

Development of a software for solving problems applied to thermodynamics.

Katiuska Franceschi*, Luis Lugo, Gabriel Páez, Donato Magarelli

Escuela de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de Carabobo, Valencia, Venezuela.

Abstract.-

This work aims to develop a software for solving various thermodynamic cases (*ThermoQuest-UC*), generating a valuable tool for the calculation and analysis of the thermodynamic processes focusing behavior based on the basic principles. It was used as the integrated development environment (IDE) NetBeans 8.0 for Java programming language libraries containing calculation routines and the generation of the graphical interface. It was designed to work with applications of the first and second law of thermodynamics in closed systems as a rigid tank and cylinder-piston; and open systems in steady state, being available equipment: compressor, turbine, pump, nozzle, boiler, heat exchanger and expansion valve, as well as resolution of 4 thermodynamic cycles: Brayton, Rankine, vapor compression refrigeration and Linde-Hampson cycle. Counting with a database containing properties of 14 fluids. Which it was validated by comparing the results with respect to both cases presented bibliographic material, specifically the accepted literature and grade papers, obtaining percentages of deviation lower than 5 %.

Keywords: simulator; software; thermodynamics; thermodynamic cycles.

Desarrollo de un software para la simulación de procesos aplicados a la termodinámica.

Resumen.-

El presente trabajo tiene como objetivo desarrollar un software destinado a la resolución de casos termodinámicos (*ThermoQuest-UC*), generando una valiosa herramienta para el cálculo y análisis de procesos enfocándose al comportamiento termodinámico basado en los principios básicos. Se utilizó como entorno de desarrollo integrado (IDE) Netbeans 8.0, para la programación en lenguaje Java de las librerías que contienen las rutinas de cálculo, al igual que la generación de la interfaz gráfica. Siendo diseñado para trabajar aplicaciones de la primera y segunda ley de la termodinámica, en sistemas cerrados como: un tanque rígido y cilindro-pistón; y sistemas abiertos en estado estacionario, encontrándose disponibles los equipos: compresor, turbina, bomba, tobera, caldera, intercambiador de calor y válvula de expansión, así como la resolución de 4 ciclos termodinámicos: Brayton, Rankine, refrigeración por compresión de vapor y el ciclo de Linde-Hampson. Contando para ellos con una base de datos que contiene las propiedades de 14 fluidos. El cual fue validado mediante la comparación de los resultados respecto a casos presentados tanto en material bibliográfico, específicamente de la literatura aceptada, como en trabajos de grado, obteniéndose porcentajes de desviación menores al 5 %.

Palabras clave: simulador; software; termodinámica; ciclos termodinámicos.

Recibido: Noviembre 2015

Aceptado: Julio 2016

* Autor para correspondencia

Correo-e: kattyfg24@gmail.com (Katiuska Franceschi)

1. Introducción

El presente trabajo de investigación tiene como finalidad desarrollar un software para la resolución de distintos casos termodinámicos (*ThermoQuest-UC*). El software es de gran utilidad específica-

mente en la cátedra de termodinámica ya que permite a los estudiantes interactuar con el mismo, plantear diferentes casos y apreciar los resultados ante los datos entregados por el usuario, de esta manera estaría disponible cada semestre a un grupo de aproximadamente de 120 estudiantes siendo una herramienta para la comprensión de la materia. De esta manera se podrá realizar a futuro versiones mejoradas del programa basándose en las observaciones al ser aplicado en los cursos. Para *ThermoQuest-UC* se aprovecha la tecnología computacional disponible actualmente y las características que presenta Java, como lenguaje de programación.

El software basado en un lenguaje de programación libre, según la Fundación de Software Libre (Free Software Foundation), es aquel que respeta la libertad de los usuarios y la comunidad. Es decir, el usuario tiene la libertad para ejecutar, copiar, distribuir, estudiar, modificar y mejorar el software sin que exista obligación alguna de comunicarlo al programador ni a ninguna otra entidad específica.

La ingeniería química, por su parte, requiere de cálculos analíticos que debido a su naturaleza, conllevan a una inversión de tiempo considerable. Por lo que es recurrente el uso de simuladores, los cuales son programas que representan una réplica de los fenómenos de la realidad mediante un entorno interactivo donde el usuario puede modificar los parámetros y ver cómo reacciona el sistema ante el cambio inducido en una cantidad de tiempo reducida y sin necesidad de experimentos.

Es por ello que el software desarrollado *ThermoQuest-UC*, se concibe como una herramienta computacional que contribuye al proceso de formación del usuario, donde éste, pueda obtener resultados en un tiempo mínimo; para evaluaciones preliminares de equipos y procesos en el ámbito profesional y que puede ser utilizado como base en la creación de otros softwares o como extensión para aplicaciones termodinámicas más complejas por parte de la Unidad de Investigación de Ingeniería de Procesos (UIIP) de la facultad de ingeniería de la Universidad de Carabobo y de esta manera sustituir el uso de simuladores comerciales en tareas específicas que obtener sus licencias

representan un gran costo para la universidad.

2. Desarrollo de la investigación

2.1. Metodología para el desarrollo de los algoritmos que permitan la resolución de los casos termodinámicos

Con el fin de lograr el desarrollo de los algoritmos, se seleccionó el lenguaje de programación. Se realizó una revisión bibliográfica, para identificar los posibles softwares destinados para este fin. Debido a que lo deseado fue la realización de un software de lenguaje libre, se consideraron entre las posibilidades, lenguajes como: C, C++, Python y Java. Luego de conocer los distintos tipos de lenguaje, para la selección de uno de ellos se llevó a cabo la realización de una matriz de valoración por puntos donde se presentan los aspectos a evaluar, los cuales tiene una ponderación y se le asigna un valor a cada uno de las opciones del lenguaje dependiendo de su cumplimiento para tal característica.

