



“Isotermas Pv-P y curva de Boyle para gas metano (CH_4)”

Termodinámica y teoría cinética

2º Grado en Física

Luis Alberto Vázquez Alfonsín

1 Coeficientes del virial del gas metano según T en función de T, a y b.

T (K)	B(T) l/mol	C(T) l/mol ²	D(T) l/mol ²	B'(T) l/atm	C'(T) 1/l/atm ²	D'(T) l/matm ⁴
278,15	-0,0565	0,00252	0,0096	-0,002475	-0,00000128	0,0000008170
283,15	-0,0547	0,00243	0,0093	-0,002355	-0,00000105	0,0000007480
288,15	-0,0530	0,00233	0,0090	-0,002243	-0,00000085	0,0000006859
293,15	-0,0514	0,00225	0,0087	-0,002136	-0,00000068	0,0000006299
298,15	-0,0498	0,00217	0,0084	-0,002036	-0,00000052	0,0000005792
303,15	-0,0483	0,00209	0,0081	-0,001940	-0,00000038	0,0000005334
308,15	-0,0468	0,00202	0,0079	-0,001850	-0,00000026	0,0000004918
313,15	-0,0454	0,00196	0,0076	-0,001765	-0,00000015	0,0000004541
318,15	-0,0440	0,00190	0,0074	-0,001684	-0,00000006	0,0000004197
323,15	-0,0426	0,00184	0,0072	-0,001607	0,00000003	0,0000003885
328,15	-0,0413	0,00178	0,0069	-0,001534	0,00000010	0,0000003600
333,15	-0,0400	0,00173	0,0067	-0,001465	0,00000017	0,0000003339
338,15	-0,0388	0,00168	0,0065	-0,001399	0,00000023	0,0000003101
343,15	-0,0376	0,00164	0,0064	-0,001336	0,00000028	0,0000002883
348,15	-0,0365	0,00159	0,0062	-0,001276	0,00000032	0,0000002683
353,15	-0,0353	0,00155	0,0060	-0,001219	0,00000036	0,0000002499
358,15	-0,0342	0,00151	0,0058	-0,001165	0,00000040	0,0000002331
363,15	-0,0332	0,00148	0,0057	-0,001113	0,00000043	0,0000002175
368,15	-0,0321	0,00145	0,0055	-0,001064	0,00000045	0,0000002032
373,15	-0,0311	0,00141	0,0054	-0,001017	0,00000047	0,0000001900
378,15	-0,0301	0,00138	0,0052	-0,000972	0,00000049	0,0000001779
383,15	-0,0292	0,00135	0,0051	-0,000929	0,00000051	0,0000001666
388,15	-0,0283	0,00133	0,0050	-0,000887	0,00000052	0,0000001562
393,15	-0,0274	0,00130	0,0049	-0,000848	0,00000053	0,0000001466
398,15	-0,0265	0,00128	0,0047	-0,000810	0,00000054	0,0000001376
403,15	-0,0256	0,00126	0,0046	-0,000774	0,00000055	0,0000001293
408,15	-0,0248	0,00124	0,0045	-0,000739	0,00000055	0,0000001216
413,15	-0,0239	0,00122	0,0044	-0,000706	0,00000056	0,0000001145
418,15	-0,0231	0,00120	0,0043	-0,000674	0,00000056	0,0000001078
423,15	-0,0224	0,00118	0,0042	-0,000644	0,00000056	0,0000001016
428,15	-0,0216	0,00116	0,0041	-0,000615	0,00000056	0,0000000958
433,15	-0,0208	0,00115	0,0040	-0,000587	0,00000056	0,0000000904
438,15	-0,0201	0,00113	0,0039	-0,000560	0,00000056	0,0000000854
443,15	-0,0194	0,00112	0,0038	-0,000534	0,00000056	0,0000000807
448,15	-0,0187	0,00110	0,0037	-0,000509	0,00000056	0,0000000763
453,15	-0,0180	0,00109	0,0037	-0,000485	0,00000055	0,0000000722
458,15	-0,0174	0,00108	0,0036	-0,000462	0,00000055	0,0000000684
463,15	-0,0167	0,00107	0,0035	-0,000440	0,00000055	0,0000000647
468,15	-0,0161	0,00106	0,0034	-0,000418	0,00000054	0,0000000614
473,15	-0,0154	0,00105	0,0034	-0,000398	0,00000054	0,0000000582
478,15	-0,0148	0,00104	0,0033	-0,000378	0,00000053	0,0000000552
483,15	-0,0142	0,00103	0,0032	-0,000359	0,00000053	0,0000000524
488,15	-0,0136	0,00102	0,0032	-0,000341	0,00000052	0,0000000498
493,15	-0,0131	0,00101	0,0031	-0,000323	0,00000052	0,0000000473
498,15	-0,0125	0,00101	0,0030	-0,000306	0,00000051	0,0000000450
503,15	-0,0120	0,00100	0,0030	-0,000289	0,00000050	0,0000000428
508,15	-0,0114	0,00099	0,0029	-0,000274	0,00000050	0,0000000407
513,15	-0,0109	0,00099	0,0029	-0,000258	0,00000049	0,0000000388
518,15	-0,0104	0,00098	0,0028	-0,000244	0,00000048	0,0000000370
523,15	-0,0098	0,00098	0,0028	-0,000229	0,00000048	0,0000000352
528,15	-0,0093	0,00097	0,0027	-0,000216	0,00000047	0,0000000336
533,15	-0,0089	0,00097	0,0027	-0,000202	0,00000046	0,0000000321
538,15	-0,0084	0,00096	0,0026	-0,000190	0,00000046	0,0000000306
543,15	-0,0079	0,00096	0,0026	-0,000177	0,00000045	0,0000000292
548,15	-0,0074	0,00096	0,0025	-0,000165	0,00000045	0,0000000279

