

**MÉTODOS NUMÉRICOS
RESOLUCIÓN DE ECUACIONES DE
ESTADO EN GASES REALES Y
COMPARATIVA DE MÉTODOS**

Dr. Jacinto Velasco Rebolledo
2º Curso Ingeniería Matemática



1.- Contexto de Negocio

El metano es un componente clave en numerosos procesos petroquímicos y energéticos, desempeñando un papel fundamental en la producción de combustibles, generación de energía y síntesis de productos químicos industriales. Su presencia en procesos como la reformación con vapor, el craqueo catalítico y la producción de gas de síntesis (syngas) requiere un conocimiento preciso de su comportamiento en diferentes condiciones de presión y temperatura.

Uno de los aspectos más críticos en el manejo del metano es la predicción de su volumen específico en función de las condiciones operativas. Este parámetro es esencial en el diseño de reactores, sistemas de almacenamiento y transporte de gas natural, donde pequeñas variaciones en presión o temperatura pueden afectar significativamente la eficiencia del proceso y la seguridad de la infraestructura.

Para garantizar un funcionamiento óptimo y seguro de estos sistemas, es fundamental emplear modelos termodinámicos avanzados, como ecuaciones de estado (por ejemplo, la ecuación de estado de Peng-Robinson o Redlich-Kwong), que permiten predecir con precisión el comportamiento del metano bajo condiciones extremas. Estas herramientas ayudan a los ingenieros a diseñar equipos con materiales adecuados, establecer límites de operación y optimizar el consumo energético en plantas de procesamiento de gas.

Además, el conocimiento detallado del volumen específico del metano contribuye a la reducción de pérdidas en el transporte y almacenamiento, minimizando el riesgo de fugas y maximizando la eficiencia en la distribución del gas. Esto es especialmente relevante en aplicaciones de gas natural licuado (GNL), donde la compresión y expansión del metano deben ser cuidadosamente controladas para evitar sobrepresiones o fallos estructurales en los contenedores criogénicos.

2.- Caso de Uso

Se proporciona una serie de tablas con valores de presión (P) y volumen específico (V) del metano a distintas temperaturas constantes (T). Cada tabla contiene puntos discretos. En el fichero excel adjunto tienes los valores de presión en (MPa) y $V(\text{m}^3/\text{kg})$ a diferentes temperaturas.

Uno de los objetivos es obtener el valor de V dadas unas condiciones donde P y V no son constantes. Para ello se desea utilizar dos ecuaciones de estado de los gases reales:

La ecuación de Peng-Robinson es una ecuación de estado cúbica, ampliamente utilizada en termodinámica de fluidos para modelar el comportamiento de gases y líquidos. Su forma general es:

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{V^2 + 2bV - b^2}$$

Donde a es una constante que se calcula como:

$$a = 0.4572 \cdot \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \cdot \alpha(T_r, w) = 0.4572 \cdot \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \cdot \left[1 + k \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right]$$

$$k = 0.37 + 1.5 \cdot w - 0.26 \cdot w^2$$

$$b = 0.077 \cdot \frac{RT_c}{P_c}$$

Para el **metano**, los valores críticos y el factor acéntrico son:

- **Temperatura crítica:** $T_c=190.56 \text{ K}$
- **Presión crítica:** $P_c=4.59 \text{ MPa}$
- **Volumen crítico:** $V_c=98.6 \text{ cm}^3/\text{mol}$
- **Factor acéntrico:** $\omega=0.011$

La ecuación del virial es una expansión en series de la ecuación de estado de un gas real en términos del volumen molar:

$$Z = \frac{PV}{RT} = 1 + \frac{B(T)}{V} + \frac{C(T)}{V^2} + \dots$$

Donde $B(T)$ y $C(T)$ son los coeficientes de Virial. El primero se puede aproximar a una función del tipo: $B(T) = -0.199 + 0.20 \cdot \exp\left(\frac{-1131}{T^2}\right)$, pero $C(T)$ es muy compleja de obtener.

