

ANÁLISIS Y DISEÑO DE SISTEMAS TÉRMICOS CON EES

Miguel Angel Lozano Serrano
Departamento de Ingeniería Mecánica
Universidad de Zaragoza
C/ María de Luna, 3. 50015-Zaragoza

RESUMEN

La aparición de programas para la resolución de sistemas ecuaciones no lineales, potentes y de fácil uso en ordenadores personales, facilita una orientación de la docencia en ingeniería hacia los aspectos prácticos (análisis, diseño y operación) de los sistemas estudiados. El programa EES incorpora además de las funciones matemáticas convencionales otras de cálculo de propiedades termofísicas, por lo cual resulta muy apropiado en disciplinas propias de la ingeniería térmica. Aquí se presentan algunas de sus características más relevantes, ilustrándose su aplicación a tres casos distintos: i) análisis de las prestaciones de ciclos de refrigeración por compresión de vapor, ii) diseño del aislamiento térmico de un horno y iii) cálculo de la composición de equilibrio químico en fase gas. Prácticamente en dos horas pueden aprenderse los procedimientos básicos de utilización de este programa, por lo que cabe recomendarlo como una herramienta adecuada para la resolución por los alumnos de problemas de diseño y de final abierto.

INTRODUCCIÓN

Es evidente la creciente demanda tanto académica como industrial de reorientar los planes de estudio de ingeniería poniendo mayor énfasis en los aspectos prácticos: operación, diseño y optimización de los equipos y sistemas estudiados. La incorporación de problemas de diseño y de final abierto a los textos que desarrollan disciplinas básicas (Moran y Shapiro 1993, Bejan 1993) y la aparición de otros textos (Stoecker 1989, Hodge 1990) enfocados directamente al análisis y diseño de sistemas térmicos tratan de responder a dicha demanda. El objetivo es proporcionar a los estudiantes la oportunidad de desarrollar su creatividad y criterio técnico, considerar las necesidades de un proyecto dado, buscar alternativas y aplicar restricciones realistas. Si además se fomenta la presentación de resultados mediante informes razonados, tablas y gráficos se mejorará también su capacidad de comunicación.

El análisis y diseño de sistemas energéticos requiere conceptos de termodinámica, mecánica de fluidos y transferencia de calor, así como conocimientos de economía industrial y cálculo numérico. La ausencia de problemas de diseño y de final abierto en la práctica docente convencional cabe atribuirlos a dos motivos. En primer lugar, las relaciones fundamentales que describen los equipos y procesos energéticos conducen casi siempre, salvo idealizaciones excesivas, a sistemas de ecuaciones simultáneas no lineales. Además, dichas ecuaciones envuelven implícitamente propiedades termodinámicas y de transporte de los flujos materiales, lo que incorpora una dificultad adicional. El segundo motivo es la insuficiente ligazón de objetivos y contenidos de las disciplinas mencionadas, ha sido analizado en distintos foros (véanse, por ejemplo, las publicaciones de ASME relativas a educación en termodinámica y sistemas energéticos) y no será objeto de esta comunicación.

Con respecto al primero cabe decir que afortunadamente en los últimos años se han desarrollado programas de resolución de sistemas de ecuaciones (TK Solver, MATHCAD, etc.), fáciles de usar en ordenadores personales y que nos permiten salvar las dificultades del cálculo y centrarnos en los aspectos conceptuales del problema. En el ámbito de la ingeniería térmica destaca el programa EES, desarrollado por Klein y Alvarado (1989) en la Universidad de Wisconsin, pues incorpora

además de las funciones matemáticas convencionales otras de cálculo de propiedades termofísicas, por lo cual se ajusta perfectamente a las necesidades del análisis y diseño de sistemas energéticos. En este artículo se realiza una descripción muy general de este programa y se muestra su aplicación en la resolución de tres casos prácticos.

EL PROGRAMA EES

El nombre EES es el acrónimo de “Engineering Equation Solver”. La función básica de este programa es la resolución de sistemas de hasta 500 ecuaciones no lineales. El programa ha sido diseñado para IBM PC y APPLE MACINTOSH. La mayor diferencia entre EES y otros programas de orientación similar es la gran cantidad de funciones para el cálculo de propiedades termofísicas que incorpora.

