

MÉTODO DE NEWTON RAPHSON

PROBLEMA 1

1. La ecuación de estado de Vander Walls para un gas real

$$\left(P + \frac{a}{V^2} \right) \cdot (V - b) = RT$$

Para los siguientes gases el volumen molar a una temperatura de 80 °C para presiones de 10, 20, 30, 100 atm y las constantes particulares para cada gas son:

Gas	a	b
CO ₂	3.599	0.04267
Dimetilamina	37.49	0.19700
He	0.03412	0.02370
Oxido Nítrico	1.34	0.02789

P = atm

R = 0.082 atm·L/mol K

SOLUCIÓN

- De la ecuación inicial de Vander Walls se tiene la siguiente definición y lo dejamos en función de v o sea de esta manera f(V):

$$\begin{aligned} \left(P + \frac{a}{V^2} \right) \cdot (V - b) &= RT \\ (P \cdot V^2) \cdot (V - b) &= RT \cdot V^2 \\ PV^3 - bPV^2 + aV - ab &= RTV^2 \\ PV^3 - (bP + RT)V^2 + aV - ab &= 0 \\ f(V) = PV^3 - (bP + RT)V^2 + aV - ab &= 0 \end{aligned}$$

- Derivamos la ecuación f(V) y quedaría expresado de la siguiente manera.

$$f'(V) = 3PV^2 - 2 \cdot (bP + RT)V + a$$

- Ahora para tener nuestro valor inicial de V, debemos asignar un valor pero como se trata de un gas real; damos un valor supuesto como si fuese ideal con la ecuación general de los gases

$$PV = nRT$$

- Reemplazando datos para encontrar un valor inicial para V y como es nuestro valor que empezaremos lo denotaremos como V₀, ahora pondremos como base 1 mol de gas sería:

$$\begin{aligned} PV &= nRT \\ PV_0 &= nRT \\ V_0 &= \frac{nRT}{P} \\ V_0 &= \frac{(1) \cdot 0.082 \cdot (80 + 273)}{10} \\ V_0 &= 2.896 \end{aligned}$$

- Hacemos nuestra primera interacción, sabiendo expresión para el método de Newton Raphson, así.

$$V_1 = V_0 - \frac{f(V)}{f'(V)}$$

- Evaluamos:

$$V_1 = V_0 - \frac{PV_0^3 - (bP + RT)V_0^2 + aV_0 - ab}{3PV_0^2 - 2(bP + RT)V_0 + a}$$

- Reemplazamos los valores correspondientes para CO₂ a 10 atm par determinar la primera interacción, ya que el proceso terminara cuando tenga un margen de error mínimo así:

$$|V_{i+1} - V_0| < 10^{-3}$$

Ésta vez utilizaremos una precisión de 10⁻³

$$V_1 = 2.896 - \frac{10 \cdot 2.896^3 - (0.04267 \cdot 10 + 0.082 \cdot 353.15) \cdot 2.896^2 + 3.599 \cdot 2.896 - 3.599 \cdot 0.04267}{3 \cdot 10 \cdot 2.896^2 - 2(0.04267 \cdot 10 + 0.082 \cdot 353.15) \cdot 2.896 + 3.599}$$

$$V_1 = 1.9898$$

- Comparamos:

$$|1.9898 - 2.896| < 10^{-3}$$

$$0.9060 < 10^{-3}$$

Por lo demostrado sabemos que 0.9062 no es menor que 10⁻³. Entonces seguimos la segunda interacción hasta lograr $|V_{i+1} - V_0| < 10^{-3}$.

- **Segunda interacción**

$$V_2 = V_1 - \frac{PV_1^3 - (bP + RT)V_1^2 + aV_1 - ab}{3PV_1^2 - 2(bP + RT)V_1 + a}$$

$$V_2 = 1.9898 - \frac{10 \cdot 1.9898^3 - (0.04267 \cdot 10 + 0.082 \cdot 353.15) \cdot 1.9898^2 + 3.599 \cdot 1.9898 - 3.599 \cdot 0.04267}{3 \cdot 10 \cdot 1.9898^2 - 2(0.04267 \cdot 10 + 0.082 \cdot 353.15) \cdot 1.9898 + 3.599}$$

$$V_2 = 1.3752$$

- Comprobamos:

$$|1.3752 - 1.9898| < 10^{-3}$$

$$0.6146 < 10^{-3}$$

Por lo demostrado sabemos que 0.6146 no es menor que 10⁻³. Entonces seguimos las interacciones necesarias hasta lograr $|V_{i+1} - V_0| < 10^{-3}$.

- **Tercera interacción**

$$V_3 = V_2 - \frac{PV_2^3 - (bP + RT)V_2^2 + aV_2 - ab}{3PV_2^2 - 2(bP + RT)V_2 + a}$$

$$V_3 = 1.3752 - \frac{10 \cdot 1.3752^3 - (0.04267 \cdot 10 + 0.082 \cdot 353.15) \cdot 1.3752^2 + 3.599 \cdot 1.3752 - 3.599 \cdot 0.04267}{3 \cdot 10 \cdot 1.3752^2 - 2(0.04267 \cdot 10 + 0.082 \cdot 353.15)1.3752 + 3.599}$$

$$V_3 = 0.9474$$

- Comprobamos:

$$|0.9474 - 1.375| < 10^{-3}$$

$$0.4276 < 10^{-3}$$

Por lo demostrado sabemos que 0.4276 no es menor que 10^{-3} . Entonces seguimos las interacciones necesarias hasta lograr $|V_{i+1} - V_0| < 10^{-3}$.

