Considere la siguiente tabla de datos para el nitrógeno donde T es la temperatura y B es el segundo coeficiente virial. En estudio de gases, es el coeficiente más importante porque representa, en primer orden, la desviación respecto de la idealidad.

T (K)	100	200	300	400	500	600
B (cm^3/mol)	-160	-35	-4.2	9.0	16.9	21.3

Segundos Coeficientes viriales B(cm^3/mol) para el nitrógeno

Halle la temperatura para la cual B = 0. Utilice tres (3) puntos.

Ese valor de temperatura se denomina "Temperatura de Boyle". La temperatura de Boyle es la temperatura a la cual el segundo coeficiente del virial se hace nulo. Representa un punto en el que el gas se comporta de forma más ideal que en otras ocasiones.

Solución:

Los conjuntos de puntos que acotan el valor de B = 0, son:

Primer conjunto: (200 , -35) , (300 , -4.2) y (400 , 9.0)

Segundo conjunto: (300 , -4.2) , (400 , 9.0) y (500 , 16.9)

Como estamos haciendo interpolación inversa, debo revisar en el rango de valores de la variable **Y** (sí, la variable **Y**) para cada conjunto, cuál cubre un intervalo más corto.

Para el primer conjunto, el rango cubierto por los valores de Y va de -35 a 9.0, es decir 44.

Para el segundo conjunto, el rango cubierto por los valores de Y va de -4.2 a 16.9, es decir 21.1.

El valor aceptado de Temperatura (en Kelvin)
para el cual B = 0 es de 327.22,
aunque debo resaltar que eso solo servirá
como elemento de verificación en este ejemplo,
puesto que no siempre se tienen
esos valores "aceptados" o valores de referencia

De todas maneras y para ilustrar el asunto generaremos los polinomios de Newton para cada caso.

Primer conjunto: (200 , -35) , (300 , -4.2) y (400 , 9.0)

	T(K)	B	
Xo	200	-35,00	F(Xo)
X1	300	-4,20	F(X1)
X2	400	9,00	F(X2)
x		?????	F(X)

$f_2(x) = bo + b1\,(X - Xo) + b2\,(X - Xo)(X - X1)$

$f_2(x) = f[Xo] + f[X1, Xo]\,(X - Xo) + f[X2, X1, Xo]\,(X - Xo)(X - X1)$

$bo = F(Xo) = -35$

$b1 = \dfrac{F(X1) - F(Xo)}{X1 - Xo} = \dfrac{-4{,}2 - (-35)}{300 - 200} = \dfrac{30{,}8}{100} = 0{,}308000$

$b2 = \dfrac{\dfrac{F(X2) - F(X1)}{X2 - X1} - \dfrac{F(X1) - F(Xo)}{X1 - Xo}}{X2 - Xo} = \dfrac{\dfrac{9 - (-4{,}2)}{400 - 300} - \dfrac{-4{,}2 - (-35)}{300 - 200}}{400 - 200}$

$b2 = \dfrac{\dfrac{13{,}2}{100} - \dfrac{30{,}8}{100}}{400 - 200} = \dfrac{0{,}132000000000 - 0{,}308000000000}{400 - 200} = \dfrac{-0{,}176}{200} = -0{,}000880$

$f_2(x) = bo + b1\,(x - 200) + b2\,(x - 200)(x - 300)$

$f_2(x) = -35 + 0{,}308000\,(x - 200) + -0{,}000880\,(x - 200)(x - 300)$ POLINOMIO

El polinomio de Newton obtenido lo llevamos a un formato más familiar:

$f(x) = -35 + 0.308(x-200) - 0.00088(x-200)(x-300)$
$f(x) = -35 + 0.308(x-200) - 0.00088(x^2 - 300x - 200x + 60000)$
$f(x) = -35 + 0.308(x-200) - 0.00088(x^2 - 500x + 60000)$
$f(x) = -35 + 0.308(x-200) - 0.00088x^2 + 0.44x - 52.8$
$f(x) = -35 + 0.308x - 61.6 - 0.00088x^2 + 0.44x - 52.8$
$f(x) = - 0.00088x^2 + 0.44x + 0.308x - 35 - 61.6 - 52.8$

$f(x) = - 0.00088x^2 + 0.748x - 149.4$

Resolviendo, tendremos que una raíz vale **320.8257** y la otra vale **529.1742**.

Al revisar la tabla inicial se aprecia que el valor esperado de la variable T para el cual B=0 debe estar entre 300 y 400, de modo que se escoge el valor de **320.8257**.

Segundo conjunto: (300 , -4.2) , (400 , 9.0) y (500 , 16.9):

	T(K)	B	
Xo	300	-4,20	F(Xo)
X1	400	9,00	F(X1)
X2	500	16,90	F(X2)
X		?????	F(X)

$$f_2(x) = b_0 + b_1(X - X_o) + b_2(X - X_o)(X - X_1)$$

$$f_2(x) = f[X_o] + f[X_1, X_o](X - X_o) + f[X_2, X_1, X_o](X - X_o)(X - X_1)$$

$$b_0 = F(X_o) = -4,2$$

$$b_1 = \frac{F(X_1) - F(X_o)}{X_1 - X_o} = \frac{9 - (-4,2)}{400 - 300} = \frac{13,2}{100} = 0,132000$$

$$b_2 = \frac{\frac{F(X_2) - F(X_1)}{X_2 - X_1} - \frac{F(X_1) - F(X_o)}{X_1 - X_o}}{X_2 - X_o} = \frac{\frac{16,9 - 9}{500 - 400} - \frac{9 - (-4,2)}{400 - 300}}{500 - 300}$$

$$b_2 = \frac{\frac{7,9}{100} - \frac{13,2}{100}}{500 - 300} = \frac{0,079000000000 - 0,132000000000}{500 - 300} = \frac{-0,053}{200} = -0,000265$$

$$f_2(x) = b_0 + b_1(x - 300) + b_2(x - 300)(x - 400)$$

$$f_2(x) = -4,2 + 0,132000(x - 300) + -0,000265(x - 300)(x - 400) \quad \text{POLINOMIO}$$

El polinomio de Newton obtenido lo llevamos a un formato más familiar:

$f(x) = -4.2 + 0.132(x-300) - 0.000265(x-300)(x-400)$
$f(x) = -4.2 + 0.132(x-300) - 0.000265 (x^2 - 400x - 300x + 120000)$
$f(x) = -4.2 + 0.132(x-300) - 0.000265 (x^2 - 700x + 120000)$
$f(x) = -4.2 + 0.132(x-300) - 0.000265x^2 + 0.1855x - 31.8$
$f(x) = -4.2 + 0.132x - 39.6 - 0.000265x^2 + 0.1855x - 31.8$
$f(x) = - 0.000265x^2 + 0.132x + 0.1855x - 4.2 - 39.6 - 31.8$
$\mathbf{f(x) = - 0.000265x^2 + 0.3175x - 75.6}$

Resolviendo, tendremos que una raíz vale **327.7895** y la otra vale **870.3236**.

Al revisar la tabla inicial se aprecia que el valor esperado de la variable T
para el cual B=0 debe estar entre 300 y 400,
de modo que se escoge el valor de **327.7895**.

Este último valor confirma que se debe escoger
el conjunto de puntos
cuyo rango de valores de la variable **"Y"** **sea más corto**.

------------------------- ***FIN DEL DOCUMENTO***