Una vez que se ha definido el lenguaje de programación en el que se desarrollan los algoritmos, se realiza una búsqueda de un entorno para el desarrollo de la interfaz que sea compatible con el lenguaje seleccionado y a su vez sea un ambiente amigable para el programador.

Para la elaboración de los algoritmos se realizó una esquematización de la estructura del programa como técnica de análisis para conocer la relevancia de los elementos constitutivos y las relaciones que se presentan entre ellos. Definiendo de esta manera los paquetes principales con los que cuenta el programa, los elementos que los constituyen y su relación entre ellos.

Se realizó una revisión bibliográfica donde se presentara una variedad de casos, haciendo énfasis en aplicaciones de la primera y segunda ley de la termodinámica. Al igual que mediante una revisión de trabajos de investigación que contaran con los datos necesarios para la definición de los estados termodinámicos para su simulación mediante el software.

Se definieron diversidad de variables que puede intervenir en las distintas clases y objetos, depen-

diendo del comando o la acción que se desea llevar a cabo. Entre las cuales se pueden encontrar:

- Variables numéricas: int, double.
- Variables de texto: string.
- Variables lógicas o Booleanas: true, false, and, or, equals.
- Objetos de librerías creados por el autor.

2.2. *Diseño de la interfaz gráfica que facilite la comunicación entre el usuario y el módulo de cálculo*

Se realizó una esquematización de la interfaz gráfica con el fin de lograr una buena distribución de los elementos que la conforman para la obtención de un buen desempeño funcional como un aspecto agradable para el usuario desde el punto de vista estético. Posteriormente se selecciona el entorno de desarrollo de la interfaz compatible con el lenguaje seleccionado.

Debido a que la interfaz gráfica de usuario debe contar con una serie de elementos para la correcta comunicación con el usuario, se tienen tipos de variables capaces de lograrlo. Entre ellas se pueden nombrar:

- Contenedores.
- Componentes gráficos.
- Objetos de librerías adicionales.
- Objetos de librerías creados por el autor

Debido a los diferentes tipos de métodos que posee el software, se buscó elaborar un menú de selección que presentara las opciones principales con las que cuenta el usuario para la realización de una actividad en específico, dependiendo del caso que desee evaluar mediante la implementación del software.

Mediante las diferentes herramientas para el desarrollo del entorno gráfico se establecieron espacios contenedores encargados de mostrar cada uno de los elementos de la interfaz con los que interactúa el usuario.

2.3. *Validación de las operaciones ejecutadas con el módulo de cálculo*

La validación del software y su capacidad de cálculo aplicado a distintos casos termodinámicos, se evaluó mediante la verificación del despliegue en pantalla de los elementos, el adecuado manejo de los eventos relacionados a cada uno de los componente y la comparación de los resultados entregados por el software con los reportados tanto por fuentes bibliográficas, como datos históricos provenientes de trabajos de investigación.

Se realizó una búsqueda en el material bibliográfico de distintos ejemplos y problemas, que cuenten con la información y las variables necesarias, para poder ser representados por medio del software. También considerando los equipos que presenta el programa o los fluidos que pueden ser utilizados. El mismo proceso se llevó a cabo con respecto a varios trabajos de investigación.

Se procedió a introducir la cantidad mínima de datos requeridos por el software dependiendo del caso termodinámico que se desee representar, en los espacios destinados para ello en la interfaz gráfica, para poder llevar a cabo el cálculo y posterior salida de los resultados también por elementos de la interfaz.

Luego de introducir los valores de acuerdo a lo descrito en el punto anterior, el software realiza los cálculos correspondientes y presenta los resultados en los campos dispuestos para ese propósito. Posteriormente, estos valores fueron recopilados y se compararon con los reportados ya sea a nivel de la bibliografía o los datos históricos de los trabajos de investigación, y se les determinó el porcentaje de desviación de los resultados obtenidos por el software con respecto a los valores de referencia.

3. **Análisis y discusión de resultados**

La base de datos está conformada por las principales propiedades termodinámicas requeridas para la resolución de diversos casos: temperatura, presión, volumen específico, entalpía, entropía y energía interna, y en el caso de los gases ideales: temperatura, entalpía, energía interna y entropía estándar (s^o).

La base de datos del software está conformada por 14 fluidos, los cuales son: Agua (H_2O), Aire, Dióxido de Carbono (CO_2), Metano (CH_4), Etano (C_2H_6), Propano (C_3H_8), Butano (C_4H_{10}), Isopentano (C_5H_{12}), Pentano (C_5H_{12}), Hexano (C_6H_{14}), Nitrógeno (N_2), Oxígeno (O_2), R-134^a y R-23.

Se escogió como fuente destinada para la extracción de las propiedades a Saavedra [1] con excepción de las propiedades del aire y el oxígeno, para los cuales se utilizó a Perry [2]. Los fluidos considerados como gas ideal, fueron: aire, dióxido de carbono, nitrógeno y oxígeno; y las propiedades fueron extraídas tanto de Van Wylen[3] y Stull [4].

Para el sistema de gestión de datos, responsable de almacenar la información y facilitárselas al programa, se seleccionaron las hojas de cálculo pertenecientes a OpenOffice, debido a su facilidad de uso. Realizándose el llenado de los formatos para los estados de saturación, sobrecalentamiento o gas ideal, dependiendo del caso.