553,15	-0,0070	0,00095	0,0025	-0,000154	0,00000044	0,0000000267
558,15	-0,0065	0,00095	0,0024	-0,000142	0,00000043	0,0000000255
563,15	-0,0061	0,00095	0,0024	-0,000132	0,00000043	0,0000000244
568,15	-0,0057	0,00094	0,0023	-0,000121	0,00000042	0,0000000233
573,15	-0,0052	0,00094	0,0023	-0,000111	0,00000041	0,0000000223
578,15	-0,0048	0,00094	0,0023	-0,000101	0,00000041	0,0000000214
583,15	-0,0044	0,00094	0,0022	-0,000092	0,00000040	0,0000000205
588,15	-0,0040	0,00094	0,0022	-0,000083	0,00000040	0,0000000196
593,15	-0,0036	0,00094	0,0022	-0,000074	0,00000039	0,0000000188
598,15	-0,0032	0,00093	0,0021	-0,000065	0,00000038	0,0000000180
603,15	-0,0028	0,00093	0,0021	-0,000057	0,00000038	0,0000000173
608,15	-0,0024	0,00093	0,0021	-0,000049	0,00000037	0,0000000166
613,15	-0,0021	0,00093	0,0020	-0,000041	0,00000037	0,0000000159
618,15	-0,0017	0,00093	0,0020	-0,000034	0,00000036	0,0000000153
623,15	-0,0013	0,00093	0,0020	-0,000026	0,00000035	0,0000000147
628,15	-0,0010	0,00093	0,0019	-0,000019	0,00000035	0,0000000141
633,15	-0,0006	0,00093	0,0019	-0,000012	0,00000034	0,0000000136
638,15	-0,0003	0,00093	0,0019	-0,000006	0,00000034	0,0000000130
643,15	0,0000	0,00093	0,0018	0,000001	0,00000033	0,0000000125
648,15	0,0004	0,00093	0,0018	0,000007	0,00000033	0,0000000121
653,15	0,0007	0,00093	0,0018	0,000013	0,00000032	0,0000000116
658,15	0,0010	0,00093	0,0018	0,000019	0,00000032	0,0000000112
663,15	0,0013	0,00093	0,0017	0,000024	0,00000031	0,0000000107
668,15	0,0016	0,00093	0,0017	0,000030	0,00000031	0,0000000103
673,15	0,0020	0,00093	0,0017	0,000035	0,00000030	0,0000000100
678,15	0,0023	0,00093	0,0017	0,000041	0,00000030	0,0000000096
683,15	0,0026	0,00093	0,0016	0,000046	0,00000029	0,0000000093
688,15	0,0028	0,00093	0,0016	0,000050	0,00000029	0,0000000089
693,15	0,0031	0,00093	0,0016	0,000055	0,00000029	0,0000000086
698,15	0,0034	0,00093	0,0016	0,000060	0,00000028	0,0000000083
703,15	0,0037	0,00094	0,0015	0,000064	0,00000028	0,0000000080
708,15	0,0040	0,00094	0,0015	0,000069	0,00000027	0,0000000077
713,15	0,0043	0,00094	0,0015	0,000073	0,00000027	0,0000000075
273,15	-0,0583	0,00263	0,0100	-0,002601	-0,00000153	0,0000008938
278,15	-0,0565	0,00252	0,0096	-0,002475	-0,00000128	0,0000008170
283,15	-0,0547	0,00243	0,0093	-0,002355	-0,00000105	0,0000007480
288,15	-0,0530	0,00233	0,0090	-0,002243	-0,00000085	0,0000006859
293,15	-0,0514	0,00225	0,0087	-0,002136	-0,00000068	0,0000006299
298,15	-0,0498	0,00217	0,0084	-0,002036	-0,00000052	0,0000005792
303,15	-0,0483	0,00209	0,0081	-0,001940	-0,00000038	0,0000005334
308,15	-0,0468	0,00202	0,0079	-0,001850	-0,00000026	0,0000004918
313,15	-0,0454	0,00196	0,0076	-0,001765	-0,00000015	0,0000004541
318,15	-0,0440	0,00190	0,0074	-0,001684	-0,00000006	0,0000004197
323,15	-0,0426	0,00184	0,0072	-0,001607	0,00000003	0,0000003885

Tabla 1.1: valores de T y 6 coeficientes del virial (desarrollo en V y en P)

2 Representación isotermas

NOTA IMPORTANTE: se eligen combinaciones de presiones altas para que las ecuaciones sigan las suposiciones seguidas durante su obtención y sean así más exactas.

Unidades:

$T \rightarrow K$

$V \rightarrow l/mol$

$P \rightarrow atm$

Isotermas 873,15 + 100i K (hacia abajo) para presiones muy altas

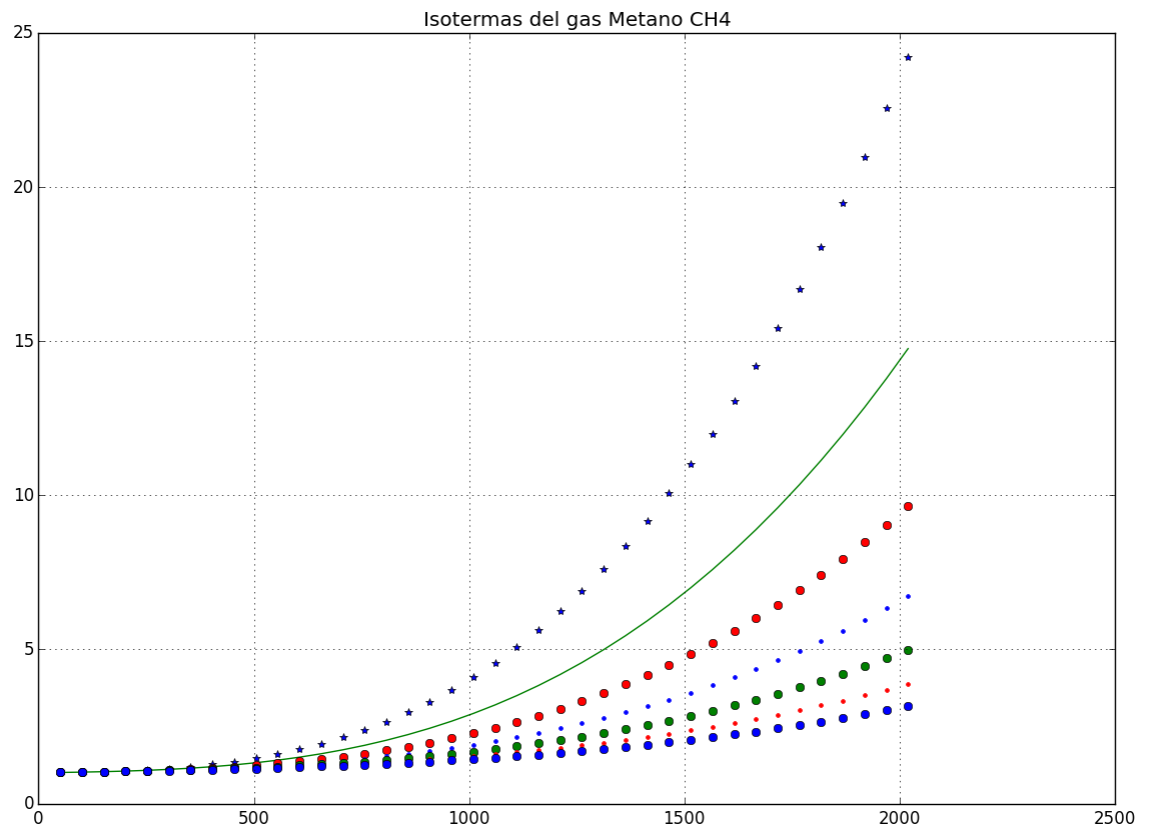


Figura 2.1: Isotermas 873,15 K (arriba del todo) + 100 K (hacia abajo) para presiones muy altas

Isotermas 873,15 + 100i K (hacia abajo) para presiones muy altas

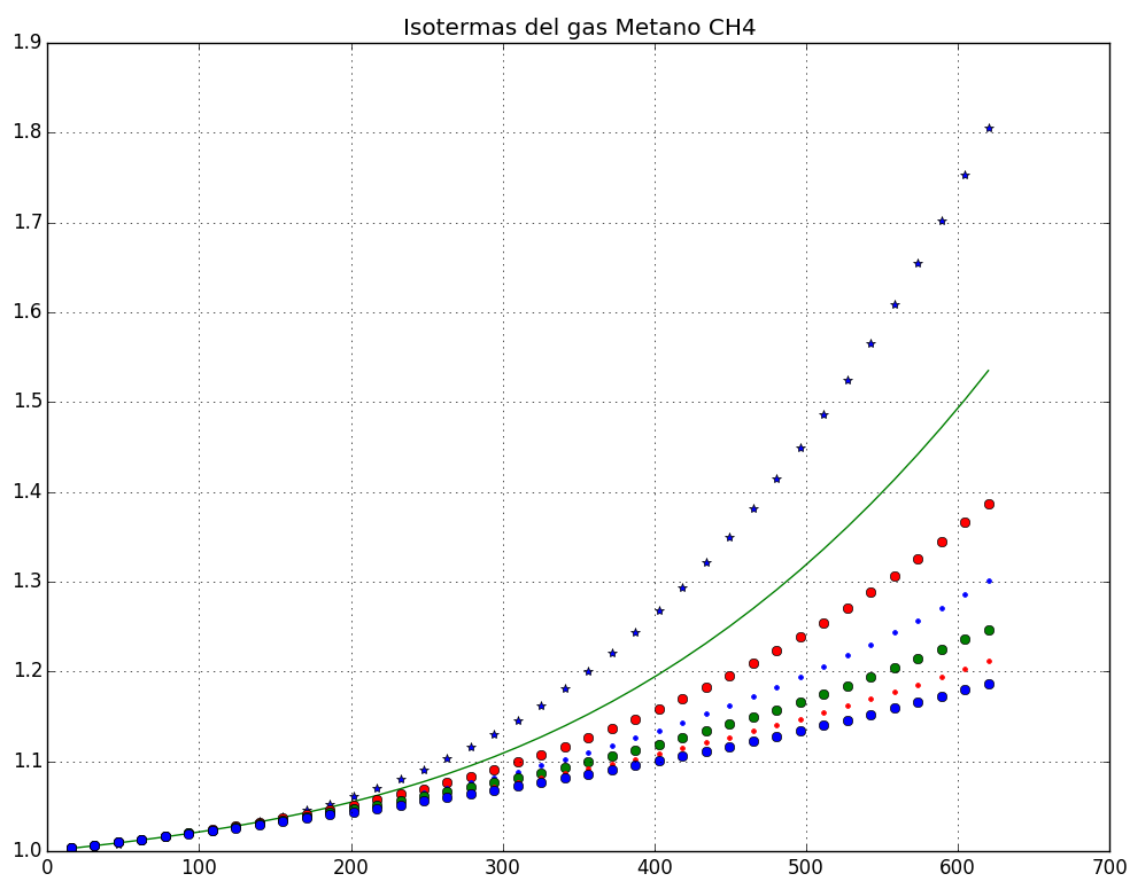


Figura 2.2: Isotermas 873,15 K (arriba) + 100 K (hacia abajo) para presiones relativamente altas

