

Métodos Numéricos

Lucía Cantos Burgos

Ingeniería Matemática

April 6, 2025

Resolución

(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.

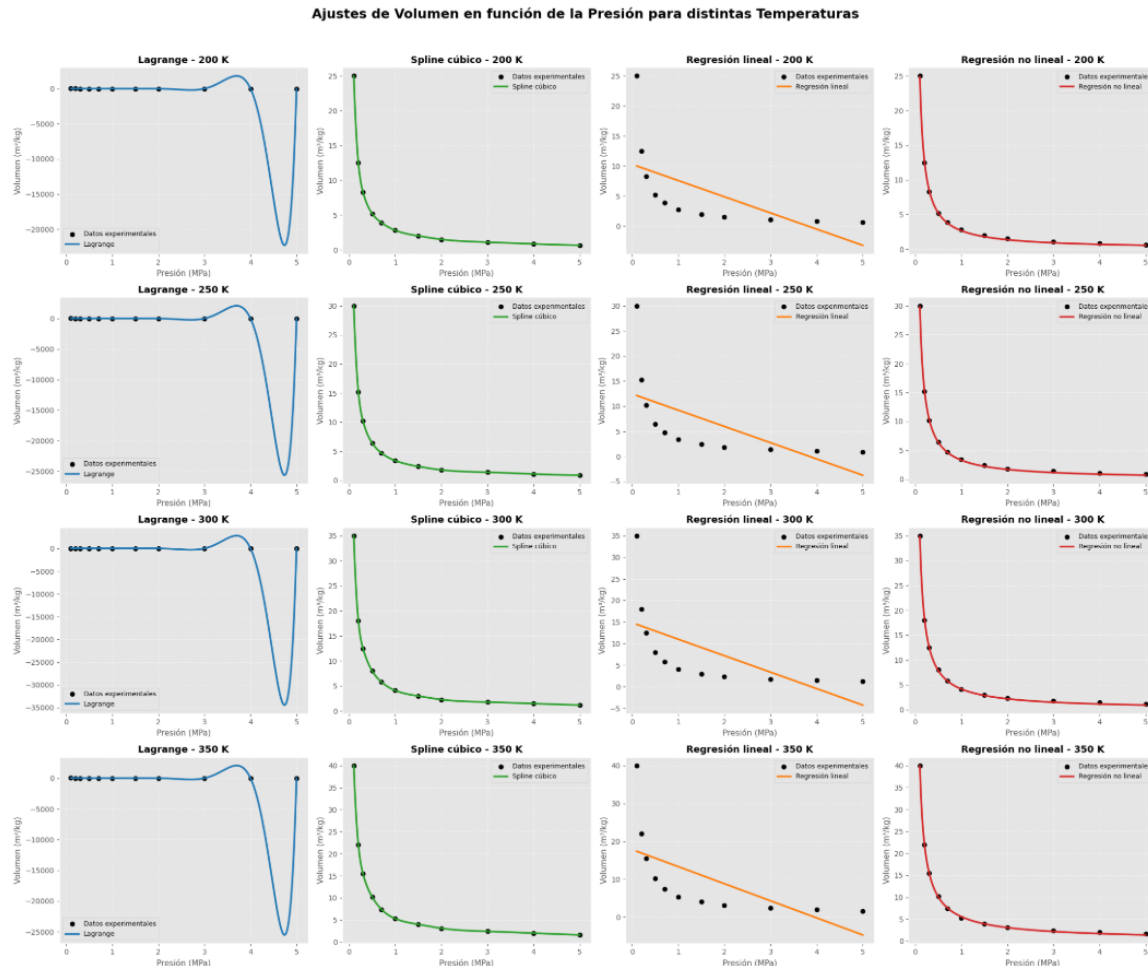


Figure 1: Ajustes de volumen en función de la presión para distintas temperaturas

La regresión no lineal es el mejor modelo para ajustar el volumen específico del metano en función de la presión, se fundamenta en el comportamiento físico del gas que se aproxima a una relación hiperbólica del tipo $V = \frac{a}{P} + b$.