3.1. Selección del lenguaje de programación

Se realizó la selección del lenguaje para el desarrollo de los algoritmos del programa. Para ello se empleó una matriz de valoración por puntos (presentada en la Tabla 1), donde se presentan los aspectos a evaluar, los cuales tiene una ponderación asignándole un valor a cada una de las opciones del lenguaje dependiendo de su cumplimiento para tal característica. Basado en los resultados obtenidos de la aplicación de la matriz, se puede evidenciar que el lenguaje de programación sugerido para la elaboración de los algoritmos es Java. Donde se observa que uno de los factores decisivos para la selección fue el manejo del lenguaje.

3.2. Desarrollo del software

El software se estructuró en 4 paquetes que contienen el código de todo el programa.

Paquete principal. Se considera así, ya que contiene la clase principal, es decir, aquella que ejecuta el programa (ejecutable). Contiene además las clases correspondientes a la interfaz gráfica de usuario.

Tabla 1: Matriz de valoración por puntos para la selección del lenguaje de programación.

Factores	%	Alternativas de lenguaje							
		C		C++		Python		Java	
		E	M	E	M.	E	M	E	M
Versatilidad	20	3	60	4	80	5	100	4	80
Orientado a Objetos	20	1	20	5	100	5	100	5	100
Multiplataforma	20	3	60	4	80	5	100	5	100
Popularidad	10	4	40	4	40	5	50	5	100
Manejo del lenguaje	30	1	30	1	30	1	30	4	120
TOTAL	100	-	210	-	330	-	380	-	500

Paquete de datos. Es el encargado de contener las clases responsables de buscar y leer los valores en la base de datos; así como guardar los datos en variables y crear objetos que contribuyan al almacenamiento.

El paquete de clases “dataIn” define cada una de las clases que ayudan al proceso de lectura y manejo de datos. Para la lectura de la base de datos se implementan métodos de selección de lectura que mediante una estructura de control definen el método a utilizar dependiendo de cada fluido ya que el número de datos para cada uno varía.

Cada fluido define el número de filas y columnas que posee la tabla de datos y el llamado de los métodos de lectura si es sobrecalentado, saturado, líquido comprimido o gas ideal. Antes de cada lectura se crean objetos que contienen las variables en donde se almacena la base de datos.

Paquete de cálculo. Se encuentran las clases que contienen las ecuaciones y modelos matemáticos a implementar para los casos termodinámicos que requieran la primera y segunda ley de la termodinámica. También se presentan las clases que llevan a cabo el cálculo de las propiedades.

Para emplear la primera ley de la termodinámica se realizó un análisis de la misma para su adaptación a diferentes procesos a estudiar. El reconocimiento del calor y la energía interna como formas de energía hace posible generalizar la ley de conservación de la energía mecánica para incluir el calor y la energía interna además

del trabajo y las energías externa, potencial y cinética. Un enunciado formal de la primera ley de la termodinámica es: “Aunque la energía adopta muchas formas, la cantidad total es constante, y cuando desaparece en una forma, aparecerá simultáneamente en otras”. Al aplicar la primera ley a un proceso dado, la esfera de influencia de los procesos se divide en dos partes, el sistema y los alrededores. La región en la que ocurre el proceso es separada y se conoce como sistema; todo aquello con lo que el sistema interactúa son los alrededores [5].

En cuanto a los casos termodinámicos se consideró que los sistemas pueden ser cerrados o abiertos. Para la resolución de los casos termodinámicos se escogieron los siguientes equipos y aplicando la primera ley de la termodinámica para cada uno de ellos, se tiene:

- **Sistemas cerrados:** La primera ley de la termodinámica ha producido una definición operacional de la energía. El cambio en la energía de un sistema cerrado es igual al trabajo hecho sobre o por el sistema en el curso de un proceso adiabático. Para procesos en que interviene el calor, deberá tomarse en cuenta un tipo adicional de interacción (interacción de calor). En ausencia de una interacción de trabajo, usamos la ecuación (1) [6].

$$Q = \Delta E \quad (1)$$

En el estudio de la termodinámica, es conveniente considerar la energía cinética y la energía potencial por separado y después considerar las otras formas de energía de la masa de control en una sola propiedad que se llama energía interna, y a la cual se le da el símbolo de U . Por lo que la energía (E) es la suma de energía interna (U) más la energía potencial (EP) más la energía cinética (EC) [6].

Contenedor rígido. En este caso al examinar al examinar las diversas formas de trabajo en la superficie de control, se concluye que el

trabajo para este proceso es cero. Además, el sistema no se mueve, así que no hay cambio en la energía cinética. Existe un pequeño cambio en el centro de masa del sistema, pero se supondrá que el cambio correspondiente en la energía potencial es insignificante [6]. Por lo tanto, se emplea la ecuación (2) [7].

$$\Delta U = \pm Q \quad (2)$$

Donde:

U : Energía interna (kJ).

Q : Calor (kJ).

Contenedor cerrado con agitador. Se emplea la ecuación (3) que involucra el trabajo [7]

$$\Delta U = W_{eje} \pm Q \quad (3)$$

Donde:

W : Trabajo (kJ).

Cilindro pistón. Se emplea la ecuación (4) considerando el trabajo de desplazamiento [7]

$$\Delta U = \pm Q \pm P(V_{final} - V_{inicial}) \quad (4)$$

Donde:

V : Volumen (m^3)

P : Presión (kPa)

Para procesos isotérmicos de gases ideales se presenta la ecuación (5) [7]:

$$\Delta U = \pm Q \pm P V_{inicial} \ln\left(\frac{V_{final}}{V_{inicial}}\right) \quad (5)$$

- **Sistemas abiertos** [7].