Isotermas de 243,15 + 5100i K (hacia abajo) y presiones muy altas

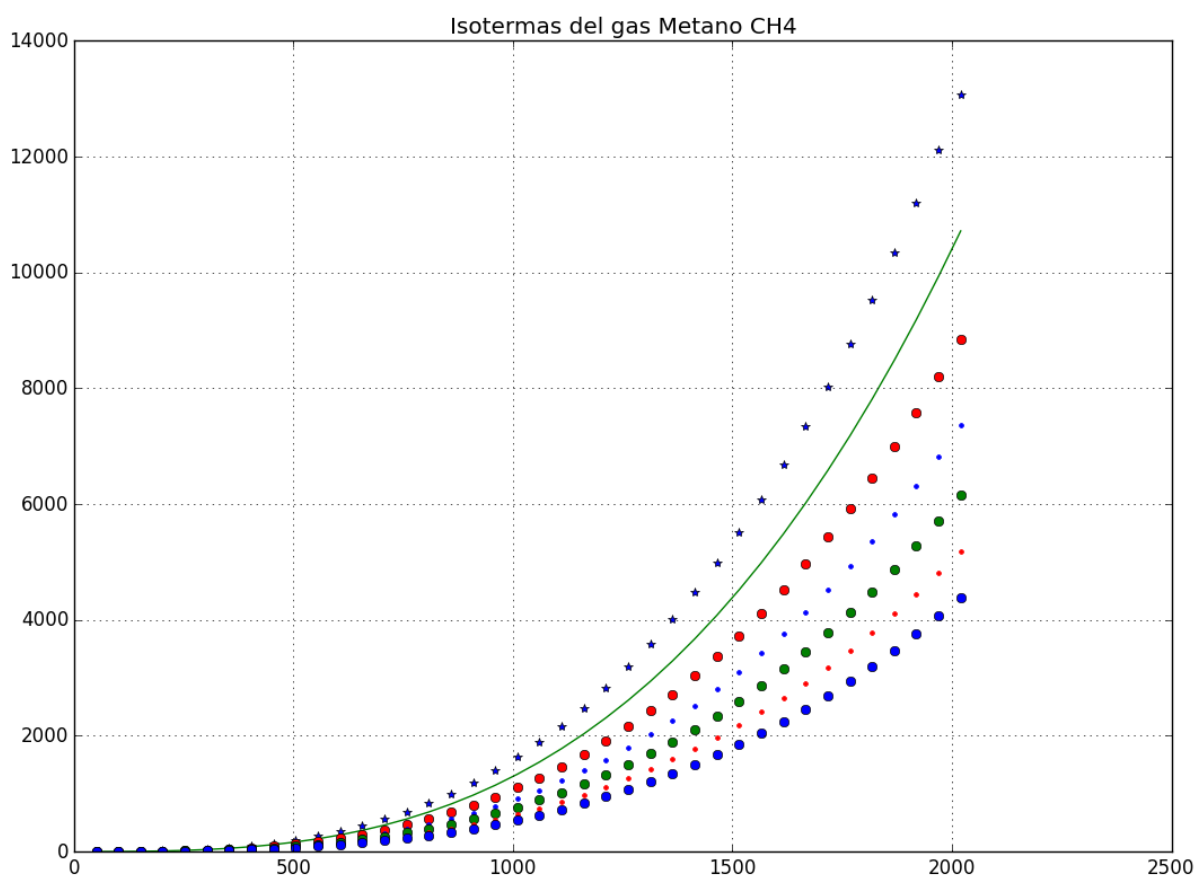


Figura 2.3: Isotermas de 243,15 K (arriba del todo) + 100 K (hacia abajo) y presiones muy altas

Isotermas de $243,15 + 100i$ K (hacia abajo) y presiones relativamente altas

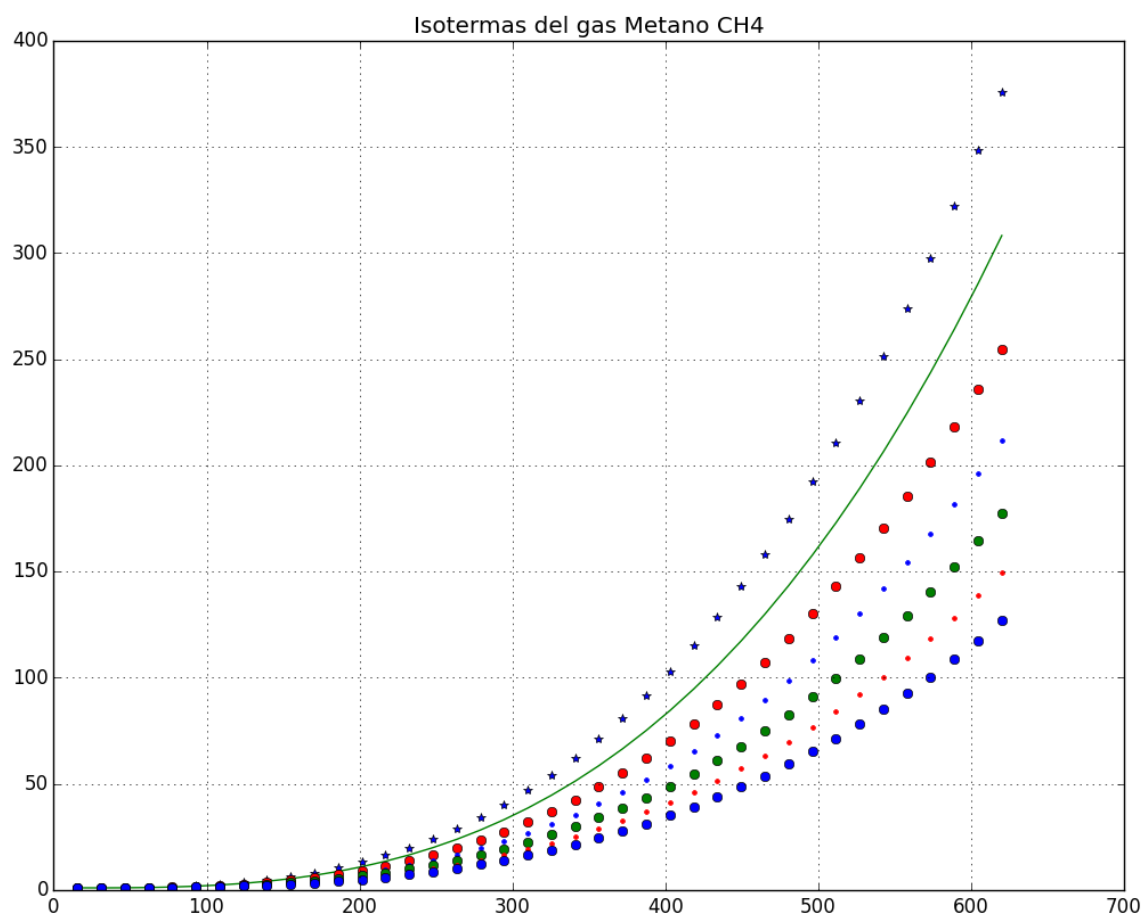


Figura 2.4: Isotermas de 243,15 K (arriba) + 100 K (hacia abajo) y presiones relativamente altas