Como explican los autores (Klein y Alvarado 1989) la motivación para el desarrollo de este programa surgió de su experiencia docente en termodinámica y transferencia de calor. La mayor parte del tiempo y esfuerzo en la resolución de problemas de estas asignaturas se destina a la búsqueda de propiedades termofísicas y de la secuencia de cálculo de las ecuaciones del modelo matemático. Una vez el alumno ha practicado suficientemente estos temas en problemas convenientemente simplificados (los típicos de los textos convencionales) deberían abordarse problemas prácticos más interesantes, pero más complejos pues a menudo conllevan dificultades insalvables de tiempo y un esfuerzo poco gratificante cuando su resolución se plantea con los métodos al uso en pizarras y exámenes. El programa EES permite al usuario concentrarse en los aspectos esenciales del problema de diseño o análisis liberándolo de tareas rutinarias y por tanto desincentivadoras (una vez dominadas).

Las ecuaciones que constituyen el modelo del sistema estudiado se escriben directamente sobre la hoja de trabajo con reglas similares a las del lenguaje FORTRAN pero sin limitaciones en cuanto al orden de aparición de las ecuaciones o a la localización en éstas del signo de igualdad. El usuario puede escribir, modificar y borrar sobre dicha hoja con la facilidad típica de los editores de texto. El programa incorpora un “debugger” interno, entre otras muchas opciones del menú, para localizar errores de sintaxis, tipos de variables, defecto o exceso de ecuaciones, etc. También incorpora facilidades para la construcción de tablas de datos y de cálculo así como para la representación gráfica de variables. Además, permite resolver de forma numérica problemas simples que incorporan ecuaciones diferenciales y problemas de optimización unidimensional y multidimensional. Estos no se ilustrarán aquí.

La Fig. 1 muestra la ventana de información de funciones en la que el usuario puede seleccionar aquella que necesita. Las funciones disponibles para el cálculo de propiedades termofísicas se muestran en la Tabla 1. Las sustancias disponibles para el cálculo de propiedades son: Aire, Aire-H₂O*, NH₃, He, H₂, O₂, N₂, CO, CO₂, SO₂, CH₄, C₂H₆, C₃H₈, n-C₄H₁₀, R11, R12, R13, R14, R22, R114, R123, R134a, R500 y R502. Para algunas se disponen dos modelos de comportamiento. Las ecuaciones de estado empleadas para el cálculo del comportamiento real líquido-vapor satisfacen los requerimientos de precisión habituales del cálculo industrial, siendo en muchos casos las recomendadas por ASME, ASHRAE y otras asociaciones profesionales de ingenieros. El programa EES permite trabajar con distintos sistemas de unidades.

La lista de problemas que pueden resolverse con EES en el ámbito de la ingeniería térmica es virtualmente ilimitada. En una evaluación de “software” para la enseñanza en dicho ámbito (Greinke and Moran 1992) se ha señalado este programa como el más flexible y potente de su clase. Prácticamente en dos horas pueden aprenderse los procedimientos básicos de utilización. Esto confirma su facilidad de uso.

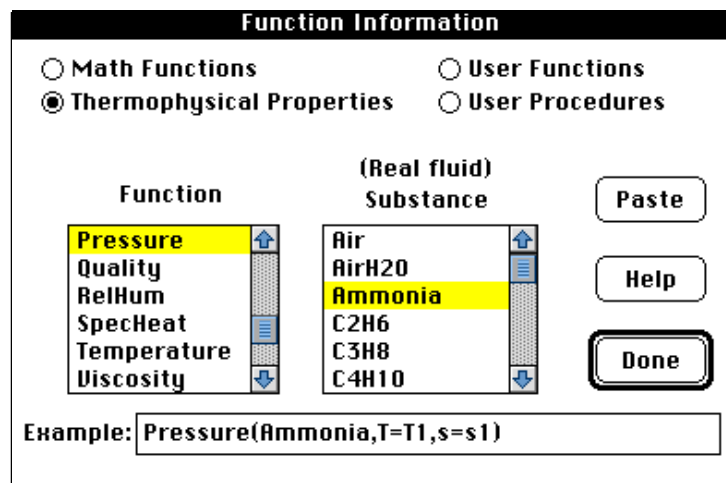


Figura 1: Consulta y selección de funciones termofísicas

Tabla 1: Propiedades termofísicas disponibles

Presión (Pressure)	Calor específico a presión constante (SpecHeat)
Volumen (Volume)	Conductividad térmica (Conductivity)
Temperatura (Temperature)	Viscosidad dinámica (Viscosity)
Título (Quality)	Humedad específica* (HumRat)
Energía interna (IntEnergy)	Humedad relativa* (RelHum)
Entalpía (Enthalpy)	Temperatura de rocío* (DewPoint)
Entropía (Entropy)	Temperatura de bulbo húmedo* (WetBulb)

