Utilizando a tabela anexa ao artigo, essa proposta relaciona a entropia padrão com a condutividade térmica.

0.1.4 Observações

Foram utilizados os mesmos elementos selecionados para todas as propostas, são eles o Lítio, Boro, Flúor, Potássio, Ferro, Gálio e Bromo, selecionados através de um relativo espaçamento entre a distribuição dos elementos na Tabela Periódica dos Elementos.

Determinação dos parâmetros de linearidade a, b e Rš Seja a mediana $\overline{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i$, o vetor resíduos $e_i = y_i - f_i$, a soma dos quadrados $SS_{tot} = \sum_i (y_i - \overline{y})^2$, a soma dos quadrados de regressão $SS_{reg} = \sum_i (f_i - \overline{y})^2$, e a soma dos quadrados residuais $SS_{res} = \sum_i e_i^2$, podemos encontrar o coeficiente de correlação R^2 através de $R^2 = 1 - \frac{SS_{res}}{SS_{tot}}$.

Função de determinação

In [38]:
```
function determinacao_linear(table, xlabel, ylabel, title)
    a, b = linreg(convert(Array, table[:][2]), convert(Array, table[:][3]));
    equacao_reta = b*(table[:][2]) + a;

    plot_object = plot(
        layer(table, x=table[:][2], y=table[:][3], color=:Elemento, Geom.point),
        layer(x=table[:][2], y=equacao_reta, Geom.line),
        Guide.xlabel(xlabel),
        Guide.ylabel(ylabel),
        Guide.title(title)
    );

    mediana = sum(table[:][3])/length(table[:][3]);
    vetor_residuos = map(-, table[:][3], equacao_reta);
    yi_y = table[:][3] - mediana;
    SS_tot = sum(abs2, yi_y);
    SS_res = sum(abs2, vetor_residuos);
    Rš = 1 - (SS_res/SS_tot);

    return_string = "Sejam os parâmetros\nCoeficiente linear a: $a\nCoeficiente angular
    split(return_string, "\n"), plot_object
end
```

Out[38]:
```
determinacao_linear (generic function with 1 method)
```

0.2 Raio atômico x Eletronegatividade

In [75]:
```
table = DataFrame(Elemento = String[], Raio_Atomico = Int16[], Eletronegatividade = Flo
push!(table, ["Li" 157 0.98]);
push!(table, ["B" 88 2.04]);
push!(table, ["F" 64 3.98]);
push!(table, ["K" 235 0.82]);
push!(table, ["Fe" 124 1.83]);
push!(table, ["Ga" 153 1.81]);
push!(table, ["Br" 114 2.96]);
table
```

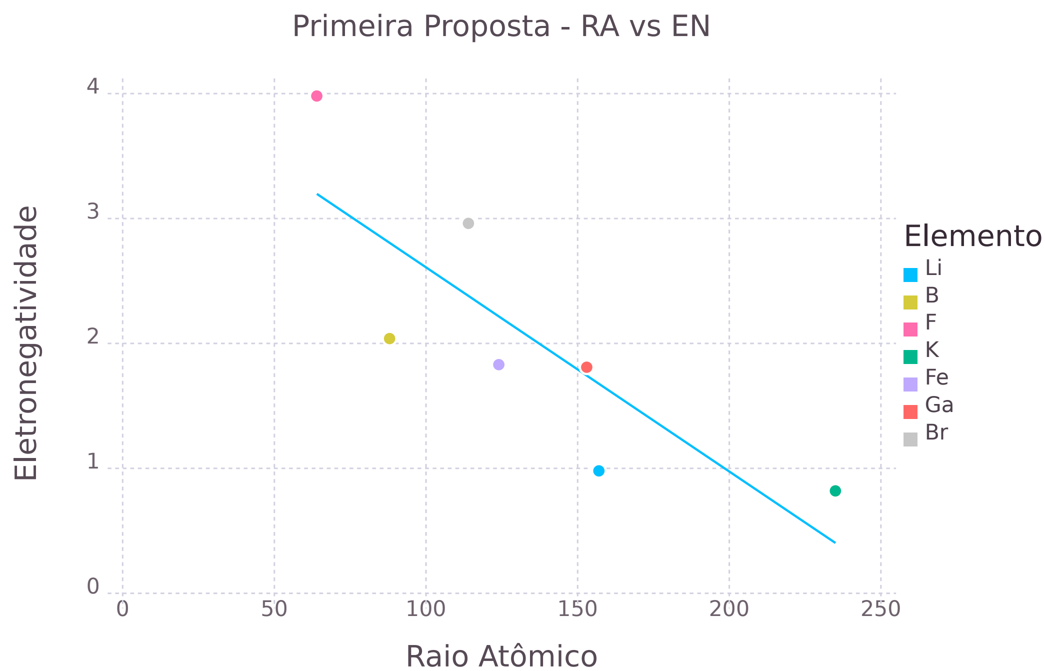
Out[75]:
```
7Œ3 DataFrames.DataFrame
 Row  Elemento  Raio_Atomico  Eletronegatividade
```

```
1     Li         157            0.97998
2     B          88             2.0391
3     F          64             3.9805
4     K          235            0.81982
5     Fe         124            1.8301
6     Ga         153            1.8096
7     Br         114            2.9609
```

```
In [76]: resultado,grafico = determinacao_linear(table, "Raio Atômico", "Eletronegatividade", "P
```

```
In [77]: grafico
```

```
Out[77]:
```



