

T2.E3A. Ecuación de Van der Waals

La ecuación de van der Waals da una relación entre la presión P (en atm.), el volumen V (en litros) y la temperatura T (en °K) para un gas real:

$$P = \frac{nRT}{V - nb} - \frac{n^2a}{V^2}$$

donde n es el número de moles, $R = 0.08206 \left(\frac{l \cdot atm}{mol \cdot ^\circ K} \right)$ es la constante de los gases, y $a \left(\frac{l^2 atm}{mol^2} \right)$ y $b \left(\frac{l}{mol} \right)$ son las constantes del material.

Considera 1.5 moles de nitrógeno ($a = 1.39$, $b = 0,03913$) a $25^\circ C$ almacenados en un recipiente a presión.
($0^\circ C = 273.15^\circ K$)

Se desea calcular el volumen del recipiente si la presión es de 13.5 atm

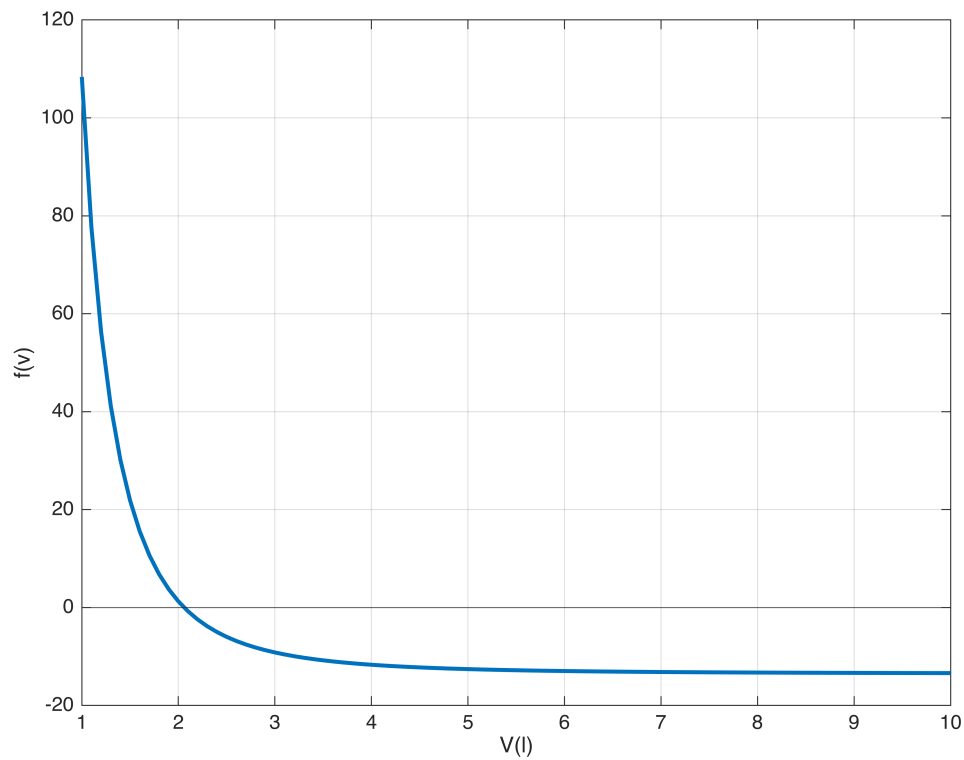
- a) (1p) Reescribe la ecuación en la forma $f(V) = 0$, emplea el editor de ecuaciones
- b) (2p) Representa gráficamente la posición de la raíz buscada escalando los ejes adecuadamente
- c) (3p) Determina mediante el método de regula falsi el volumen del recipiente con un error menor que 10^{-5} . Indica el número de iteraciones empleadas. Calcula el error y verifica que es menor que 10^{-5}

Respuesta

a) $f(V) = \frac{nRT}{V - nb} - \frac{n^2a}{V^2} - P = 0$

b)

```
R = 0.08206;  
n = 1.5;  
a = 1.39;  
b = 0.03913;  
T = 25 + 273;  
P = 13.5;  
  
F = @(V) (((n*R*T)./(V - n*b)) .* ((n^2 * a) ./ (V.^2))) - P;  
  
V=1:0.1:10;  
f=F(V);  
plot(V,f,'LineWidth',2)  
xlabel('V(l)')  
ylabel('f(v)')  
yline(0)  
grid on
```



Se observa que la raíz está en el intervalo [2, 3]. Calculamos el volumen mediante regula falsi:

```
[Vsol,i] = regulafalsi(F,2,3,1e-5);
fprintf('El volumen a 13.5 atm es de %6.4f litros después de %i iteraciones\n',Vsol,i)
```

El volumen a 13.5 atm es de 2.0604 litros después de 6 iteraciones

Calculamos la solución mediante Matlab y el error:

```
sm = fzero(F,2);
er = abs(sm - Vsol);
fprintf('El error absoluto es de %6.4e\n',er)
```

El error absoluto es de 4.3030e-08

Se verifica que el error es menor que 10^{-5}