CASO 1. CICLOS FRIGORÍFICOS

En la Fig. 2 se presentan los esquemas de dos ciclos frigoríficos por compresión de vapor y su representación en el diagrama $\ln P$ - h . El objetivo del siguiente caso es comparar las prestaciones de ambos ciclos y comprobar los efectos sobre el rendimiento del refrigerante seleccionado. En todos los cálculos se supondrá que la temperatura ambiente es de 20°C , que no hay pérdidas de carga en los conductos y que el refrigerante a la salida del condensador y evaporador se encuentra como líquido saturado y vapor saturado, respectivamente. Así mismo, para garantizar una velocidad de transferencia de calor suficiente se impone que la diferencia mínima de temperatura entre el refrigerante y los focos sea de 5°C para el evaporador y 10°C para el condensador. El rendimiento isentrópico de los compresores se expresa en función de la relación de presiones según la siguiente correlación

$$\eta_s = 0,815 - 0,02 P_{\text{sal}} / P_{\text{ent}}$$

En el caso del ciclo de compresión por etapas la presión intermedia se iguala a la media geométrica de las presiones en el condensador y evaporador. La eficiencia termodinámica se mide en todos los casos como el cociente entre el coeficiente de operación real y el correspondiente a un ciclo de Carnot que trabajará entre los mismos focos (sin irreversibilidades internas ni externas).

La hoja de trabajo en EES correspondiente al ciclo simple se presenta en la Fig. 3. El coeficiente de operación para una temperatura del foco frío de -20°C y distintos refrigerantes en el ciclo puede conseguirse usando la misma hoja de cálculo sin más que reemplazar sistemáticamente el argumento R12 por el correspondiente al nuevo refrigerante en las funciones termofísicas. Como conclusión puede decirse que existen distintos refrigerantes [NH_3 (COP = 2,35), C_3H_8 (COP = 2,41), R22 (COP = 2,45), R134a (COP = 2,32)] candidatos para sustituir al R12 (COP = 2,46).

En la Fig. 4 se muestran las gráficas obtenidas con el programa EES relacionando varios parámetros importantes con la temperatura del recinto a refrigerar para los dos esquemas considerados. El ciclo simple mantiene prestaciones razonables solo para temperaturas de refrigeración altas. La mayor eficiencia del ciclo de compresión por etapas compensará sus costes de inversión más elevados sobre todo para temperaturas de refrigeración reducidas. Un análisis más detallado y en el que se comparan hasta 8 esquemas diferentes ha sido realizado por Mastrullo y Mazzei (1987).

