CASO PRÁCTICO DE METANO

[a) GRAFICAR LA CURVA 2](#_Toc194958254)

[b) POLINOMIO DE HERMITE 3](#_Toc194958255)

[c) ESTUDIO DE LA ECUACIÓN DE PENG-ROBINSON 3](#_Toc194958256)

[d) COEFICIENTE VIRAL 4](#_Toc194958257)

[1. El Método de la bisección: 5](#_Toc194958258)

[2. El Método de la Secante: 5](#_Toc194958259)

[e) GRÁFICO DEL COEFICIENTE VIRAL C(t) 6](#_Toc194958260)

Caso Práctico del Metano

## GRAFICAR LA CURVA

Interfaz de usuario gráfica

El contenido generado por IA puede ser incorrecto.Utilizamos **las interpolaciones de Lagrange, Newton y los spline cúbicos** para graficar la curva. También, modelamos una regresión potencial para ver cómo se ajusta a la curva.  
Utilizamos los datos en el Excel y los importamos utilizando pandas para luego evaluar esos puntos PV donde P=f(V) en cada temperatura.

Podemos observar que el grafico de la regresión potencial se ajusta mejor a nuestro caso ya que se parece a una función .Además el spline cubico también se ajusta a nuestra gráfica, pero como está hecho de funciones cubicas a trozos no es muy viable hacer cálculos utilizando este método.

Texto

El contenido generado por IA puede ser incorrecto. Entonces, al final al cabo la regresión potencial parece que se aproxima, pero tenemos que ver sus y RMSE para comprobar que este grafico sea el más optimo. Primero, como su es aproximadamente 1 para cada valor de Temperatura esto nos dice que el modelo se nos ajusta muy bien a nuestra curva. Esto todavía no es suficiente información para decirnos que la gráfica es la mejor para ello tenemos que ver el error cuadrático medio porque puede que sea alto con los valores dados en el Excel, pero no con otros datos nuevos. Para ello acudimos a calcular el error cuadrático medio (RMSE) son muy altos esto nos dice que estamos sobre ajustando la gráfica. En otras palabras, con valores diferentes puede darnos errores.

## POLINOMIO DE HERMITE

Gráfico, Gráfico de líneas

El contenido generado por IA puede ser incorrecto.Calculamos el polinomio de Hermite de pero para ello necesitamos al menos una derivada para calcularlo por ello nos dan la derivada en el punto , . Obviamente la presión (1MPa) es constante para no influir en nuestros cálculos. Con esto ya podemos utilizar el método de interpolación de Hermite y sacamos su polinomio (). Esto nos daría una parábola\*. Donde su polinomio sería:

Gráfico, Gráfico de líneas

El contenido generado por IA puede ser incorrecto.V==

\*polinomio de grado par significa que tiene forma de parábola

En conclusión, nos sale un polinomio (V=) de grado 4. Lo que podríamos hacer para mejorar este polinomio serio encontrar las otras 3 derivadas para los otros puntos T. Así, V=nos saldría más preciso.

## ESTUDIO DE LA ECUACIÓN DE PENG-ROBINSON

Las interpolaciones estas correctas, pero no nos estamos ajustando a una curva potencial utilizando Newton o Lagrange. Eso nos deja con la única interpolación que seria los Spline cúbicos y como solo estamos viendo a diferencia en volumen que sea a trozos no nos incumbe.  
Hemos puesto para cada Presión dada en nuestra tabla en la ecuación de Peng-Robinson y buscamos los valores de v para los cuales cumplan la siguiente función Para ello utilizamos Newton-Raphson\* para ver los nuevos valores del volumen que nos da esta ecuación. Sabiendo que T=250ºK; =190.56ºK; c=4.59MPa MPa =0.011 =98.6. Con una lista de presiones en el Excel.

DIAGRAMA DE FLUJO

Como esta explicado en el diagrama de flujo así es como hemos programado para que haga Newton Raphson para cada presión del Excel.



Podemos observar que los resultados no salen diferentes eso es debido a que La ecuación de Peng-Robinson ya que hay siempre un margen de error para los cálculos y nuestra tolerancia en este apartado es de 0.001. En otras palabras, hay un error que se acumula haciendo iteraciones de un cálculo esto se le suele llamar la teoría del caos.

En conclusión, aunque nos sale diferentes resultados que los comprobados en la vida real, debido a un cálculo iterativo que acumula errores. Esto no implica que ambos estén en lo cierto\* (aproximadamente)

## COEFICIENTE VIRAL

Para calcular el coeficiente viral para ellos necesitamos sacar este coeficiente viral de la ecuación del viral .

Esto nos sale . Con la información del apartado c) donde ya encontramos que V=. Sabiendo que el polinomio de Hermite lo hemos conseguido con una presión constante de 1Mpa, por ello estamos encontrando este coeficiente cuando la presión es constante.

Interfaz de usuario gráfica, Texto, Aplicación

El contenido generado por IA puede ser incorrecto.

Podemos ver que **.** En otras palabras, hay una asíntota horizontal en t=0. Calculamos limites laterales:

.