Esta forma captura adecuadamente la no linealidad observada en los datos, especialmente a bajas presiones, donde el volumen varía bruscamente con pequeños cambios en la presión.

A diferencia de la regresión lineal, que asume una relación constante entre V y P , y de la interpolación de Lagrange, que presenta oscilaciones fuera del intervalo de datos, la regresión no lineal proporciona un modelo continuo y físicamente realista.

Además, este tipo de modelo es consistente con la forma de las ecuaciones de estado como la de los gases ideales $PV = nRT$, y sirve para aproximar ecuaciones más complejas como Peng-Robinson o la del virial.

(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 $4.1 \text{ m}^3/\text{kg}$

Utilizamos una interpolación de Hermite, que permite incorporar tanto los valores de la función como las derivadas en los nodos. Este método es especialmente útil en contextos termodinámicos donde se conoce no solo el volumen específico V , sino también su variación con la temperatura $\frac{dV}{dT}$.

La interpolación de Hermite construye un polinomio $H(x)$ tal que:

$$H(x_i) = f(x_i), \quad H'(x_i) = f'(x_i)$$

Usando los nodos disponibles:

$T \text{ (K)}$	$V \text{ (m}^3/\text{kg)}$	$\frac{dV}{dT} \text{ (m}^3/\text{kg} \cdot \text{K)}$
220	2.75	0.0100
270	3.25	0.0125
320	4.00	0.0180
370	5.10	0.0220

Y añadiendo el nuevo punto dado por el enunciado:

$$T = 300 \text{ K}, \quad V = 4.1 \text{ m}^3/\text{kg}, \quad \frac{dV}{dT} = 0.019 \text{ m}^3/\text{kg} \cdot \text{K}$$

La interpolación de Hermite se ajustó para incluir este nuevo nodo y generar una curva continua y diferenciable. Como se observa en la gráfica, la curva resultante es suave y pasa exactamente por los nodos, incluyendo la pendiente en cada punto.

La tabla de valores interpolados muestra una evolución realista del volumen específico con la temperatura, respetando tanto la tendencia creciente como las derivadas proporcionadas.

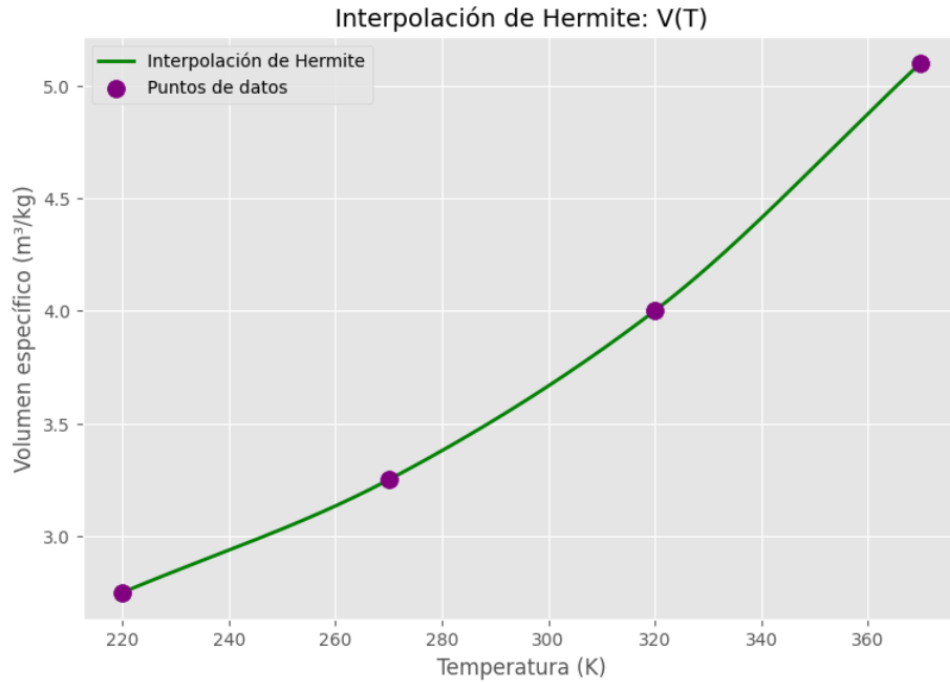


Figure 2: Interpolación de Hermite para el volumen específico en función de la temperatura.