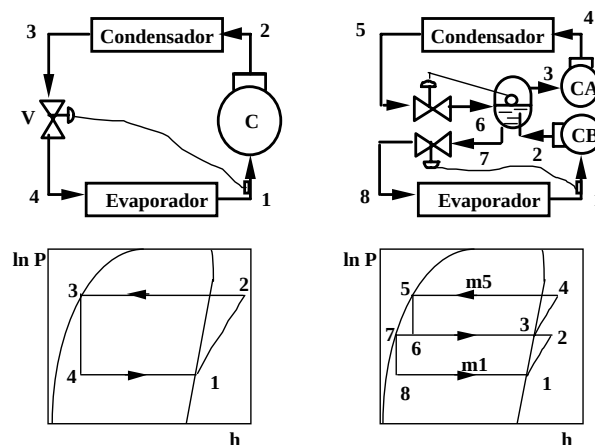


Figura 2: Esquema y diagrama ln P-h de los ciclos de refrigeración (Caso 1)

```
{CICLO DE REFRIGERACION-ESQUEMA 1}
{RENDIMIENTO ISOENTROPICO}
FUNCTION riso(RP)
riso=0.815-0.020*RP
END riso

{DATOS CORRESPONDIENTES AL CICLO}
t0=20 {temperatura ambiente, en C}
tf=-20 {temperatura del recinto a refrigerar, en C}
ytc=10 {dif. min. de temp. en el condensador, en C}
yte=5 {dif. min. de temp. en el evaporador, en C}
qe=1 {efecto frigorifico, en kW}

{CALCULO DE LOS ESTADOS TERMODINAMICOS}
t1=tf-yte; x1=1 {vapor saturado}
p1=pressure(R12,T=t1,X=x1)
v1=volume(R12,T=t1,X=x1)
h1=enthalpy(R12,T=t1,X=x1)
s1=entropy(R12,T=t1,X=x1)

t3=t0+ytc; x3=0 {liquido saturado}
p3=pressure(R12,T=t3,X=x3)
h3=enthalpy(R12,T=t3,X=x3)

rp=p3/p1; risoc=riso(rp)
p2=p3; h2-h1=(enthalpy(R12,P=p2,S=s1)-h1)/risoc
t2=temperature(R12,H=h2,P=p2)

h4=h3; p4=p1
x4=quality(R12,H=h4,P=p4)

{CALCULO DE LAS PRESTACIONES DEL CICLO}
qe=m*(h1-h4); qc=m*(h2-h3); wt=m*(h2-h1)
cop=qe/wt; copcarnot=(tf+273.15)/(t0-tf);
eficiencia=cop/copcarnot
```

Figura 3: Hoja de trabajo para el ciclo simple de refrigeración del Caso 1

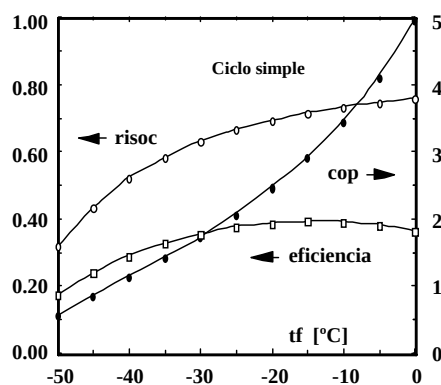


Figura 4a: Prestaciones del ciclo simple en función de t_f (Refrigerante 12)

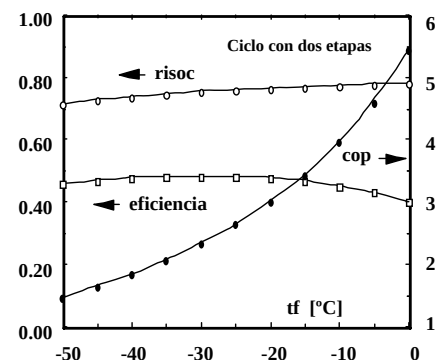


Figura 4b: Prestaciones del ciclo de compresión por etapas en función de t_f (Refrigerante 12)

CASO 2. AISLAMIENTO TÉRMICO

En el campo de la ingeniería de los revestimientos refractarios, resulta necesario calcular el flujo de calor perdido y las temperaturas interfaciales que se alcanzan. Este cálculo permite estudiar la economía que supone una determinada política de aislamiento y comprobar si los materiales seleccionados operan dentro de los límites admisibles de temperatura. En la Fig. 5 se muestra la sección de pared de un horno que consta de tres capas de calidades diferentes. Los datos y planteamiento del problema que aquí se resuelve han sido obtenidos de Alarco (1991). Para facilitar la resolución del problema se considera que la diferencia de temperatura entre los gases calientes y la pared interior es despreciable. El procedimiento de cálculo se basa en que el flujo de calor es el mismo a través de las diferentes capas y, a su vez, igual al calor evacuado al aire exterior desde la coraza de chapa. Pese a su importancia, no se consideran los efectos de la velocidad del viento ni de la eventual insolación de la coraza. En la hoja de trabajo (Fig. 6) se dan los datos necesarios para calcular la transferencia de calor y los costes económicos de la operación. En la Fig. 7 se muestran los resultados para dos revestimientos diferentes. Comparando ambos, para 6.000 horas anuales de operación, vemos que el coste adicional del segundo revestimiento se amortiza en 1,7 años.

CASO 3. EQUILIBRIO QUÍMICO

Ahora resolveremos el ejemplo 15.13 del texto de Smith y Van Ness (1989): “Calcule la composición de equilibrio a 1000 K y 1 bar para un sistema en fase gaseosa que contiene CH_4 , H_2O , CO , CO_2 y H_2 . En el estado inicial, sin reaccionar, están presentes 2 moles de CH_4 y 3 moles de H_2O ”.

