Facultad de Ingeniería | Universidad de Buenos Aires

1er. Cuatrimestre | 2021

95.10 | Modelación numérica
75.12 | Análisis numérico I A
95.13 | Métodos matemáticos y numéricos

Trabajo Práctico #2

Curva de sorción de iodo de fibras de poliéster

Problema

La sorción de iodo es un parámetro utilizado para evaluar indirectamente el volumen libre en fibras celulósicas. También esta variable resulta de interés en la industria textil para evaluar fibras de poliéster. Los ensayos en los que se cuantifica la sorción de iodo según la temperatura permiten distinguir con precisión muestras de las que se desee conocer si tienen diferencias en su microestructura, que pueden conducir a diferentes absorciones de colorante en un proceso tintóreo o a comportamientos irregulares o insatisfactorios en su procesado o inclusive a lo largo de su uso.

Se cuenta con dos conjuntos de datos obtenidos experimentalmente de los que se tiene la variación de la sorción de iodo según la temperatura: un ensayo base (datos_00.txt) y uno adicional (datos_01.txt).

Tareas

Realizar un programa que permita resolver los siguientes ítems:

a) Ajustar los datos de cada uno de los experimentos a las siguientes funciones:

Modelo lineal: $SI = a + b \cdot T$

Modelo polinomial (2) $SI = a + b \cdot T + c \cdot T^2$

Modelo logístico: $SI = \frac{1}{1+a \cdot \exp\,[-b \cdot T]}$

donde T es la temperatura del ensayo, *SI* la sorción de iodo y *a, b y c* los coeficientes a definir. Utilizar la técnica de cuadrados mínimos linealizando los problemas que lo requieran. Resolver el sistema de ecuaciones lineales resultante con el método de Eliminación Gaussiana. Establecer un indicador de error y comparar resultados.

b) Ajustar los datos de cada uno de los experimentos a una función sigmoidal de este tipo:

Modelo sigmoidal: $SI = a \cdot exp\big[-b \cdot exp[-c \cdot T]\big]$

donde *T* es la temperatura del ensayo, *SI* la sorción de iodo y *a*, *b* y *c* los coeficientes a definir. Utilizar la técnica de cuadrados mínimos sin linealizar el problema. Resolver el sistema de ecuaciones no lineales resultante con el método de Newton. Plantear un criterio de corte adecuado. Definir la solución inicial con *a=190*, *b=10* y *c=0.05.*

c) Ajustar los datos de cada uno de los experimentos a la siguiente función:

Modelo polinomial (3) $SI = a + b \cdot T + c \cdot T^2 + d \cdot T^3$

donde *T* es la temperatura del ensayo, *SI* la sorción de iodo y *a*, *b, c* y *d* los coeficientes a definir. Utilizar la técnica de cuadrados mínimos. Resolver el sistema de ecuaciones lineales resultante con dos métodos diferentes: método de Crout y método de Doolitle. Resolver con 3 y con 6 decimales de precisión y comparar resultados. Especificar diferencias entre los métodos.

d) Comparar resultados de los ítems anteriores, analizando performance de cada modelo de acuerdo a su error y su costo computacional. Elegir dos indicadores para cuantificar el error de cada modelo según cada conjunto de datos.