Isotermas de $273,15 + 100i$ K (hacia abajo) y presiones relativamente bajas

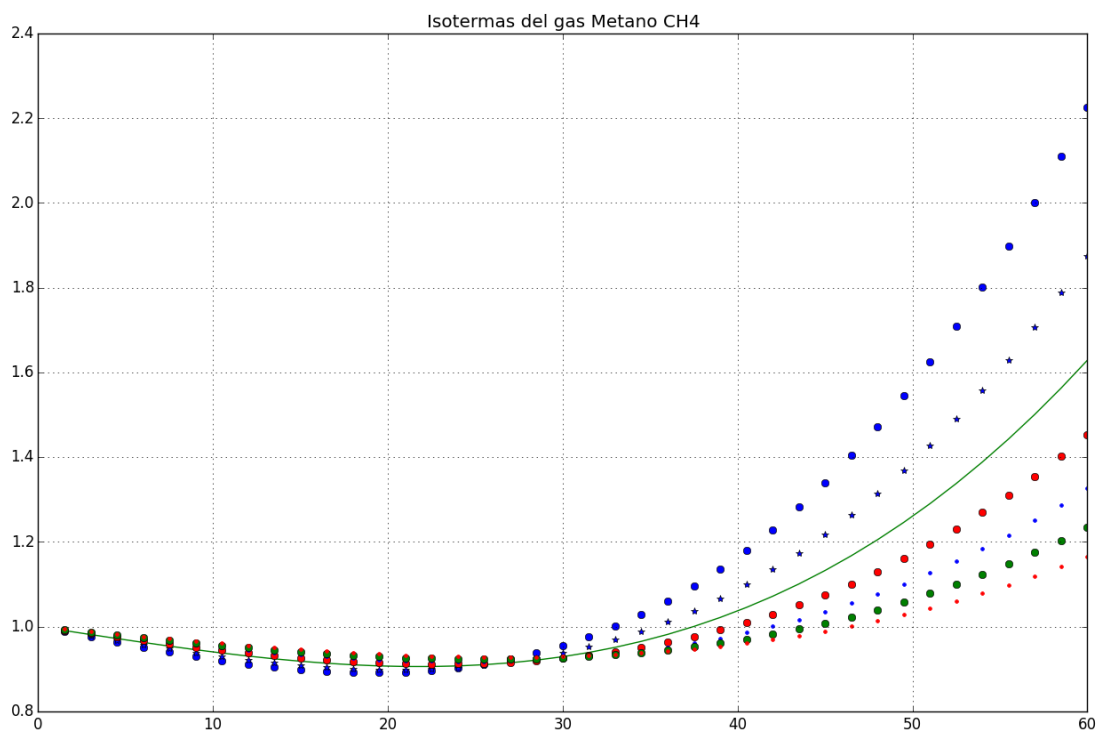


Figura 2.5: Isotermas de 273,15 K (arriba) + 100 K (hacia abajo) y presiones relativamente bajas

Isotermas de $5,15 + 5i$ K (hacia abajo) y presiones muy altas

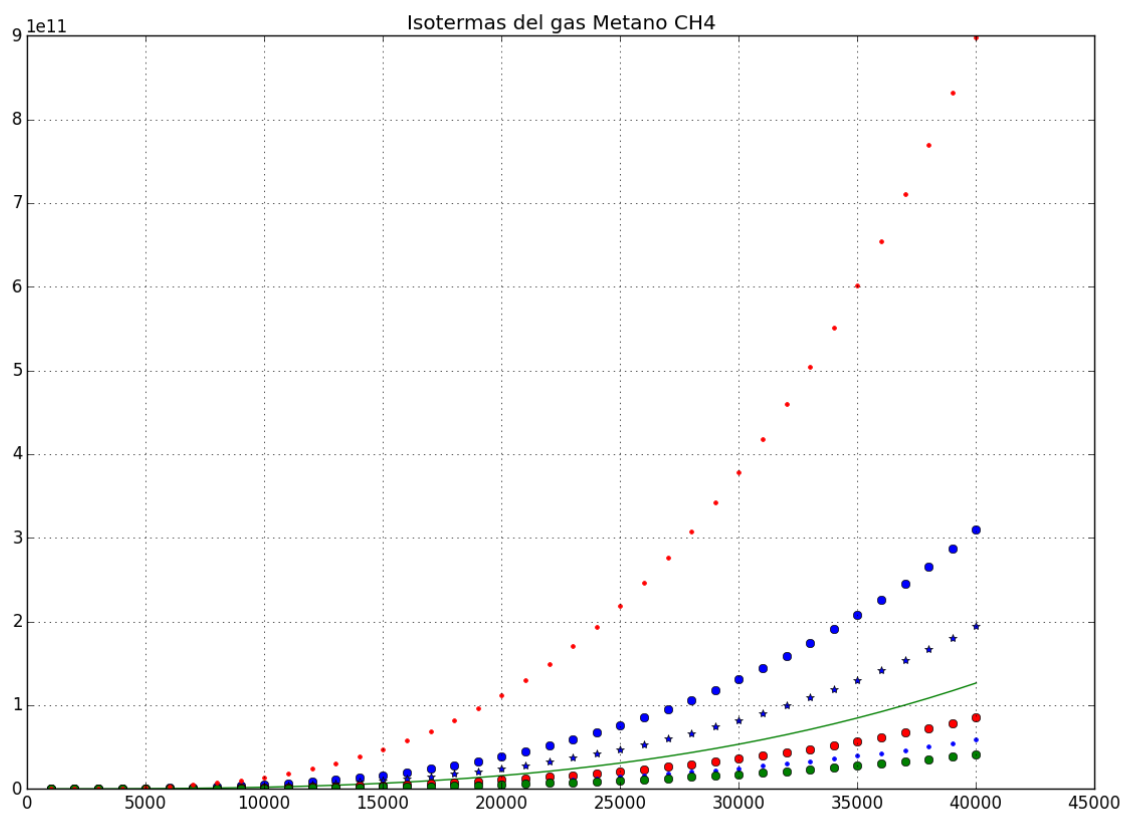


Figura 2.6: Isotermas de 5,15 K (arriba del todo) + 5 K (hacia abajo) y presiones muy altas