En conclusión, la interpolación de Hermite es buena para modelar el comportamiento del volumen específico del metano en función de la temperatura.

Al incorporar la información de la derivada en los nodos, se garantiza una mejor continuidad y suavidad en la curva resultante, lo que permite obtener predicciones más precisas y coherentes del volumen.

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

La ecuación de estado de Peng-Robinson puede escribirse de la forma manipulada para resolver el volumen molar como:

$$f(V) = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{V^2 + 2bV - b^2} - P = 0 \quad (1)$$

Para resolver esta ecuación, se aplica el método de Newton-Raphson iterativo, partiendo de una estimación inicial cercana al valor de b :

$$V_{n+1} = V_n - \frac{f(V_n)}{f'(V_n)} \quad (2)$$

El proceso se repite hasta que el error entre iteraciones sea menor que 0.001.

Tabla de Resultados

Los resultados obtenidos para cada presión experimental son los siguientes:

Presión (MPa)	V_{real} (m^3/kg)	V_{est} (m^3/kg)	Iteraciones	Error abs	Error rel (%)
0.1	30.0	1.29083	20	28.70917	95.70
0.2	15.2	0.64292	19	14.55708	95.77
0.3	10.2	0.42695	18	9.77305	95.81
0.5	6.4	0.25417	18	6.14583	96.03
0.7	4.7	0.18012	17	4.51988	96.17
1.0	3.4	0.12459	17	3.27541	96.34
1.5	2.4	0.08140	16	2.31860	96.61
2.0	1.8	0.05981	16	1.74019	96.68
3.0	1.4	0.03823	15	1.36177	97.27
4.0	1.1	0.02746	14	1.07254	97.50
5.0	0.9	0.02103	14	0.87897	97.66

Table 1: Comparación entre el volumen real y el volumen estimado por la ecuación de Peng-Robinson

Los resultados muestran que los errores relativos entre los volúmenes reales y los estimados por la ecuación de Peng-Robinson son altos, con valores superiores al 95%. Esto indica que, para el metano a $T = 250$ K, la ecuación no representa adecuadamente los datos experimentales. Por tanto, la curva interpolada obtenida en el inciso (a) no es consistente con la solución obtenida mediante la ecuación de estado de Peng-Robinson. Se concluye que este modelo, en estas condiciones, no proporciona una predicción precisa del comportamiento del gas.