Nota-se claramente que a eletronegatividade diminui conforme aumenta o raio atômico, esta relação está de acordo com a literatura [2] que relaciona o aumento da eletronegatividade com a carga nuclear efetiva e o efeito de blindagem.

```
In [78]: map(println, resultado);
```

```
Sejam os parâmetros
Coeficiente linear a: 4.242748673818287
Coeficiente angular b: -0.016341518242763364
Coeficiente de correlação Rš: 0.6787303527604368
Equação da reta y = -0.016341518242763364(x) + 4.242748673818287
```

0.3 Densidade x Calor Específico

In [79]:
```
table = DataFrame(Elemento = String[], Densidade = Float16[], Calor_Especifico = Float1
push!(table, ["Li" 0.534 3.58]);
push!(table, ["B" 2.34 1.11]);
push!(table, ["F" 0.001696 0.753]);
push!(table, ["K" 0.862 0.758]);
push!(table, ["Fe" 7.874 0.447]);
push!(table, ["Ga" 5.907 0.377]);
push!(table, ["Br" 3.12 2.96]);
table
```

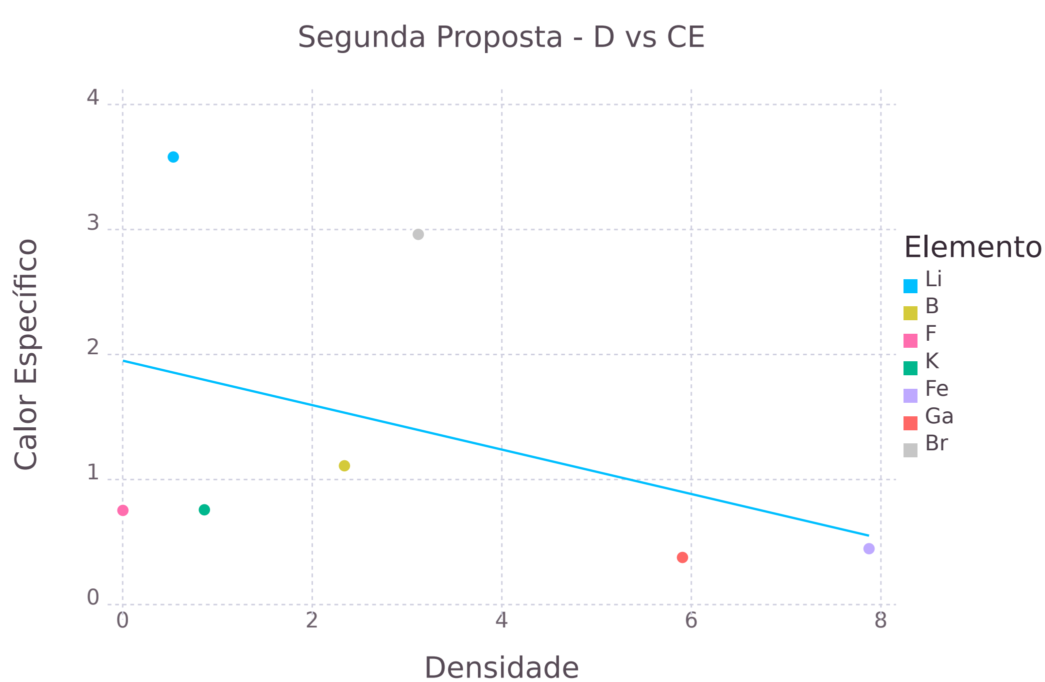
Out[79]:
```
7Œ3 DataFrames.DataFrame
 Row  Elemento  Densidade   Calor_Especifico

 1    Li        0.53418     3.5801
 2    B         2.3398      1.1104
 3    F         0.0016956   0.75293
 4    K         0.86182     0.75781
 5    Fe        7.875       0.44702
 6    Ga        5.9063      0.37695
 7    Br        3.1191      2.9609
```

In [80]:
```
resultado,grafico = determinacao_linear(table, "Densidade", "Calor Específico", "Segund
```

In [81]:
```
grafico
```

Out[81]:



Nota-se que conforme a densidade aumenta, diminui o calor específico, o que está de acordo com a literatura [2,3] pois $Q = C\Delta T = cm\Delta T$ tal que \$c = \$ calor específico, se $d = \frac{m}{V}$, então $m = dV$ e $c = \frac{C}{dV}$.

```
In [82]: map(println, resultado);
```

```
Sejam os parâmetros
Coeficiente linear a: 1.9506937
Coeficiente angular b: -0.17776845
Coeficiente de correlação Rš: 0.1643402
Equação da reta y = -0.17776845(x) + 1.9506937
```