De acuerdo con el criterio termodinámico de equilibrio, a P y T constantes, el sistema alcanzará un estado final en el que su energía libre de Gibbs, G, será mínima. Así pues, el problema consiste en encontrar el conjunto de los n_i que minimicen G para los valores de P y T especificados satisfaciendo a la vez las restricciones estequiométricas impuestas por los balances elementales de materia. Suponiendo comportamiento de mezcla de gases ideales para el sistema, la función de Gibbs puede escribirse como

$$G = \sum_i n_i g_i(T, y_i \cdot P)$$

donde $y_i = n_i / \sum n_i$ es la fracción molar y g_i la función de Gibbs molar parcial del componente i. Los balances elementales de materia son

$$\boxed{\text{C}} \quad n_{\text{CH}_4} + n_{\text{CO}} + n_{\text{CO}_2} - 2 = 0 \quad (1)$$

$$\boxed{\text{H}} \quad 4 n_{\text{CH}_4} + 2 n_{\text{H}_2\text{O}} + 2 n_{\text{H}_2} - 14 = 0 \quad (2)$$

$$\boxed{\text{O}} \quad n_{\text{H}_2\text{O}} + n_{\text{CO}} + 2 n_{\text{CO}_2} - 3 = 0 \quad (3)$$

donde los átomos presentes de cada elemento se obtienen del estado inicial.

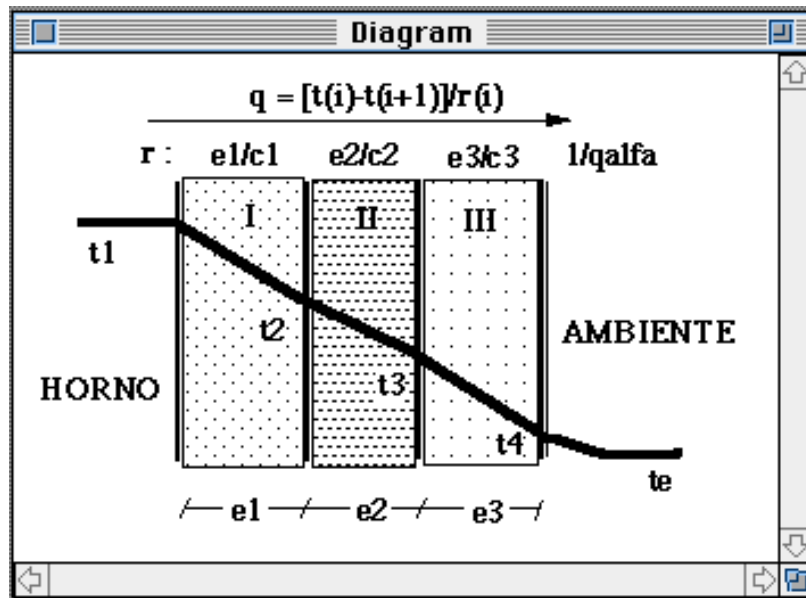


Figura 5: Aislamiento térmico multicapa de un horno (Caso 2)

```
{AISLAMIENTO TERMICO DE UN HORNO}
FUNCTION cter(ti,te,ct1,ct2)
{conductividad termica del aislante en kcal/h*m2*C/m
coeficientes propios del aislante: ct1 y ct2
temperaturas superficiales: ti y te en C }
cter=ct1+ct2*(ti+te)/2
END cter

FUNCTION qalfa(ti,tf)
{coeficiente de transferencia de calor al ambiente en kcal/h*m2*C
ti temperatura de la chapa en C
tf temperatura del medio ambiente en C}
qalfa=(0.000265*tf+0.0504)*ti+0.0087*tf+5.17
END qalfa

{DATOS DEL PROBLEMA}
t1=1300 {temperatura interna del horno en C}
te=15 {temperatura del medio ambiente en C}
cq=1.89e-3 {precio del combustible en pts/kcal}
rt=0.6 {rendimiento termico del horno en tpu}
{conductividad termica de las capas}
ct11=0.917; ct21=0.000287
ct12=0.229; ct22=0.000287
ct13=0.0225; ct23=0.000165
{precio de las capas en pts/m3}
c1=120000; c2=140000; c3=200000

{AISLAMIENTO EMPLEADO}
e1=0.25; e2=0.125; e3=0.125 {Caso 1}
{e1=0.20; e2=0.125; e3=0.175} {Caso 2}

{MODELO FISICO}
q=cter(t1,t2,ct11,ct21)*(t1-t2)/e1
q=cter(t2,t3,ct12,ct22)*(t2-t3)/e2
q=cter(t3,t4,ct13,ct23)*(t3-t4)/e3
q=qalfa(t4,te)*(t4-te)

{COSTES ECONOMICOS}
{inversion en pts/m2 de superficie aislada}
inv=c1*e1+c2*e2+c3*e3
{coste perdidas combustible en pts/h*m2}
ccom=q*cq/rt
```