Isotermas de 40,15 + 5i K (hacia abajo) y presiones muy altas

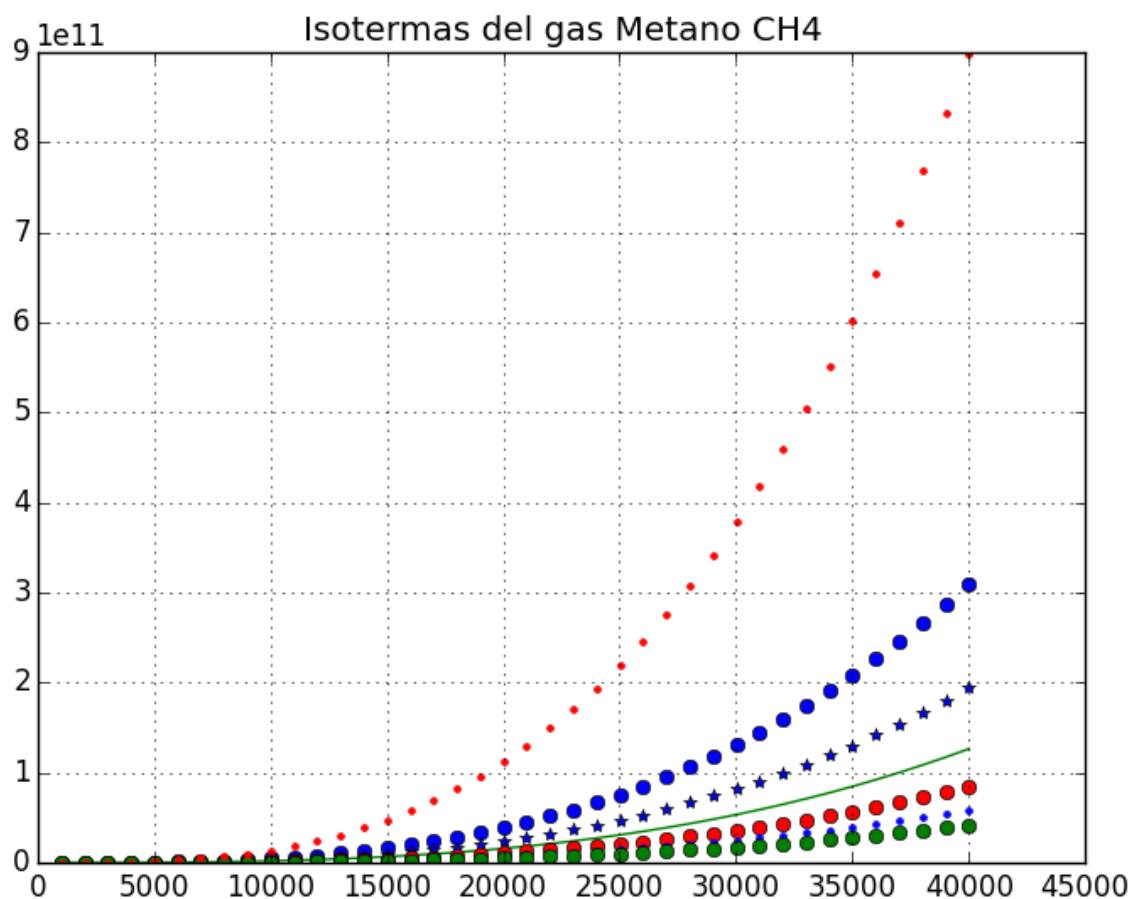


Figura 2.7: Isotermas de 40,15 K (arriba del todo) + 5 K (hacia abajo) y presiones muy altas