Turbinas. Se emplea la ecuación (6) que involucra la energía del fluido al entrar y salir del equipo [7]

$$\dot{W}_{turb} = \pm \dot{Q} + \dot{m}(h_{entrada} - h_{salida}) \quad (6)$$

Donde:

\dot{W} : Potencia (kW)

\dot{Q} : Flujo de calor (kW)

\dot{m} : Flujo másico (kg/s)

h : Entalpía (kJ/kg)

Compresor. Se emplea la ecuación (7) [7]

$$\dot{W}_{comp} = \pm \dot{Q} + \dot{m} (h_{salida} - h_{entrada}) \quad (7)$$

Para la bomba se tiene la misma ecuación del compresor ya que ambos son equipos que consumen energía.

Toberas. Se emplea la ecuación (8) [7]

$$h_{entrada} + \frac{\dot{V}_{entrada}^2}{2} = h_{salida} + \frac{\dot{V}_{salida}^2}{2} \quad (8)$$

Donde:

\dot{V} : velocidad (m/s)

Válvulas de estrangulamiento. Se emplea la ecuación (9) [7]

$$h_{salida} \cong h_{entrada} \quad (9)$$

Intercambiadores de calor. Se emplea la ecuación(10) [7]

$$0 = \pm \dot{Q} + \dot{m} (h_{entrada} - h_{salida}) \quad (10)$$

Considerando los efectos del serpentín e igualando los calores sobre la primera ley, se obtiene la ecuación (11) [7]:

$$\dot{m} (h_{entrada} - h_{salida}) = \dot{m}_{serp} (h_{eS} - h_{sS}) \quad (11)$$

Donde:

eS : entrada serpentín

sS : salida serpentín

Para el caso de la segunda ley de la termodinámica se implementó el principio de incremento de entropía dado por las ecuaciones (12), (13) y (14) [3]

$$\Delta S_{neto} = \Delta S_{medio} + \Delta S_{Sistema} \quad (12)$$

$$\Delta S_{Sistema} = m_{final} S_{final} - m_{inicial} S_{inicial} \quad (13)$$

$$\Delta S_{medio} = \sum \left[\frac{\pm Q}{T_0} + m_{entra} S_{entra} - m_{sale} S_{sale} \right] \quad (14)$$

Para la búsqueda de las propiedades termodinámicas se necesita la matriz de datos del fluido guardadas en las clases de lectura y dependiendo de la región termodinámica.

Método de cálculo vapor sobrecalentado y líquido comprimido. Este método se subdivide en 3 ya que la búsqueda de propiedades es diferente para cada combinación de propiedades ($P - T$, $P - (v, u, h, s)$, $T - (v, u, h, s)$)

Caso T-P: se realiza un barrido de temperaturas comparando los elementos de cada fila con la temperatura ingresada por el usuario hasta encontrar un valor que coincida con alguno de los valores de la búsqueda o que se encuentre entre ellos, luego realiza el mismo procedimiento con la presión comparando con cada uno de los valores en cada columna hasta encontrar la coincidencia o que se encuentre entre dos valores. Si la temperatura se encuentra entre dos valores se llama al método de interpolación para el cálculo de las propiedades, lo mismo pasa si la presión se encuentra entre ambos valores.

Caso T - (v, u, h, s), es un caso similar al anterior con la diferencia de que se compara la propiedad suministrada por el usuario con los valores en cada fila de temperatura y no la fila de presiones de la tabla.

Caso P.- (v, u, h, s), se realiza una búsqueda comparando cada una de las presiones de cada fila hasta encontrar la que coincida con el valor buscado o este entre dos valores, luego se realiza una búsqueda de la segunda propiedad entre cada uno de los valores que estén entre las columnas de presiones seleccionadas.

Método de cálculo saturado. Se realiza un barrido de presión o temperatura hasta encontrar la coincidencia o que el valor buscado se encuentre entre dos filas, luego si se tiene como segunda propiedad la calidad se obtienen las demás propiedades, o si se tiene alguna otra propiedad menos presión o temperatura se puede calcular la calidad para obtener el resto de propiedades (Figura 1).

Método de cálculo gas ideal: se realiza un barrido con cualquiera de las propiedades T, u, h, s^0 hasta conseguir la coincidencia o que se

```
public double calculoCalidad(double nf,double n,double ng){
    double x;
    if (nf == ng) {
        x = 1;
    } else {
        x = (n - nf) / (ng - nf);
    } return x; }

```

Figura 1: Método de cálculo de calidad.

encuentre entre dos valores para luego interpolar y conseguir el resto de propiedades.

Clase interpolación: En ciertos casos el usuario puede calcular el valor de un estado termodinámico a condiciones que coincidan con los valores definidos en la base de datos del fluido de trabajo, pero no se conoce una expresión analítica que permita calcular el valor de las propiedades termodinámicas para un punto arbitrario (Figura 2).

```
public double calculoInterpolacion(double x1,double y1,
                                   double x2, double y2,double valor)
{
    double resultado;
    resultado=((y2-y1)*(valor-x1))/(x2-x1)+y1;
    return resultado;
}

```

Figura 2: Método de interpolación.

Clase primera ley: En esta clase se declaran todas las variables que involucran la primera ley de la termodinámica, contiene métodos de cálculo de las ecuaciones específicas para cada equipo mediante la primera ley.

Se utiliza la convención de signos de la termodinámica clásica y todo lo que entre desde el entorno hacia el sistema como magnitudes positivas, y todo lo que salga del sistema al entorno como magnitudes negativas.