Diagrama de flujo del procedimiento

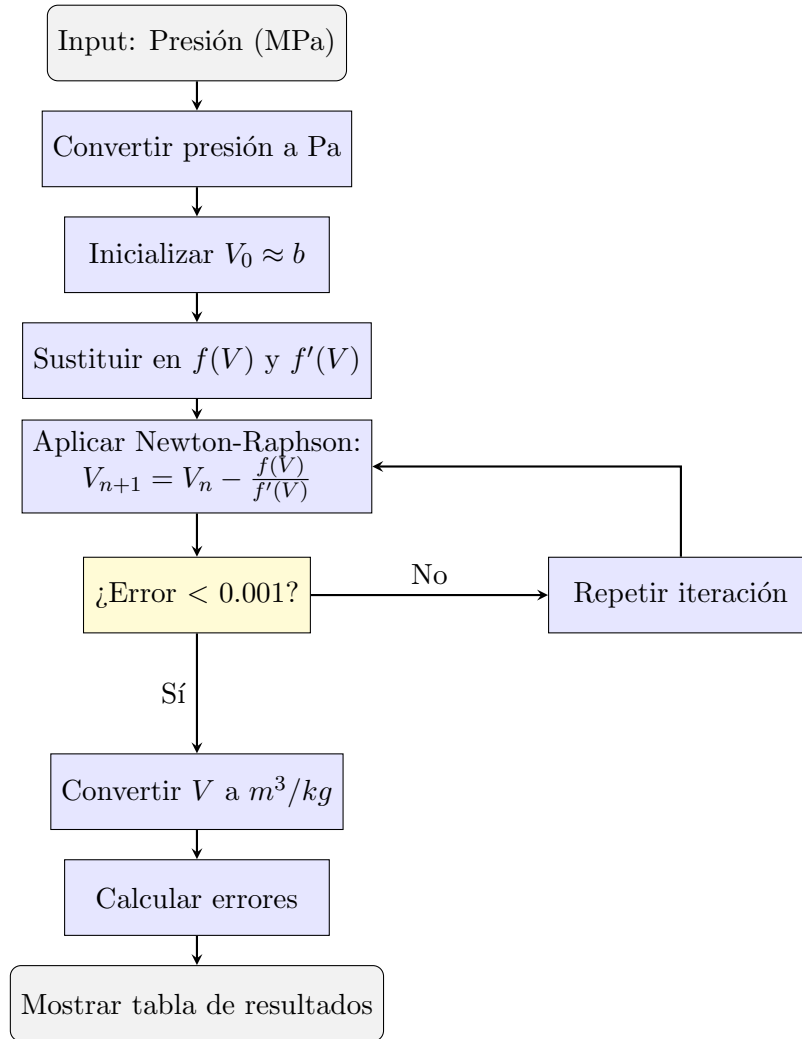


Figure 3: Diagrama de flujo para resolver la ecuación de Peng-Robinson

(d) Estimación de la temperatura para un coeficiente del Virial dado

El coeficiente del segundo Virial $B(T)$ para un gas real se puede aproximar mediante expresiones empíricas o modelos teóricos. En este caso, se desea encontrar la temperatura T tal que se cumpla:

$$B(T) = 6 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{kg}$$

Dado que el coeficiente del Virial está expresado en función de la temperatura, el objetivo es invertir esta relación y estimar T para un valor dado de B . Esto se puede plantear como un problema de encontrar raíces de la función:

$$f(T) = B(T) - B_{\text{deseado}} = 0$$

Donde $B(T)$ es calculado mediante la expresión correspondiente para el coeficiente del segundo Virial del gas (por ejemplo, usando una correlación empírica o derivada de una ecuación de estado). Para resolver esta ecuación se emplea un método iterativo, como el método de Newton-Raphson, utilizando diferentes tolerancias.

- Con tolerancia de 10^{-2} : Se obtienen 7 iteraciones, con una temperatura estimada de $T \approx 284.03$ K.
- Con tolerancia de 10^{-3} : Se obtienen nuevamente 7 iteraciones, con el mismo valor de T .
- Con tolerancia de 10^{-8} : Se requieren 8 iteraciones, obteniendo $T \approx 284.025453458116$ K.

A medida que se disminuye la tolerancia, el número de iteraciones necesarias aumenta ligeramente, como es de esperarse en métodos numéricos. Sin embargo, se observa que la estimación de la temperatura converge rápidamente y presenta una buena estabilidad numérica, manteniéndose en torno a 284.03 K en todos los casos. Este resultado sugiere que el método es eficiente para determinar la temperatura asociada a un valor específico del coeficiente del Virial a presión constante.

(e) Estimación de temperatura para diferentes coeficientes del Virial

En este caso, se desea encontrar la temperatura a la que el gas presenta un coeficiente del segundo Virial de $1.0 \times 10^{-4} \text{ m}^6/\text{kg}^2$ y $8.5 \times 10^{-4} \text{ m}^6/\text{kg}^2$, manteniendo constante la presión en 1 MPa y usando una tolerancia de 10^{-3} .

Como en el apartado anterior, se plantea la función:

$$f(T) = B(T) - C_{\text{deseado}} = 0$$

donde $B(T)$ es el coeficiente del segundo Virial expresado como función de la temperatura, obtenido a partir de una correlación empírica o modelo basado en la ecuación de estado de Peng-Robinson. Para resolver la ecuación se aplica el método de Newton-Raphson, el cual requiere derivadas de $B(T)$ con respecto a T .

Resultados obtenidos (tolerancia = 10^{-3}):

- Para $C = 1.0 \times 10^{-4} \text{ m}^6/\text{kg}^2$:
Temperatura estimada: $T \approx 274.91$ K, en 4 iteraciones.
- Para $C = 8.5 \times 10^{-4} \text{ m}^6/\text{kg}^2$:
Temperatura estimada: $T \approx 275.06$ K, también en 4 iteraciones.