3.- Caso de uso a resolver

Dado estos datos se pide los siguiente:

- a) Gráficas de la interpolación polinomial y regresión de los puntos PV que mejor se ajuste al caso. Identificar la mejor curva para resolver el problema.
- b) Hacer una interpolación de Hermite donde se representa una función $V=f(T)$ considerando que la primera derivada dV/dT : $0.019 \text{ m}^3/\text{kg}\cdot\text{K}$ a una $T= 300 \text{ K}$ y un volumen específico de $4.1 \text{ m}^3/\text{kg}$.
- c) Para la ecuación de Peng-Robinson se necesita analizar si la curva interpolada en a) es correcta o se ajusta a la ecuación. Para ello deberá de resolver la ecuación en cada uno de los puntos P y ver el error cometido. Hacer un diagrama de flujo de como resolvería

esta cuestión. Hacerlo solo para $T=250\text{K}$. El input del sistema es la presión, no el volumen. Error mínimo 0.001.

- d) El cálculo de $C(T)$ es muy complejo y se necesita experimentación. Con los datos del apartado b) y considerando una presión constante de 1 MPa determina a que T le corresponde un coeficiente del Virial de $6 \cdot 10^{-4} \text{ m}^6/\text{Kg}^2$. Determinar el numero de iteraciones para un error de 0.01, 0.001 y de 10^{-10}
- e) Haga el mismo cálculo que d) para $10^{-4} \text{ m}^6/\text{Kg}^2$ y $8.5 \cdot 10^{-4} \text{ m}^6/\text{Kg}^2$ para un error de 0.001. Grafique los resultados.

PARA CADAD CASO Y SALVO QUE SE ESPECIFIQUE SE PUEDEN USAR DOS METODOS A LECCION DEL ALUMNO, AUNQUE SE RECOMIENDA PROGRAMAR MAS DE DOS PARA VER CONVERGENCIA.

EN TODOS LOS CASOS DEBE DE TENER UN RAZONAMIENTO MATEMATÉTICO Y UNA LÓGICA D EPOR QUÉ SE SELECCIONA EL MÉTODO.

4.- Entregable del caso.

- 1. Documento técnico (Word) de 10 caras o 5 hojas explicando:
 - a. Las matemáticas que se están usando y el desarrollo lógico. No poner la teoría, solo el desarrollo.
 - b. Diagramas de flujo y gráficas que se piden o que se quiera insertar para la comprensión del problema.
 - c. Resultados: ecuaciones interpoladas, error, resultados. En cada resultado poner el error que se esta cometiendo. No hace falta poner la tablas de iteración (se puede hacer un anexo aparte, pero no es obligatorio).
 - d. Comparativa de métodos.
 - e. Conclusiones y mejoras que harías.
- 2. Fichero de *.ipnyb donde en cada celda este el apartado resuelto.

Normativa:

- 1. **Plagio y copia:** Cualquier caso de plagio o copia entre grupos será sancionado con el suspenso automático de la tarea.
- 2. **Plataformas permitidas:** Se puede utilizar cualquier plataforma que soporte Python, como Jupyter Notebook, Anaconda, Visual Studio Code, Google Colab, entre otras.
- 3. **Uso de IA generativa:** Se permite el uso de herramientas de inteligencia artificial generativa como soporte. Sin embargo, el trabajo será sometido a herramientas de detección de contenido generado por IA. Si el porcentaje de coincidencia supera el 30%, la calificación de la tarea será de **cero**, y esta nota se tendrá en cuenta en la media final.
- 4. **Si se entrega mas de 5 hojas el trabajo será evaluado con un cero.**

Evaluación

- 40% código ejecutado. Se debe de entregar en un formato que se puede ejecutar en local.
- 40% el desarrollo matemático y la solución en cada uno de los casos.
- 20% presentación del documento y claridad/precisión en las explicaciones.