Clase segunda ley: La clase “SegundaLey.java” se encarga del cálculo para el estudio de la posibilidad de un proceso mediante el principio de incremento de entropía debido a su alcance tanto para equipos, procesos abiertos y procesos cerrados cíclicos y no cíclicos que cubre el software *ThermoQuest-UC* (Figura 3). Para el cálculo se toma como consideración la convención de signos.

El método *CalculoSegundaLey* es el encargado de recibir todos los datos enviados por el sistema

```
public double calculoSegundaLey()
{
    sumaCalorT=0;
    for (int i=0; i<vectorCalor.length;i++){
        if (tAmb==0){
            sumaCalorT+=0;
        } else{
            sumaCalorT+=((-1*vectorCalor[i])/tAmb);
        }
    }
    deltaS=sumaCalorT+(masaEnt*entropiaE)-(masaSal*entropiaS)
            - (masaIni*entropiaI) +(masaFin*entropiaF);
    return deltaS; }

```

Figura 3: Método de cálculo de la segunda ley de la termodinámica.

en estudio, en él se realiza un ciclo For en el cual se divide el flujo de calor entre la temperatura de entorno, en caso de trabajar con un solo equipo será un ciclo de una sola vuelta, en caso de procesos de más de un equipo se realizaran tantas vueltas como equipos con transferencia de calor con el entorno existan.

Paquete de eventos: Contiene las clases que se encargan de escuchar e implementar el código correspondiente a la acción realizada por el usuario; así como el traspaso de información entre el paquete de datos y el de cálculo. Se encarga del manejo de instrucciones para el cálculo de los ciclos termodinámicos “Brayton, Rankine, Refrigeración, y Linde-Hapson como también de la lógica de cálculo al momento de implementar las leyes de la termodinámica y la determinación de propiedades. Estos ciclos requieren de los métodos de cálculo de propiedades, primera y segunda ley de la termodinámica. Los ciclos poseen un arreglo ya definido, por lo que para cada uno se tiene un método que contiene una serie de instrucciones para su resolución.

Cada sección de cálculo del programa posee una clase de eventos:

- “EventosPropiedades.java”,
- “EventosCalcularLeyes.java” y
- “EventosCiclos.Java”.

La clase “EventosPropiedades.java” se encarga del cálculo de las propiedades de un estado termodinámico, este consiste en recibir el tipo de fluido, las propiedades suministradas por el usuario y la región en donde esté definido, y de esta

manera hacer el llamado a las clases del paquete “cálculos” que devuelve el estado ya definido (Figura 4).

La clase “EventosCalcularLeyes” dirige el modo de cálculo de la primera ley en tres niveles de control: sistemas cerrados, sistemas abiertos cíclicos y sistemas abiertos no cíclicos, para ello de dispuso de una estructura de control que permitiera conocer mediante la interfaz gráfica que tipo de sistema el usuario desea trabajar (Figura 5).

```
@Override
public void actionPerformed(ActionEvent event)
{
//Declaración de variables
if (comprobacion) {
switch (estado.lista) {
case “Desconocido”: //Si el estado es desconocido
//Definir región
break;
case “Líquido Comprimido”:
estado = “Líquido Comprimido”;
// Llamado al método de cálculo de propiedades
break;
case “Mezcla líquido-vapor”:
estado = “Mezcla líquido-vapor”;
// Llamado al método de cálculo de propiedades
break;
case “Sobrecalentado”:
estado = “Sobrecalentado”;
// Llamado al método de cálculo de propiedades
break;
case “Gas Ideal”:
estado = “Gas Ideal”;
// Llamado al método de cálculo de propiedades
break;}}}
```

Figura 4: Método de cálculo de la clase “EventosPropiedades.java”.

```
if (equipo.gui.procesoCerrado.isSelected()){
//Bloque de código de cálculo de propiedades y primera
y segunda ley
}
else if (equipo.gui.procesoAbiertoNoCiclico.isSelected()) {
//Bloque de código de cálculo de propiedades y primera
y segunda ley
}
else if (equipo.gui.procesoAbiertoCiclico.isSelected()) {
//Bloque de código de cálculo de propiedades y primera
y segunda ley
}
```

Figura 5: Forma de cálculo de la clase “EventoCalcularLeyes.java”.

El método *definirEcuacionLey1()* y *definirEcuacionLey2()* poseen una estructura similar, ambos se encargan de hacer llamados al

paquete de cálculo específicamente a los métodos *primeraLey()* y *segundaLey()* respectivamente de manera de cumplir con los datos que estos exijan según el equipo a utilizar y de la cantidad de datos que el usuario disponga (Figura 6).

```
public void definirEcuacionLey1()
{
calculo1Ley = new PrimeraLey();
switch (equipo.identificadorEquipo) {
case “Bomba”: //Equipo bomba
//Código de cálculo
break;
case “Compresor”: //Equipo Compresor
//Código de cálculo
break;
case “Turbina”: //Equipo Turbina
//Código de cálculo
break;
// otros equipos }
```

Figura 6: Función de cálculo del método *definirEcuacionLey1()*.

3.3. Creación de la interfaz gráfica

La interfaz gráfica se encarga de gestionar la comunicación entre el usuario y el software basado en interacciones visuales como botones, iconos, ventanas, entre otros para la captura y salida de datos correspondientes a las operaciones lógicas y matemáticas realizadas por los algoritmos del programa.

El software *ThermoQuest-UC* presenta una ventana principal ubicada en una clase de tipo *JFrame* llamada “*VentanaPrincipal.java*” (Figura 7)

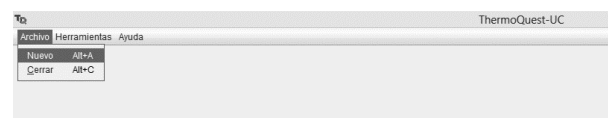


Figura 7: Ventana principal del software *ThermoQuest-UC*.