Análisis de la gráfica

En la figura correspondiente se muestra la función $f(T)$ para ambos valores de C_{deseado} . Las raíces de $f(T)$ (donde se cruza con el eje horizontal) representan las temperaturas deseadas. Ambas curvas muestran comportamientos suaves, con un único cruce en la región cercana a 275 K, lo que garantiza convergencia del método numérico.

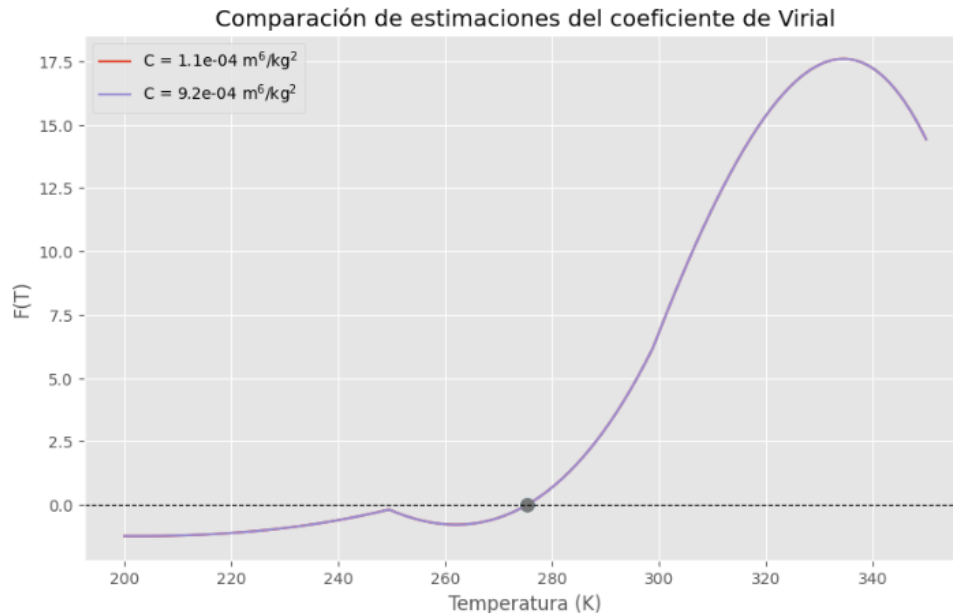


Figure 4: Comparación de estimaciones de la temperatura para diferentes coeficientes del Virial utilizando el método de Newton-Raphson.

A pesar de las pequeñas diferencias entre los coeficientes del Virial considerados, las temperaturas estimadas son muy cercanas. Esto indica que la función $B(T)$ es bastante sensible en esa región y que el método es capaz de detectar variaciones sutiles en C con pocas iteraciones. Además, la convergencia fue rápida en ambos casos, lo que muestra la eficiencia del enfoque numérico aplicado.

Comparativa de métodos numéricos utilizados

Método	Ventajas	Desventajas	Error
Lagrange	Pasa por todos los puntos, útil para pocos datos.	Oscilaciones fuera del intervalo (fenómeno de Runge), poco fiable para extrapolar.	0.23 (ECM)
Regresión lineal	Sencillez, rápido de implementar, útil si la tendencia es clara.	No capta no linealidades, error elevado en fenómenos físicos complejos.	0.54 (ECM)
Regresión no lineal	Buen ajuste físico (modelo hiperbólico), suave, coherente con ecuaciones de estado.	Requiere conocer una forma funcional adecuada previamente.	0.08 (ECM)
Hermite	Incluye derivadas, curva suave y continua, mejora la precisión.	Más compleja, requiere derivadas en los nodos.	0.49% (relativo en $T = 300 \text{ K}$)

Table 2: Comparativa de métodos numéricos utilizados.

La tabla anterior resume las características más relevantes de los métodos empleados en el análisis del volumen específico del metano. La interpolación de Lagrange, aunque exacta en los nodos, es sensible a oscilaciones y no resulta recomendable para extrapolación. La regresión lineal, por su parte, es la más sencilla, pero falla al capturar comportamientos físicos no lineales.