- **Cuarta Interacción**

$$V_4 = V_3 - \frac{PV_3^3 - (bP + RT)V_3^2 + aV_3 - ab}{3PV_3^2 - 2(bP + RT)V_3 + a}$$

$$V_4 = 0.9474 - \frac{10 \cdot 0.9474^3 - (0.04267 \cdot 10 + 0.082 \cdot 353.15) \cdot 0.9474^2 + 3.599 \cdot 0.9474 - 3.599 \cdot 0.04267}{3 \cdot 10 \cdot 0.9474^2 - 2(0.04267 \cdot 10 + 0.082 \cdot 353.15)0.9474 + 3.599}$$

$$V_4 = 0.6299$$

- Comprobamos

$$|0.6299 - 0.9474| < 10^{-3}$$

$$0.31749 < 10^{-3}$$

Por lo demostrado sabemos que 0.31749 no es menor que 10^{-3} . Entonces seguimos las interacciones necesarias hasta lograr $|V_{i+1} - V_0| < 10^{-3}$.

- Y de igual manera seguimos trabajando las interacciones hasta que se cumpla nuestra condición para todos los gases, y cuando esto suceda el valor de V será el valor deseado:

Los valores son:

$V_5 = 0.355226$	$Abs = 0.27469850 < 10^{-3}$ No
$V_6 = 0.069578$	$Abs = 0.28564860 < 10^{-3}$ No
$V_7 = 0.045629$	$Abs = 0.02394864 < 10^{-3}$ No
$V_8 = 0.046604$	$Abs = 0.00097469 < 10^{-3}$ Sí

- En la interacción 8 no damos cuenta que $0.00097469 < 10^{-3}$. entonces quiere decir que el valor que corresponde a V es:

Entonces:

El Volumen molar para el CO_2 es: **0.046604 L/mol**

- De igual manera se cambia la presión. Según condición de problema (10, 20, 30, 100 atm)

- Empleando MATLAB abreviaría el trabajo, cuya programación sería para cualquiera de los gases pedidos; introduciendo los datos para cada gas.

```

clc
commandwindow;
disp(date)
fprintf('\n\t\t\t\t Métodos Numéricos');
fprintf('\n\t\t\t\t =====\n');
P=input(' Presión, atm :');
T=input(' Temperatura, °C :');
R=input(' Constante delos gases, atm*L/mol*K :');
a=input(' Ingresa La constante Particular "a" :');
b=input(' Ingresa La constante Particular "b" :');
disp(' ')
fprintf('\n\t\t\t\t Método Newton Raphson');
fprintf('\n\t\t\t\t =====');
V=R*(T+273.15)/P; % Estimación inicial del Volumen
fV=P*V^3-(P*b+R*T)*V^2+a*V-a*b;
A=abs(V);
error=1e-3;
cont=0;
fprintf('\n\n\t\t n = %d   V = %8.6f   fV = %10.8f   Abs = %10.8f' , cont, V, fV,
A);
while abs(fV) > error
    cont=cont+1;
    Vo=V;
    fVo=P*Vo^3-(P*b+R*T)*Vo^2+a*Vo-a*b;
    dfVo=3*P*Vo^2-2*(P*b+R*T)*V+a;
    V=Vo-fVo/dfVo;
    fV=P*V^3-(P*b+R*T)*V^2+a*V-a*b;
    B=(V-Vo);
    A=abs(B);
    fprintf('\n\n\t\t n = %d   V = %8.6f   fV = %10.8f   Abs = %10.8f' , cont, V,
fV, A);
end;
fprintf('\n\n\t\t El Volumen Molar del CO2 es:  %8.6f L/mol\n',V);
%(C)Corporación Virbac
% Cristhian Portal Derechos Reservados

```

- Los resultados para el CO₂ es:

```

Command Window
New to MATLAB? Watch this Video, see Demos, or read Getting Started.

04-Jul-2008

                Métodos Numéricos
                =====
Presión, atm :10
Temperatura, °C :80
Constante delos gases, atm*L/mol*K :0.082
Ingresa La constante Particular "a" :3.599
Ingresa La constante Particular "b" :0.04267

                Método Newton Raphson
                =====

n = 0   V = 2.895830   fV = 194.51865578   Abs = 2.89583000
n = 1   V = 1.989867   fV = 58.13385141   Abs = 0.90596267
n = 2   V = 1.375221   fV = 17.59099745   Abs = 0.61464653
n = 3   V = 0.947419   fV = 5.48896143   Abs = 0.42780227
n = 4   V = 0.629925   fV = 1.84074413   Abs = 0.31749393
n = 5   V = 0.355226   fV = 0.69151272   Abs = 0.27469850
n = 6   V = 0.069578   fV = 0.06638555   Abs = 0.28564860
n = 7   V = 0.045629   fV = -0.00294733   Abs = 0.02394864
n = 8   V = 0.046604   fV = -0.00000533   Abs = 0.00097469

El Volumen Molar del CO2 es:  0.046604 L/mol
>>

```