La primera categoría “Archivo” posee dos ítems, el primero “Nuevo”, se encarga de mostrar la ventana de selección de los 3 módulos principales del programa con el que se desee trabajar. El segundo “Cerrar”, se encarga de terminar la ejecución del programa.

La Segunda categoría “Herramientas”, posee un ítem, “Tablas de propiedades termodinámicas”, el cual se encarga de mostrar una ventana con la interfaz necesaria para la consulta de las

propiedades de los distintos fluidos de la base de datos de *ThermoQuest-UC*.

La tercera categoría “Ayuda”, posee un ítem, “Contenido de ayuda”, el cual muestra una ventana de ayuda con los contenidos teóricos necesarios para la comprensión del funcionamiento del programa.

Al ejecutar el programa, o al marcar el ítem “Nuevo” de la categoría “Archivo”, la cual tiene como encabezado “Menú de selección”, como también cuenta con tres botones ubicados de forma paralela que se encargan de mostrar las opciones de cálculo que presenta el programa representado en la Figura 8.

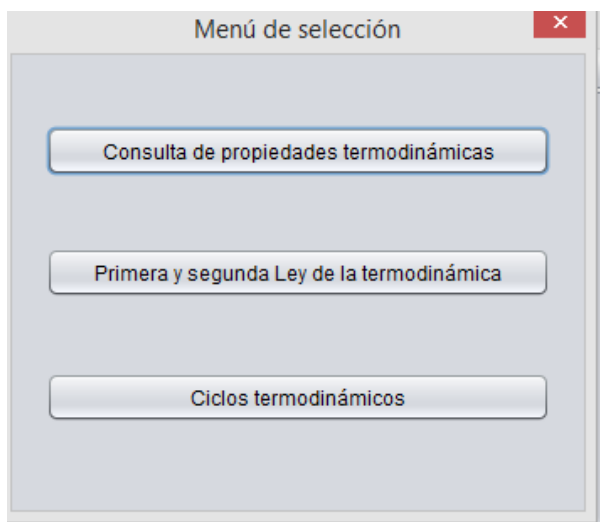


Figura 8: Ventana de selección.

Para la consulta de propiedades termodinámicas se agrega un panel “VentanaPropiedades.java” al contenedor de la ventana principal como se puede observar en la Figura 9. Este panel se puede dividir en dos secciones, la de datos y resultados donde se ingresan los datos correspondientes y se muestra el estado termodinámico a consultar, y la sección del diagrama que muestra un domo termodinámico según la sustancia seleccionada y la combinación de propiedades deseada para definir el eje de las ordenadas y las abscisas.

Para el cálculo de la primera y segunda ley de la termodinámica en equipos se agrega un JPanel “PanelLeyes.java” el cual posee una barra de configuración que permite la selección del tipo de fluido a utilizar, tipo de sistema (cerrado,

abierto, cíclico o no cíclico) y si los cálculos serán solo respecto a la primera ley o a la primera y segunda ley de la termodinámica, mediante objetos *JRadioButtons* donde se puede seleccionar solo una de las opciones, además se dispone de un botón “Comenzar” que permite mostrar la configuración seleccionada, para el caso de configuración de proceso abierto se requiere ingresar la masa y luego el número de equipos mediante una ventana de datos.

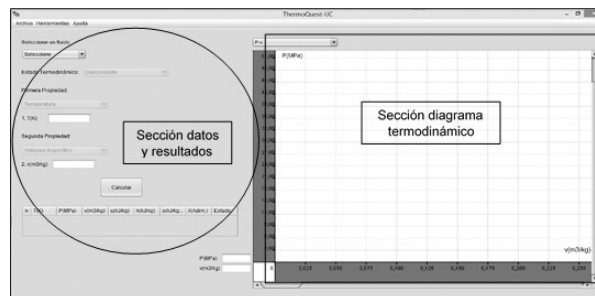


Figura 9: Panel de consulta de propiedades termodinámicas.

Al seleccionar el equipo deseado independientemente de la configuración de cálculo establecida se dispone una configuración en común de campos de texto, etiquetas, objetos *JCheckBox* (cajas de chequeo), pestañas, listas y tablas de resultados las cuales cumplen la función de ingreso de datos como corrientes de entrada y salida (inicio y fin para procesos cerrados), tablas donde se mostraran los resultados del cálculo de propiedades de las corrientes, pestañas donde están distribuidos cada uno de los datos necesarios y cálculos particulares de cada equipo, en general se tienen 2, una llamada parámetros el cual es un espacio dedicado para mostrar o ingresar variables particulares de cada equipo, y la otra llamada datos donde se muestran las tablas de resultados de las propiedades del fluido. Además se muestra una etiqueta e imagen que ayuden al fácil reconocimiento del equipo en el que se trabaja.

Sistema Cerrado: Se pueden escoger 3 equipos, contenedor rígido, contenedor con eje y cilindro pistón, cada uno dispone de espacios de texto, etiquetas y botones que indiquen al software lo que se tiene y desee calcular. Además de establecer que el equipo sea adiabático o no, cada uno posee los siguientes elementos:

- Contenedor rígido: masa, calor (caso no adiabático).
- Contenedor con eje: masa, trabajo, calor (caso no adiabático) (Figura 10).
- Cilindro pistón: masa, trabajo, calor (caso no adiabático), volumen inicial, volumen final, (caso Isobárico e isotérmico).