3 Curva de Boyle

$T = 303,15$

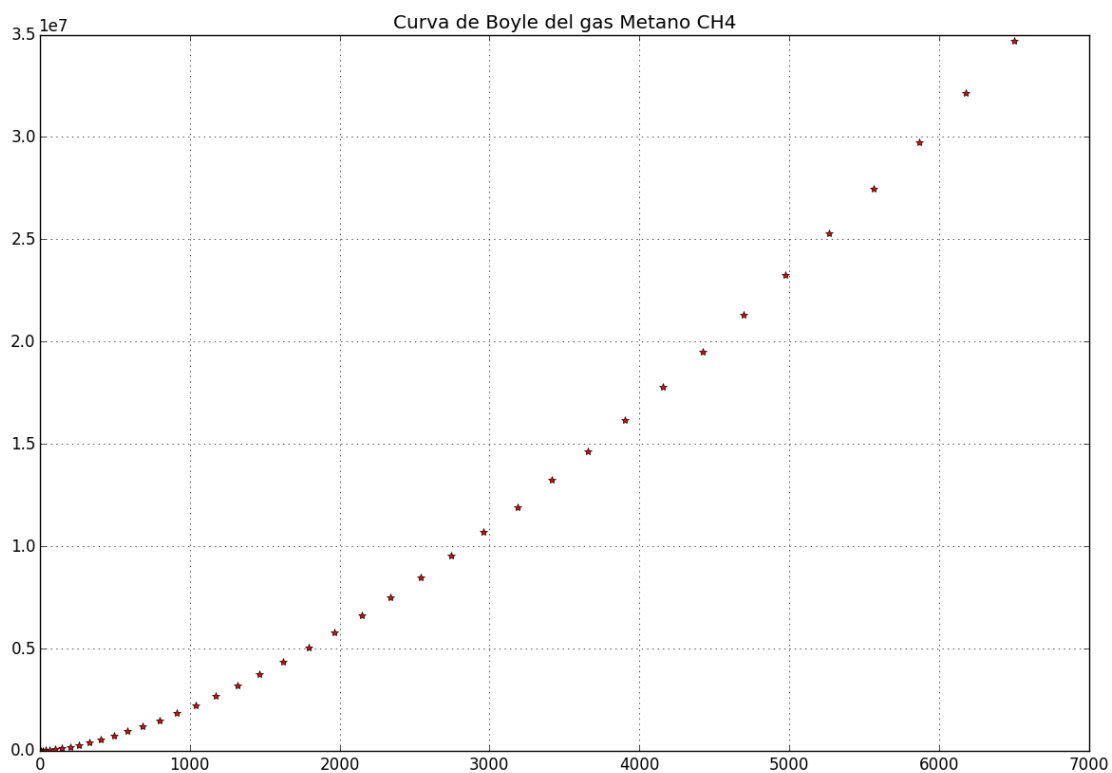


Figura 3.1: Curva de Boyle para $T = 303,15$

T = 1473,15 K

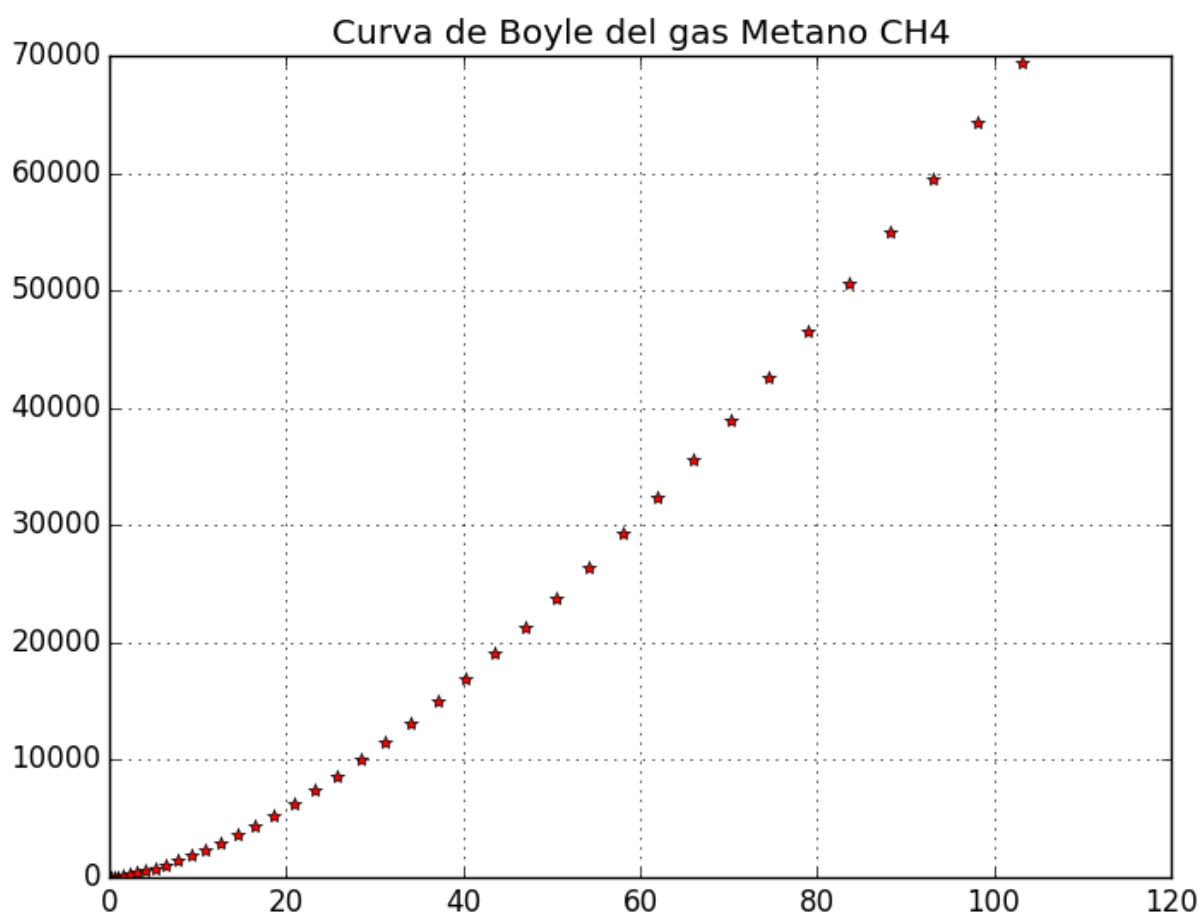


Figura 3.1: Curva de Boyle para T = 1473,15 K

4 Código fuente del programa en lenguaje Python.

```
1  #!/usr/bin/python
2  #-*- coding: utf-8 -*-
3
4  from math import *
5  import matplotlib.pyplot as plt
6  import csv
7  import numpy
8
9  #declaración variable simbólica R
10 a= 2.272883669
11 b= 0.043100000
12
13
14
15 def calculaxBoyle(Bp,Cp,Dp,p):
16     x = 0.0
17     x = Bp+ Cp*2*p + Dp*3*(p**2)
18     return x
19
20 def conviertePav(R, p , T, Bp,Cp,Dp):
21     x = 0.0
22     x = (1 + Bp*p + Cp*(p**2) + Dp*(p**3) )/(R*T*p)
23     return x
24
25 def conv_float(f):
26     n = 0.0
27     try:
28         n=float(f)
29     except ValueError:
30         pass
31     return n
32
33
```

```
34 def hallaBoyle(Bp,Cp,Dp,pv):
35     →
36     → x = [0.0] * len(pv)
37     → for i in range (0,len(pv)):
38         → x[i] = calculaxBoyle( Bp, Cp, Dp, pv[i] )
39         → print('Para la presión P: %5.7f, se obtiene un x de Boyle de %5.7f.'%(pv[i],x[i]))
40     → return x
41
42
43 n_f = 18
44 n_c = 18
45 #Valor de R en atml por litro
46 R = 0.082057
47
48 multiplicador_p = 50
49
50     →
51 ps= [0.5, 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4, 4.5, 5, 5.5, 6, 6.5, 7.0, 7.5, 8.0, 8.5, 9.0, 9.5, 10.0,
52 vs = [0.0] * len(ps)
53
54 for i in range(len(ps)):
55     → ps[i]=ps[i]+(i+1)*multiplicador_p
56
57
58 try:
59     →
60     → #descomentar una u otra linea segun se quieran leer diferentes temperaturas y coeficiente:
61     → #with open('isotermasmetano2.csv', 'rU') as data:
62     → #with open('isotermasgrandes.csv', 'rU') as data:
63     → with open('isotermasgrandes.csv', 'rU') as data:
64         → reader = csv.reader(data,csv.QUOTE_NONNUMERIC)
65         → datos = list(reader)
66         → #longitud del array según la entrada por eficiencia
```

```
67     n_f = len(datos)
68     contador_f = 0
69     print('Num Fil leídas: %d'%(len(datos)))
70     val = [0.0] * len(datos)
71     for x in datos:
72         print('Num col leídas: %d'%(len(x)))
73
74         #resultados leídos por csv
75         val[contador_f] = [0.0] * len(x)
76         contador_c = 0
77         for y in x:
78             val[contador_f][contador_c] = conv_float(y)
79             contador_c += 1
80         contador_f += 1
81     print('\nValores leídos: ')
82     print(val)
83
84
85 except ValueError:
86     print 'Error leyendo'
87 finally:
88     data.close()
89
90
91 plt.figure()
92 ax = plt.subplot(111)
93
94
95 #resultados ejes y e x de ajuste de isotermas, dimensiones inicializadas
96 pvRT = [0.0] * n_f
97 x_virial = [0.0] * n_f
98
99 for i in range(n_f):
```

```

100     pvRT[i] = [0.0] * len(ps)
101     x_virial[i] = [0.0] * len(ps)
102     ecboyle = [0.0] * len(ps)
103
104     #i: número de y que se evalúan
105     #j: número presiones
106     for i in range(0, n_f):
107         for j in range(0, len(ps)):
108             #calcula los volúmenes correspondientes a las presiones
109             v_cal = conviertePav( R, ps[j], val[i][0], val[i][4], val[i][5], val[i][6] )
110
111             #calcula x e y del ajuste
112             pvRT[i][j] = (ps[j]*v_cal)/(R*val[i][0])
113             x_virial[i][j] = 1 + val[i][4]*ps[j] + val[i][5]*(ps[j]**2) + val[i][6]*(ps[j]**3)
114
115     #llamadas funciones y representación
116     #Se puede llamar a cualquiera, todo está calculado y cargado previamente
117
118     #llamadas para T-boyle
119     bs = hallaBoyle(val[5][4], val[0][5], val[0][6], ps)
120     plt.plot(bs, x_virial[0], 'r*')
121     print('T-boyle para T = %f'%val[13][0])
122     plt.title('Curva de Boyle del gas Metano CH4')