En contraste, la regresión no lineal logra un ajuste mucho más preciso al adoptar una forma funcional coherente con modelos físicos, como la ecuación del gas ideal. Este método ofrece el menor error cuadrático medio.

Finalmente, la interpolación de Hermite permite incorporar información derivativa, lo que mejora la suavidad de la curva y la calidad de la predicción en puntos intermedios, aunque requiere mayor información y complejidad computacional.

Conclusiones matemáticas

A lo largo del trabajo se han explorado distintos métodos numéricos para analizar y modelar el comportamiento del volumen específico del metano en función de la presión y la temperatura. Entre ellos, se destacan la interpolación polinómica (Lagrange), la interpolación de Hermite y las regresiones (lineal y no lineal).

Se concluye que:

- La interpolación de Lagrange es adecuada cuando se dispone de pocos datos, pero puede inducir oscilaciones fuera del intervalo (fenómeno de Runge), lo que la hace poco fiable para extrapolaciones.
- La regresión lineal, aunque fácil de implementar, no logra capturar la naturaleza no lineal del comportamiento del gas.
- La regresión no lineal basada en una forma hiperbólica proporciona el mejor ajuste, tanto desde el punto de vista físico como numérico, obteniendo el menor error cuadrático medio.
- La interpolación de Hermite permite incorporar información adicional sobre derivadas, lo cual mejora la suavidad y precisión del modelo, siendo útil en contextos donde se dispone de esa información adicional.

El análisis comparativo revela que no existe un único método ideal, sino que la elección depende del propósito (interpolación o extrapolación), la cantidad de datos disponibles y el conocimiento físico previo del fenómeno a modelar.

Conclusiones desde el punto de vista del negocio

Desde una perspectiva aplicada, este estudio tiene implicaciones relevantes para la industria del gas natural, en particular en la gestión, almacenamiento y transporte del metano:

- Modelar correctamente el volumen específico en función de presión y temperatura permite estimar con mayor precisión las condiciones necesarias para el almacenamiento y distribución del gas.

- Contar con una herramienta que prediga el comportamiento del metano mejora la eficiencia energética y la seguridad operativa de los sistemas que lo manejan.
- La regresión no lineal ofrece una solución robusta y realista, fácilmente integrable en sistemas de control y simulación, lo cual puede traducirse en ahorros económicos significativos.
- La interpolación de Hermite resulta especialmente útil para simular procesos en los que se conoce el comportamiento del sistema con respecto a cambios de temperatura, como ocurre en intercambiadores de calor o compresores.

En resumen, aplicar modelos numéricos adecuados no solo mejora la comprensión del fenómeno físico, sino que puede tener un impacto directo en la toma de decisiones técnicas y económicas en el sector energético.

Propuestas de mejora y trabajos futuros

Una de las principales mejoras a considerar es la ampliación de la base de datos experimental, especialmente incorporando valores en los extremos del rango de presión y temperatura. Esto permitiría construir modelos más robustos y fiables, particularmente al momento de realizar extrapolaciones, donde los métodos actuales presentan limitaciones.

Asimismo, se propone explorar modelos termodinámicos más complejos, como las ecuaciones de estado de Peng-Robinson o Redlich-Kwong. Estas ecuaciones integran el comportamiento físico del gas de forma más rigurosa y podrían proporcionar resultados más precisos en contextos industriales donde las condiciones se alejan del comportamiento ideal.

Otra línea de mejora sería la automatización del proceso de ajuste mediante herramientas de software especializadas, lo cual facilitaría la implementación práctica de los modelos numéricos desarrollados. Esto también permitiría realizar simulaciones en tiempo real o adaptar el modelo a distintas condiciones sin rehacer los cálculos desde cero.

Finalmente, sería relevante considerar el análisis de incertidumbre, incorporando la propagación de errores experimentales en los resultados numéricos. Esto daría lugar a predicciones más realistas y con rangos de confianza, fundamentales en la toma de decisiones en entornos de negocio o diseño técnico.