Figura 6: Hoja de trabajo (Caso 2)

Solution	
ccom = 2.426	[pts/h*m2]
e1 = 0.250	[m]
e2 = 0.125	[m]
e3 = 0.125	[m]
inv = 72500	[pts/m2]
q = 770.2	[kcal/h*m2]
t1 = 1300.0	[°C]
t2 = 1148.2	[°C]
t3 = 967.4	[°C]
t4 = 90.4	[°C]
te = 15.0	[°C]

Solution	
ccom = 2.030	[pts/h*m2]
e1 = 0.200	[m]
e2 = 0.125	[m]
e3 = 0.175	[m]
inv = 76500	[pts/m2]
q = 644.6	[kcal/h*m2]
t1 = 1300.0	[°C]
t2 = 1198.9	[°C]
t3 = 1053.0	[°C]
t4 = 81.3	[°C]
te = 15.0	[°C]

Figura 7: Resultados para dos opciones de aislamiento térmico

Una forma estándar de resolver este tipo de problemas se basa en el método de los multiplicadores indeterminados de Lagrange. Formulando la función lagrangiana

$$L = \sum n_i g_i + \lambda_C (n_{CH_4} + n_{CO} + n_{CO_2} - 2) \\ + \lambda_H (4 n_{CH_4} + 2 n_{H_2O} + 2 n_{H_2} - 14) \\ + \lambda_O (n_{H_2O} + n_{CO} + 2 n_{CO_2} - 3)$$

y derivando con respecto a los n_i , resulta:

$$dL/d n_{CH_4} = g_{CH_4} + \lambda_C + 4 \lambda_H = 0 \quad (4)$$

$$dL/dn_{H_2O} = g_{H_2O} + 2 \lambda_H + \lambda_O = 0 \quad (5)$$

$$dL/d n_{CO} = g_{CO} + \lambda_C + \lambda_O = 0 \quad (6)$$

$$dL/d n_{CO_2} = g_{CO_2} + \lambda_C + 2 \lambda_O = 0 \quad (7)$$

$$dL/dn_{H_2} = g_{H_2} + 2 \lambda_H = 0 \quad (8)$$

La resolución simultánea de las Ecs. 1 a 8 nos permitirá calcular los 5 valores correspondientes a los n_i en el estado de equilibrio ($n_{CH_4} = 0,176$; $n_{H_2O} = 0,854$; $n_{CO} = 1,503$; $n_{CO_2} = 0,321$ y $n_{H_2} = 5,795$) y los 3 valores de los multiplicadores de Lagrange ($\lambda_C = 18893$, $\lambda_H = 74429$ y $\lambda_O = 318840$) en dicho estado.

```
{EQUILIBRIO QUIMICO: C/H/O - CH4,H2O,CO,CO2,H2}
teq=1000; peq=1
{CONDICIONES ESTEQUIOMETRICAS INICIALES}
nCH4_0=2; nH2O_0=3; nCO_0=0; nCO2_0=0; nH2_0=0
nC=nCH4_0+nCO_0+nCO2_0
nH=4*nCH4_0+2*nH2O_0+2*nH2_0
nO=nH2O_0+nCO_0+2*nCO2_0
{CONDICIONES ESTEQUIOMETRICAS AL EQUILIBRIO}
nC=nCH4+nCO+nCO2
nH=4*nCH4+2*nH2O+2*nH2
nO=nH2O+nCO+2*nCO2
nt=nCH4+nH2O+nCO+nCO2+nH2
yCH4=nCH4/nt; yH2O=nH2O/nt; yCO=nCO/nt; yCO2=nCO2/nt; yH2=nH2/nt
{POTENCIALES QUIMICOS}
gCH4=enthalpy(CH4,T=teq)-teq*entropy(CH4,T=teq,P=peq*yCH4)
gH2O=enthalpy(H2O,T=teq)-teq*entropy(H2O,T=teq,P=peq*yH2O)
gCO=enthalpy(CO,T=teq)-teq*entropy(CO,T=teq,P=peq*yCO)
gCO2=enthalpy(CO2,T=teq)-teq*entropy(CO2,T=teq,P=peq*yCO2)
gH2=enthalpy(H2,T=teq)-teq*entropy(H2,T=teq,P=peq*yH2)
{CONDICION DE EQUILIBRIO. MULTIPLICADORES DE LAGRANGE}
gCH4+lc+4*lh=0
gH2O+2*lh+lo=0
gCO+lc+lo=0
gCO2+lc+2*lo=0
gH2+2*lh=0
{FUNCION DE GIBBS}
G=nCH4*gCH4+nH2O*gH2O+nCO*gCO+nCO2*gCO2+nH2*gH2
```