The screenshot shows a software window titled "Contenedor con eje". It features two columns for "Datos Inicial" and "Datos Final", each with a dropdown for "Estado Termodinámico" (Desconocido) and a "Primera propiedad" dropdown (Temperatura). Below these are input fields for "1. T(K)", "Segunda propiedad" (Volumen Especifico), and "2. v(m³/kg)". A central diagram shows a cylinder with a shaft. At the bottom, there are checkboxes for "Trabajo (kJ)", "Masa (kg)", "Adiabático", and "Calor (kW)", along with a "Temperatura del entorno (K)" field and "Calcular" and "Borrar" buttons.

Figura 10: Contenedor con eje.

- Sistema abierto estacionario: Se escoge entre 7 equipos, bomba, compresor, turbina, intercambiador, caldera, tobera y válvula, cada uno dispone de espacios de texto, etiquetas y botones que indiquen al software lo que se tiene y desea calcular. Se muestra dos mensajes donde se requiere ingresar el flujo másico y el número de equipos que posea el sistema. También se muestra una tabla con la identificación de todos los equipos del proceso. Para cada equipo se muestra la siguiente información.
- Bomba: potencia, calor (caso no adiabático), adiabático (Figura 11).
- Compresor: potencia, calor (caso no adiabático), adiabático (Figura 12).
- Turbina: potencia, calor (caso no adiabático), adiabático. (Figura 13).
- Intercambiador: Calor, serpentín; en caso de indicarse que se tiene serpentín se muestran

dos pestañas, una llamada “Datos serpentín” donde se tiene información de las corrientes de entrada, salida y flujo másico del serpentín, y otra “Serpentín” donde se tiene información de todas las propiedades a la entrada y salida (Figura 14).

- Caldera: calor (Figura 15).
- Tobera: velocidad de entrada, velocidad de salida (Figura 16).
- Válvula: no muestra información adicional a los datos de corriente de entrada y salida del equipo (Figura 17).

The screenshot shows a software window titled "Bomba #1". It features two columns for "Datos Entrada" (Comente #1) and "Datos Salida" (Comente #2), each with a dropdown for "Estado Termodinámico" (Desconocido) and a "Primera propiedad" dropdown (Temperatura). Below these are input fields for "1. T(K)", "Segunda propiedad" (Volumen Especifico), and "2. v(m³/kg)". A central diagram shows a pump. At the bottom, there are checkboxes for "Potencia (kW)", "Adiabático", and "Calor (kW)", along with a "Temperatura del entorno (K)" field and "Calcular" and "Borrar" buttons.

Figura 11: Bomba.

The screenshot shows a software window titled "Compresor #1". It features two columns for "Datos Entrada" (Comente #1) and "Datos Salida" (Comente #2), each with a dropdown for "Estado Termodinámico" (Desconocido) and a "Primera propiedad" dropdown (Temperatura). Below these are input fields for "1. T(K)", "Segunda propiedad" (Volumen Especifico), and "2. v(m³/kg)". A central diagram shows a compressor. At the bottom, there are checkboxes for "Potencia (kW)", "Adiabático", and "Calor (kW)", along with a "Temperatura del entorno (K)" field and "Calcular" and "Borrar" buttons.

Figura 12: Compresor.

Tanto para sistemas abiertos o cerrados en caso de que el usuario ingrese toda la información que requiera el equipo, se mostrara para cada equipo un mensaje indicando si se cumple o no la primera ley de la termodinámica.

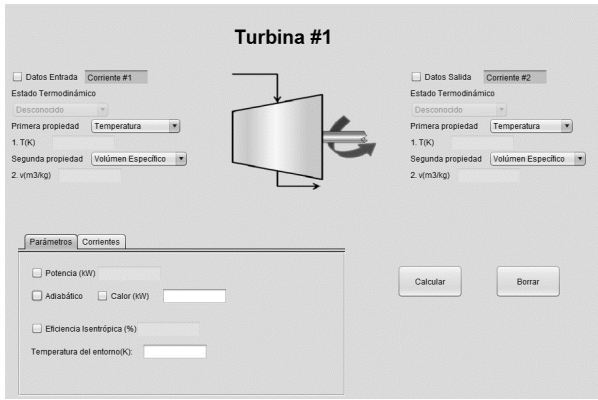


Figura 13: Turbina.

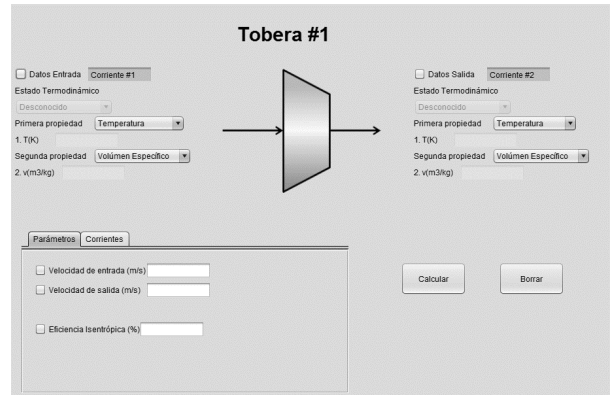


Figura 16: Tobera.