0.4 Entropia Padrão x Condutividade Térmica

```
In [83]: table = DataFrame(Elemento = String[], Entropia_Padrao = Float16[], Condutividade_Termi
         push!(table, ["Li" 29.12 84.8]);
         push!(table, ["B" 5.9 27]);
         push!(table, ["F" 202.78 0.0277]);
         push!(table, ["K" 64.18 102.4]);
         push!(table, ["Fe" 27.28 80]);
         push!(table, ["Ga" 40.8 29]);
         push!(table, ["Br" 152.23 0.12]);
         table
```

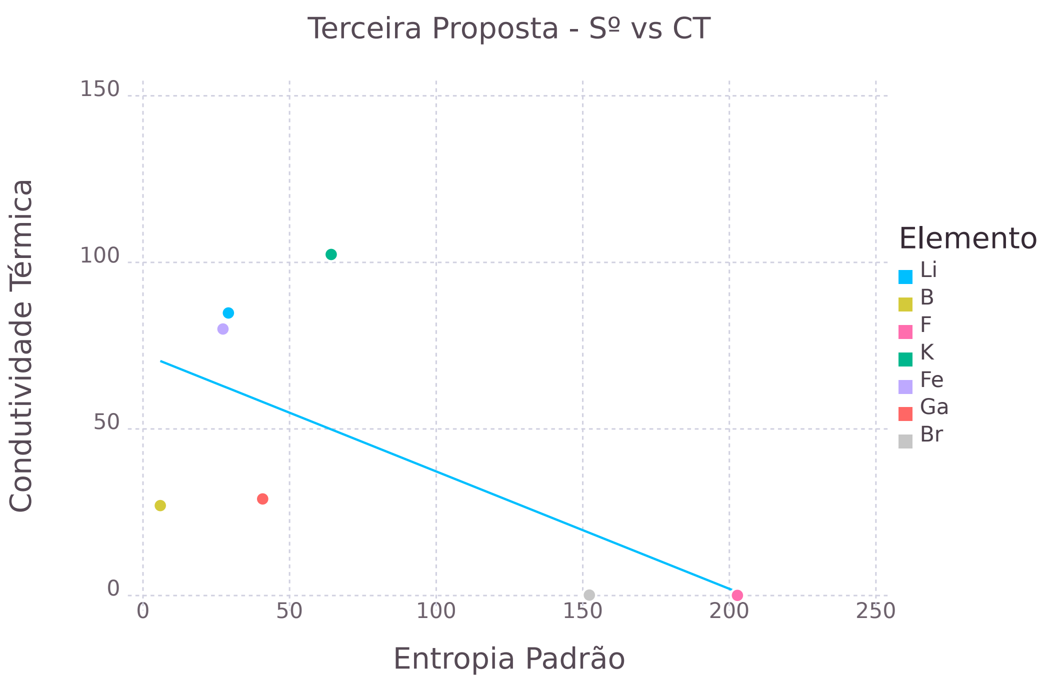
```
Out[83]: 7Œ3 DataFrames.DataFrame
```

Row	Elemento	Entropia_Padrao	Condutividade_Termica
1	Li	29.125	84.813
2	B	5.8984	27.0
3	F	202.75	0.027695
4	K	64.188	102.38
5	Fe	27.281	80.0
6	Ga	40.813	29.0
7	Br	152.25	0.12

```
In [84]: resultado,grafico = determinacao_linear(table, "Entropia Padrão", "Condutividade Térmic
```

```
In [85]: grafico
```

```
Out[85]:
```



A entropia é a energia em função do estado de liberdade das partículas, temos que $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ e $G = U + PV - TS$ e temos que $Q = U + W$. A condutividade térmica $k = \frac{\Delta Q}{\Delta t}\frac{L}{A\Delta T}$. A condutividade térmica relaciona as equações de transporte de Boltzmann, de modo geral é difícil recuperar relações entre a variação de entropia e condutividade térmica sem um estudo mais cuidadoso, seria mais interessante visualizar a relação entre condutividade térmica e calor específico e então através da relação observada tentar relacionar com a entropia. Este exemplo mostra a dificuldade normalmente encontrada no pré-processamento de dados no que tange ao uso correto das relações, um problema muito comum em Data Science.

```
In [87]: map(println, resultado);
```

```
Sejam os parâmetros
Coeficiente linear a: 72.488266
Coeficiente angular b: -0.35244313
Coeficiente de correlação Rš: 0.37963986
Equação da reta y = -0.35244313(x) + 72.488266
```

0.4.1 Referências

[1] DA SILVA LYRA, Wellington et al. Classificação periódica: um exemplo didático para ensinar análise de componentes principais. Quim. Nova, v. 33, n. 7, p. 1594-1597, 2010.

[2] ATKINS, Peter W.; JONES, Loretta. Princípios de Química-: Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente. Bookman Editora, 2012.

[3] HALLIDAY, D.; RESNICK, R.; WALKER, J. Fundamentos de Física, 8a. edição, Vol. 2, LTC. 2008.