Figura 8: Hoja de trabajo (Caso 3)

En la Fig. 8 se muestra la hoja de trabajo correspondiente al ejemplo planteado. Obsérvese el uso de las funciones termodinámicas para gases ideales implementadas en el EES. Otras experiencias de cálculo de equilibrio químico con EES para problemas de mayor complejidad han sido presentadas por Myers (1992).

CONCLUSIÓN

La introducción de los ordenadores personales y el desarrollo de programas de resolución de sistemas de ecuaciones suficientemente versátiles y potentes nos permite desarrollar una docencia en ingeniería más orientada hacia la práctica. La razón es que estas herramientas posibilitan la separación de los aspectos conceptuales de un problema de aquellos otros meramente computacionales que resultan simplificados. Así, ahora podemos concentrar la atención y el esfuerzo de los alumnos en el planteamiento correcto y el análisis ponderado de problemas relativos al diseño, operación y optimización de los procesos y sistemas estudiados. Como se ha mostrado aquí, a través de tres casos relativamente simples, el uso del programa EES es sencillo pero rico en sus aplicaciones potenciales en el ámbito de la ingeniería térmica, pudiendo contribuir a una docencia más integrada y fecunda de las asignaturas en que se desglosan sus contenidos teóricos y tecnológicos (Klein, 1991).

REFERENCIAS

- Alarco, R. 1991. "Cálculo térmico de paredes de refractario mediante programa en BASIC". Ingeniería Química, Abril 1991, pp. 277–279.
- ASME 1990. Education in Thermodynamics and Energy Systems. ASME, New York.
- ASME 1991. Thermodynamics and Energy Systems – Fundamentals, Education and Computer Aided Analysis. ASME, New York.
- ASME 1992. Thermodynamics and the Design, Analysis and Improvement of Energy Systems. ASME, New York.
- Bejan, A. 1993. Heat Transfer. Wiley, New York.
- Greinke, L.K. and Moran, M.J. 1992. "Software for Teaching Thermodynamics". Presentado a la sesión de "Teaching Thermodynamics" del Congreso ECOS'92.
- Hodge, B.K. 1990. Analysis and Design of Energy Systems. Prentice–Hall, London.
- Klein, S.A. 1991. "Changes in the Thermal Sciences Curriculum Made Possible by Equation Solving Tools". ASME 1992.
- Klein, S.A. and Alvarado, F.L. 1989–1994. "EES: Engineering Equation Solver". F–Chart Software, 4406 Fox Bluff Road, Middleton, WI 53562, USA.
- Mastrullo, R. and Mazzei, P. 1987. "Exergetic Analysis of Compound Mechanical Refrigeration Systems". Heat Recovery Systems & CHP, Vol. 7, pp. 401–412.
- Moran, M.J. and Shapiro, H.N. 1993. Fundamentos de termodinámica técnica. Reverté, Barcelona.
- Myers, G.F. 1992. "Equilibrium via Element Potentials and Computer". ASME 1992.
- Smith, J.M. and Van Ness, H.C. 1989. Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química. McGraw–Hill, México.
- Stoecker, W.F. 1989. Design of Thermal Systems. McGraw–Hill, New York.