Imagen que contiene Gráfico

El contenido generado por IA puede ser incorrecto.Como los limites: . Por eso podemos concluir que entre (0, ) o en (-,0) estarán las raíces de nuestra ecuación, porque sabiendo que en el límite lateral nuestra función decrece y también decrece en el , esto nos diría que en algún momento la función debe crecer para luego volver a decrecer, en un instante , puede que nuestra función y viceversa para (-,0).

Para ello tenemos que ver lo que hace nuestra función en esos intervalos próximos del 0.

Primero vemos el intervalo (-,0) como se puede ver en la gráfica a tu derecha la función . En otras palabras, la función no corta con el eje t ().

Gráfico, Gráfico de líneas

El contenido generado por IA puede ser incorrecto.Ahora nos toca evaluar para el intervalo (0, ). Primero, graficamos la curva para valores próximo a cero. Vemos en la gráfica *de color rojo* que cuando la función está creciendo corta con el eje t en un intervalo (100,200). Pero como la gráfica está creciendo y nosotros sabemos que va a decrecer en pues extendemos la función (grafica en negro) sabiendo que va a haber otro punto que va a cortar el eje t. Podemos ver que en el intervalo (500,600) hay otro punto.

En resumen, con el estudio de la función podemos sacar las siguientes conclusiones:

* Tenemos dos raíces para en los intervalos
* Sería muy ineficiente utilizar Newton-Raphson ya que el decrecimiento es exponencial y hay puntos críticos y de discontinuidad
* Como estamos buscando las raíces cuando del coeficiente viral vale esto seria insignificante para los grandes intervalos de las raíces que hemos cogido ( , ) así que ya desplazamos las raíces por un valor insignificante.

Entonces podemos encontrar los valores de para cuando el coeficiente viral . Para ello utilizamos **dos métodos para resolver raíces** para ver cual es la mas rápida. Solo buscamos la raíz ya que en el transporte del metano es más fácil transportar a temperaturas bajas que a temperaturas altas en Kelvin.

1. El Método de la bisección: Texto

   El contenido generado por IA puede ser incorrecto.

Aquí podemos observar los resultados de las raíces encontradas por el método de la bisección para un coeficiente viral de con un error de . Podemos ver que converge bastante bien para tener una convergencia lineal ya que tardo 39 iteraciones para encontrar la raíz con una precisión de .

### Texto El contenido generado por IA puede ser incorrecto.El Método de la Secante:

Para poder comparar el método de bisección hemos utilizado el método de la secante que es similar al de Newton y falsi porque va cogiendo secantes a los dos puntos de nuestra raíz . Podemos observar que este método de la Secante converge mucho más rápido para valores de error altos esto es debido a que la Secante converge más rápido\* que el Método de bisección. Pero considerando valores de error de 0.001 y 0.0001 vemos que el método de Bisección converge con 6 y 5 iteraciones menos que la de la Secante. La rapidez en un error de es debido a que ha encontrado ya está creando rectas que se aproximan más rápido que cogiendo un punto medio. Podemos ver que en el Método de la secante las raíces son más precisas.

En conclusión, si buscamos encontrar raíz en para valores menores a un error de (ej: 0.001,0.0001) la forma mas rápida seria utilizando el Método de la bisección. En cambio, si en vez de rapidez en valores menores a queremos precisión el Método de la Secante sería el mejor, también si queremos un error muy pequeño para encontrar la raíz.

# GRÁFICO DEL COEFICIENTE VIRAL C(t)

Como ya dijimos en el apartado anterior como estamos utilizando un ordenador (programa) para calcular nuestros valores del coeficiente viral . Pues utilizaremos el Método de la secante ya que es más preciso para encontrar valores . Como queremos interpolar es muy importante ser preciso con nuestros valores por ello implementamos este método para sacar los siguientes valores cuando y . Implementando el método de la secante sacamos los siguientes valores de . Texto

El contenido generado por IA puede ser incorrecto.

Podemos observar que el número de iteraciones es próximo a el del apartado e), también los valores de t son precisos.

Gráfico, Gráfico de líneas

El contenido generado por IA puede ser incorrecto.Podemos ver en los grafos creados con la información dada de las temperaturas y como las encontradas en la parte superior. Con esa información creamos los mismos grafos reutilizando el código del apartado a) para crearlos.

Texto

El contenido generado por IA puede ser incorrecto.Lo primeros que podemos deducir en este caso es que la regresión potencial está muy desviada de lo que la curva seria. Esto lo podemos observar con el dado ya que no está en nuestro rango de 0 a 1 eso nos dice que la regresión no se ajusta a nuestra curva .

Finalmente podemos ver que las graficas con la interpolacion de Newton, Lagrange, y los Spline Cubicos es muy parecida. Pero la interpolacion mas beneficiosa seria la de Lagrange ya que se nesesitaria muy pocos calculos y es la mas sencilla de hacer. En cima, seria muy facil utilizarla para calculos posteriores ya que no es una funcion por partes como lo es los Spline Cubicos.

En conclusion, sacamos los siguientes valores del coeficiente Viral para luego hacer una aproximacion a esta funcion tan compleja. Para ello hemos comparado las mismas interpolaciones que en el apartado a). Vemos que hay tres que se parecen pero por la facilidad de los calculos elejimos la interpolación de Lagrange.