

Ajuste de datos experimentales a modelos mediante regresión lineal

- 1) Seleccionar datos de presión de vapor (vapor pressure) de alguno de los compuestos disponibles en el paper propuesto "VAPOR PRESSURES AND BOILING POINTS OF SOME PARAFFIN, ALKYL CYCLOPENTANE, ALKYL CYCLOHEXANE, AND ALKYL BENZENE HYDROCARBONS" by Willingham, C.B.; Taylor, W.J.; Pignocco, J.M.; Rossini, F.D.

Se deben utilizar datos de vapor y líquido en equilibrio.

- a) Ajustar los valores experimentales a la ecuación de Antoine (T en °C y P en mmHg).

$$\log_{10}(P) = A - \frac{B}{T + C}$$

- b) Graficar los datos experimentales vs los valores obtenidos del modelo en un mismo gráfico, teniendo en consideración cómo debe presentarse cada set de datos.
 - c) Presente la norma del residuo asociada al ajuste de los datos.
- 2) Utilizando el modelo obtenido en el punto anterior comparar un valor de presión de vapor a una determinada temperatura con otra fuente de datos.
Como otra fuente de datos puede usarse **NIST Chemistry WebBook** del National Institute of Standards and Technology (ver ¿ [Cómo busco datos de compuestos puros en la página de NIST?](#) al final de este instructivo)

<https://webbook.nist.gov/chemistry/>

Ejercicio opcional

1) Para el cálculo de la densidad de un líquido en ebullición (Metanol) suele utilizarse la siguiente variante de la ecuación de Rackett:

$$\rho = AB \left(1 - \frac{T}{512.598}\right)^n$$

En la siguiente tabla se muestra un conjunto de valores experimentales ([fuente](#)).

Densidad del Metanol liquido en ebullición

<i>T [K]</i>	<i>ρ [g/ml]</i>	<i>T [K]</i>	<i>ρ [g/ml]</i>	<i>T [K]</i>	<i>ρ [g/ml]</i>	<i>T [K]</i>	<i>ρ [g/ml]</i>
180.000	0.900	463.150	0.575	473.150	0.553	360.000	0.724
190.000	0.890	473.150	0.551	483.150	0.525	370.000	0.713
200.000	0.879	375.748	0.707	493.150	0.490	380.000	0.701
210.000	0.870	424.224	0.645	498.150	0.467	390.000	0.689
220.000	0.860	442.521	0.615	503.150	0.441	400.000	0.676
230.000	0.850	448.744	0.603	505.150	0.429	410.000	0.662
240.000	0.841	474.525	0.546	507.150	0.414	420.000	0.645
250.000	0.831	484.996	0.516	509.150	0.395	430.000	0.633
260.000	0.822	496.354	0.473	510.150	0.385	440.000	0.616
270.000	0.813	504.367	0.430	511.150	0.371	450.000	0.597
280.000	0.804	508.505	0.397	511.650	0.363	460.000	0.577
290.000	0.794	273.150	0.810	403.161	0.672	470.000	0.554
300.000	0.785	283.150	0.801	413.166	0.657	480.000	0.527
310.000	0.775	293.150	0.791	423.170	0.642	490.000	0.495
320.000	0.766	303.150	0.782	433.175	0.626	500.000	0.452
298.150	0.787	313.150	0.774	443.179	0.608	510.000	0.372
313.150	0.772	323.150	0.765	453.184	0.589	298.120	0.787
323.150	0.763	333.150	0.755	463.188	0.568	322.830	0.763
333.150	0.753	343.150	0.746	473.193	0.545	342.830	0.743
343.150	0.743	353.150	0.735	483.197	0.517	362.900	0.722
353.150	0.732	363.150	0.725	493.201	0.481	381.600	0.700
363.150	0.722	373.150	0.714	503.204	0.432	402.340	0.676
373.150	0.711	383.150	0.702	494.178	0.481	411.610	0.649
383.150	0.699	393.150	0.690	501.279	0.449	441.900	0.617
393.150	0.687	403.150	0.677	506.223	0.417	463.060	0.576
403.150	0.675	413.150	0.664	509.029	0.385	478.620	0.539
413.150	0.661	423.150	0.649	510.633	0.352	488.860	0.506
423.150	0.647	433.150	0.634	512.001	0.320	510.898	0.355
433.150	0.631	443.150	0.616	330.000	0.756		
443.150	0.615	453.150	0.598	340.000	0.742		
453.150	0.596	463.150	0.577	350.000	0.735		

Se propone utilizar valores de $n=0.2857$ y $n=0.2331$.

- Indique cuál de los dos valores de n proporciona un mejor ajuste.
- Proponga un valor de n que mejore el ajuste obtenido en el item anterior.

¿ Cómo busco datos de compuestos puros en la página de NIST ?

- 1) Ingresar al link <https://webbook.nist.gov/chemistry/>
- 2) Elegir una forma de búsqueda del compuesto, por ejemplo, por nombre.

NIST Standard Reference Database Number 69

Last update to data: 2023

DOI: <https://doi.org/10.18434/T4D303>

View: [Search Options](#), [Models and Tools](#), [Special Data Collections](#), [Documentation](#), [Changes](#), [Notes](#)

▶ Credits

NIST reserves the right to charge for access to this database in the future.

Search Options

General Searches

- Formula
- Name
- IUPAC identifier
- CAS registry number
- Reaction
- Author
- Structure

Physical Property Based Searches

- Ion energetics properties
- Vibrational and electronic energies
- Molecular weight

- 3) Ingresar el nombre del compuesto en inglés y seleccionar “Phase change” en el tipo de dato. Clickear “Search”.

Search for Species Data by Chemical Name

Please follow the steps below to conduct your search ([Help](#)):

1. Enter a chemical species name or pattern: (e.g., methane, *2-hexene)
2. Select the desired units for thermodynamic data:
 SI calorie-based
3. Select the desired type(s) of data:

Thermodynamic Data	Other Data
<input type="checkbox"/> Gas phase	<input type="checkbox"/> IR spectrum
<input type="checkbox"/> Condensed phase	<input type="checkbox"/> THz IR spectrum
<input checked="" type="checkbox"/> Phase change	<input type="checkbox"/> Mass spectrum
<input type="checkbox"/> Reaction	<input type="checkbox"/> UV/Vis spectrum
<input type="checkbox"/> Ion energetics	<input type="checkbox"/> Gas Chromatography
<input type="checkbox"/> Ion cluster	<input type="checkbox"/> Vibrational & electronic energy levels
	<input type="checkbox"/> Constants of diatomic molecules
	<input type="checkbox"/> Henry's Law
4. Press here to search:

- 4) Navegar hasta encontrar los parámetros de la ecuación de Antoine.

Antoine Equation Parameters

$$\log_{10}(P) = A - (B / (T + C))$$

P = vapor pressure (bar)

T = temperature (K)

[View plot](#) Requires a JavaScript / HTML 5 canvas capable browser.

Temperature (K)	A	B	C	Reference	Comment
177.70 - 264.93	3.45604	1044.038	-53.893	Carruth and Kobayashi, 1973	Coefficients calculated by NIST from author's data.
286.18 - 342.69	4.00266	1171.53	-48.784	Williamham, Taylor, et al., 1945	

- 5) Calcular la presión de vapor a una determinada temperatura utilizando la ecuación y los parámetros que indica la página en las unidades de medida indicadas.