```

```

111     #calcula x e y del ajuste
112     pvRT[i][j] = (ps[j]*v_cal)/(R*val[i][0])
113     x_virial[i][j] = 1 + val[i][4]*ps[j] + val[i][5]*(ps[j]**2) + val[i][6]*(ps[j]**3)
114
115     #llamadas funciones y representación
116     #Se puede llamar a cualquiera, todo está calculado y cargado previamente
117
118     #llamadas para T-boyle
119     bs = hallaBoyle(val[5][4], val[0][5], val[0][6], ps)
120     plt.plot(bs, x_virial[0], 'r*')
121     print('T-boyle para T = %f'%val[13][0])
122     plt.title('Curva de Boyle del gas Metano CH4')
123
124     #llamadas para isotermas
125     #plt.plot(ps, x_virial[7], 'b*', ps, x_virial[8], 'g-', ps, x_virial[9], 'ro', ps, x_virial[10], 'r')
126     #print('Temperaturas T = %f'%val[7][0], val[8][0], val[9][0], val[4][0], val[5][0], val[6][0])
127     plt.grid(True)
128     #plt.title('Isotermas del gas Metano CH4')
129     plt.legend()
130     plt.show()
131
132     a = numpy.asarray(val)
133     #escribo los resultados en un archivo csv
134     numpy.savetxt("salidaisotermas1.csv", a, delimiter=",")
135     b = numpy.asarray(x_virial)
136     c = numpy.asarray(pvRT)
137     #escribo los resultados en un archivo csv
138     numpy.savetxt("salidaisotermas2.csv", b, delimiter=",")
139     numpy.savetxt("salidaisotermas3.csv", c, delimiter=",")

```


5 Código fuente en texto del programa en lenguaje Python.

```
#!/usr/bin/python

# -*- coding: utf-8 -*-

from math import *
import matplotlib.pyplot as plt
import csv
import numpy

#declaración variable simbolica R
a= 2.272883669
b= 0.043100000

def calculaxBoyle(Bp,Cp,Dp,p):
    x = 0.0
    x = Bp+ Cp*2*p + Dp*3*(p**2)
    return x

def conviertePav(R, p , T, Bp,Cp,Dp):
    x = 0.0
    x = (1 + Bp*p + Cp*(p**2) + Dp*(p**3) )/(R*T*p)
    return x

def conv_float(f):
    n = 0.0
    try:
        n=float(f)
    except ValueError:
```

```
pass
```

```
return n
```

```
def hallaBoyle(Bp,Cp,Dp,pv):
```

```
    x = [0.0] * len(pv)
```

```
    for i in range (0,len(pv)):
```

```
        x[i] = calculaxBoyle( Bp, Cp, Dp, pv[i] )
```

```
    print('Para la presion P %5.7f. se obtiene un x de Boyle de %5.7f.'%(pv[i],x[i]))
```

```
    return x
```

```
n_f = 18
```

```
n_c = 18
```

```
#Valor de R en atml por litro
```

```
R = 0.082057
```

```
multiplicador_p = 10
```

```
ps= [0.5, 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4, 4.5, 5, 5.5, 6, 6.5, 7.0 , 7.5, 8.0, 8.5, 9.0, 9.5, 10.0, 10.5, 11,  
11.5, 12, 12.5, 13.0, 13.5, 14.0, 14.5, 15.0, 15.5, 16.0, 16.5, 17.0, 17.5, 18.0, 18.5, 19.0, 19.5,  
20.0]
```

```
vs = [0.0] * len(ps)
```

```
for i in range(len(ps)):
```

```
    ps[i]=ps[i]+(i+1)*multiplicador_p
```

```
try:
```

```
#descomentar una u otra linea segun se quieran leer diferentes temperaturas y coeficientes
del vilar cargas una sisoterma su otras

#with open('isotermasmetano2.csv', 'rU') as data:

#with open('isotermasgrandes.csv', 'rU') as data:

with open('isotermasbajisimas.csv', 'rU') as data:

reader = csv.reader(data,csv.QUOTE_NONNUMERIC)

datos = list(reader)

#longitud del array según la entrada por eficiencia

n_f = len(datos)

contador_f = 0

print('Num Fil leidas %d'%(len(datos)))

val = [0.0] * len(datos)

for x in datos:

print('Num col leidas %d'%(len(x)))


#resultados leidos por csv

val[contador_f] = [0.0] * len(x)

contador_c = 0

for y in x:

val[contador_f][contador_c] = conv_float(y)

#print ('\n\nFila = %s, col = %s, T = %5.3f, B prima = %5.7f., C = %5.7f.'%(contador_f,
contador_c,val[contador_f][0],val[contador_f][4], val[contador_f][3]))

contador_c+=1

contador_f+=1

print('\nValores leídos: ')

print(val)


except ValueError:

print 'Error leyendo'

finally:

data.close()
```

```
plt.figure()
ax = plt.subplot(111)

#resultados ejes y e x de ajuste de isotermas, dimensiones inicializadas
pvRT = [0.0] * n_f
x_virial = [0.0] * n_f

for i in range(n_f):
    pvRT[i] = [0.0] * len(ps)
    x_virial[i] = [0.0] * len(ps)
    ecboyle = [0.0] * len(ps)

#i número de y que se evalúan
#j numero presiones
for i in range (0, n_f):

    for j in range (0,len(ps)):

        #calculo los volumenenes correspondientes a las presiones
        v_cal = conviertePav( R, ps[j], val[i][0], val[i][4], val[i][5],val[i][6] )

        #calculo x e y del ajuste
        pvRT[i][j] = (ps[j]*v_cal)/(R*val[i][0])
        x_virial[i][j] = 1 + val[i][4]*ps[j] + val[i][5]*(ps[j]**2) + val[i][6]*(ps[j]**3)
```



```
plt.show()
```

Bibliografía

<http://webbook.nist.gov/> NIST. *Methane*. Secretary of Commerce on behalf of the United States of America: NIST, fecha de edición. [Consulta: 1/03/2016]. Disponible en: <http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C74828&Units=SI>