



UNIVERSIDAD DE CÓRDOBA

1º FÍSICA

19. Cálculo de la temperatura de saturación

Santiago Sanz Wuhl

1 Fundamento Teórico

La temperatura a la cual cierto líquido hierva dependerá únicamente de la presión a la que esté sometido. A esta temperatura de saturación, se llega cuando la sustancia en fase líquida entra en equilibrio dinámico con la fase gaseosa de la misma.

El diagrama de fases de la fig. 1 representa las diferentes fases de una sustancia en función de la temperatura y presión a la que está sometida. Se puede observar que la frontera entre la fase líquida y la fase gaseosa es una línea, lo que significa que a cada temperatura de saturación le corresponde una única presión de saturación. Otra cosa a observar es la línea verde punteada de pendiente negativa. Esta describe como la temperatura de fusión *del agua* disminuye según aumenta la presión. Dada una presión de vaporización(saturación), se podrá calcular la temperatura de saturación a través de la ecuación de *Frost-Kalkwarf-Thodos*:

$$\ln P^{vap} = A - \frac{B}{T} + C \ln T + \frac{DP^{vap}}{T^2}^1 \quad (1)$$

Por otro lado, se podrá obtener una primera aproximación de T usando la *ecuación de Antoine*:

$$\ln P^{vap} = A_1 - \frac{A_2}{T + A_3} \quad (2)$$

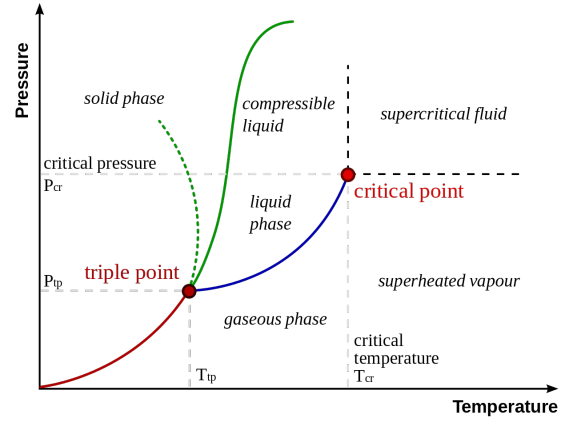


Figure 1: *Diagrama de Fases*

¹A, B, C, D, A₁, A₂, A₃ serán constante empíricas que varían con la sustancia
T es la temperatura, en K
P^{vap} es la presión de vaporización, en mmHg

2 Métodos

Antes de nada, me gustaría introducir los métodos que usaré a lo largo de esta práctica para hallar las raíces de $f(x)$ (todos los valores x_0 tales que $f(x_0) = 0$). En ambos casos se habrá introducido una tolerancia, ϵ , que es la amplitud mínima que puede tener el intervalo que contiene a la raíz:

2.1 Bisección

El método de la bisección consiste en iterar sobre dos puntos, x_1 y x_2 . Se exige que $f(x_1)f(x_2) < 0$. Esto nos asegura que al menos una raíz existe en el intervalo (x_1, x_2) . La función `biseccion.m` busca cuál de los dos puntos cumplen esta condición con el punto medio, y los redefine en función a eso. Este proceso continúa hasta que se cumpla $|x_2 - x_1| < \epsilon$

```

1 function [raiz, niter] = ...
2     biseccion(fun, a, amp, toler)
3 - b = a + amp;
4 - niter = 0;
5 - if fun(a)==0
6 -     raiz = a;
7 - end
8 - if fun(b)==0
9 -     raiz = b;
10 - end
11 - raiz = (a+b)*0.5;
12 - while abs(a-b) > toler
13 -     niter = niter + 1;
14 -     raiz = (a+b)*0.5;
15 -     if sign(fun(a)) == sign(fun(raiz))
16 -         a = raiz;
17 -     else
18 -         b = raiz;
19 -     end
20 -     raiz = (a+b)*0.5;
21 - end
22 -
23 - end

```

Fig. 2: Código bisección

2.2 Secante

El método de la secante, por otro lado, toma 2 puntos, x_1 y x_2 . En vez de iterar sobre el punto medio, lo cual es bastante poco eficiente, traza una recta secante que pase por la imagen de los dos puntos dados, y halla la raíz de dicha recta. Tomará esta raíz como x_2 , x_1 pasará a ser x_2 , e itera de nuevo. El proceso se repetirá hasta que se cumpla $|x_2 - x_1| < \epsilon$

```

1 function [raiz, niter] = ...
2     secante(f, x1, amp, toler)
3 - niter = 0;
4 - x2 = x1 + amp;
5 - if f(x1)==0
6 -     raiz = a;
7 - end
8 - if f(x2)==0
9 -     raiz = b;
10 - end
11 - while abs(x1-x2)>toler
12 -     niter = niter + 1;
13 -     raiz = -f(x2)*(x2-x1)/(f(x2)-f(x1)) + x2;
14 -     x1 = x2;
15 -     x2 = raiz;
16 -
17 - end
18 - end

```

Fig. 3: Código secante

3 Procedimiento

Queremos calcular, a una presión de 2494mmHg, la temperatura de saturación del etilbenceno. Usaremos la aproximación (2)(función f) para encontrar un intervalo de amplitud 1 que contenga la raíz. Comenzaremos en $in = -A_3$, dado el carácter asintótico para dicho valor de la función. Se ve todo este proceso en las líneas 13-17 de la Fig. 4. Una vez encontrado el valor inicial($in = 460.0096$), aplicamos el método de la bisección con una tolerancia de 0.01 en la función g . Para

ese mismo valor y función aplicaremos el método de la secante, pero con una tolerancia de $5e-6$. Conseguimos así los siguientes resultados:

```

1 - A_1 = 15.98480422493;
2 - A_2 = 3257.169444444444;
3 - A_3 = -61.00961;
4 - A = 58.1;
5 - B = 6792.54;
6 - C = -5.802;
7 - D = 5.75;
8 - P = 2494;
9
10 - f = @(T) (A_1 - A_2./(T+A_3) - log(P));
11 - g = @(T) (A - B./T + C.*log(T) + D.*P./T.^2 - log(P));
12
13 - in = -A_3 ;
14
15 - while sign(f(a))~=sign(f(a+1))
16 -     in = in + 1;
17 - end
18
19 - [biraz, binit] = biseccion(g, a, 1, 0.01);
20 - [secraiz, secniter] = secante(g, a, 1, 5e-6);

```

Fig. 4: Código Principal

```

La temperatura de saturación aproximada a 0.01 será 461.00570K según la bisección.
Se han necesitado para esta aproximación 7 iteraciones.
La temperatura de saturación aproximada a 5e-5 será 459.66888K según el método de la secante.
Para la aplicación de este método se necesitaron 4 iteraciones.
>>

```

Fig.5: Resultados

Se han añadido, como nota aparte los diferentes números de iteraciones para contrastar las eficiencias de los métodos de la bisección y de la secante. Observa que para una precisión diez mil veces mayor se necesitan 3 iteraciones menos. Otro aspecto a apreciar son los diferentes resultados que se han obtenido, que no se debe a la tolerancia, por que la diferencia $461.0057 - 459.66888 = 1.3369$ (mayor que 0.01). Esto implica que puede haber habido algún error, ya sea de coma flotante, o de cualquier otra cosa que impida el cálculo correcto de la temperatura de saturación.