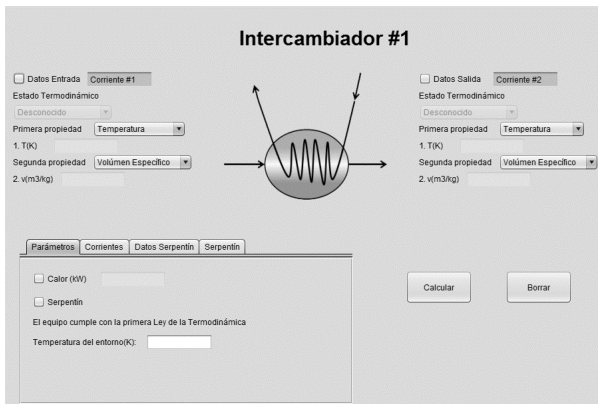


Figura 14: Intercambiador de calor.

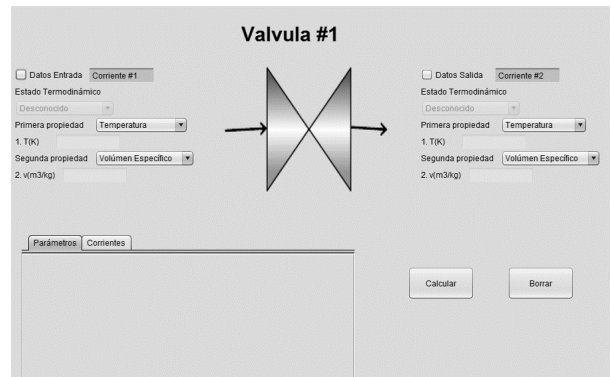


Figura 17: Válvula.

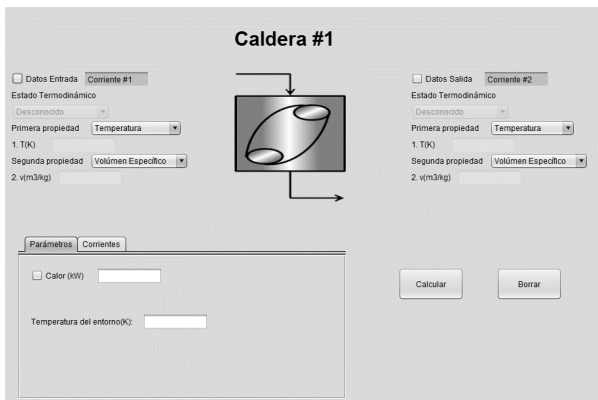


Figura 15: Caldera.

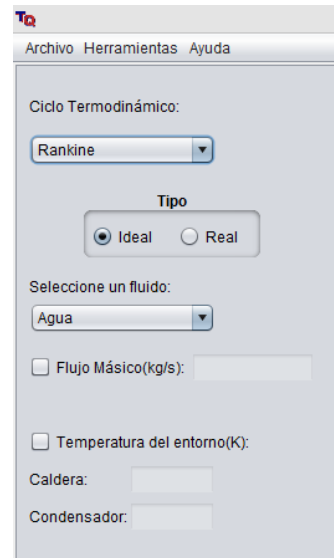


Figura 18: Barra de datos iniciales del ciclo.

Al trabajar con la segunda ley de la termodinámica se muestra un mensaje indicando la posibilidad del equipo junto al valor de incremento de entropía, para el caso de equipos no adiabáticos, también se pide la temperatura del entorno. Para el caso de equipos con eficiencia isentrópica (bombas, compresores, turbinas y toberas) se muestra un espacio de texto dedicado para calcular

o ingresar el porcentaje de eficiencia. Al finalizar de ingresar todos los datos termina el cálculo presionando el botón finalizar mostrándose un mensaje indicando el cumplimiento de la primera

ley de todo el proceso y de la posibilidad del sistema para el caso de trabajar con la segunda ley.

Para el cálculo de varios ciclos termodinámicos se agrega el JPanel “PanelCiclos.java” al contenedor de la pantalla principal. El panel contiene inicialmente una barra lateral en la cual se proporciona la información inicial del ciclo a trabajar: lista de ciclos disponibles (Brayton, Rankine, Refrigeración y Linde-Hampson), tipo de ciclo (real o ideal), sustancia de trabajo (Figura18), y dependiendo del ciclo seleccionado: flujo másico (se puede indicar si es conocido o no para algunos casos) y si se conoce la temperatura de entorno de los equipos que posean transferencia de calor (Figuras 19, 20 y 21).

En el resto del panel se tiene un diagrama representativo del ciclo termodinámico a trabajar, así como una etiqueta con el nombre y tipo de ciclo (real o ideal). La captura de datos para cada ciclo se hace de manera distinta dependiendo de los datos suministrados por el usuario. Para ciclos ideales se muestran espacios de texto y lista de propiedades para las siguientes corrientes.

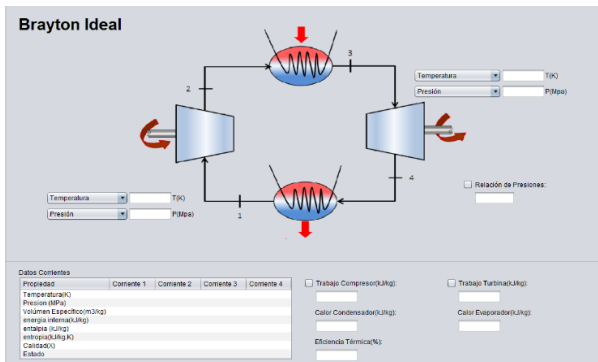


Figura 19: Ciclo Brayton.

3.4. Validación del programa

Para la validación del programa, se realizaron varias comparaciones de los resultados obtenidos con el software *ThermoQuest-UC* y casos planteados en la bibliografía y trabajos de investigación.

Para un ejemplo de verificación del cálculo de propiedades termodinámicas a través del software *ThermoQuest-UC*, se seleccionó el ejemplo mostrado en el capítulo 3, página 104 de Moran

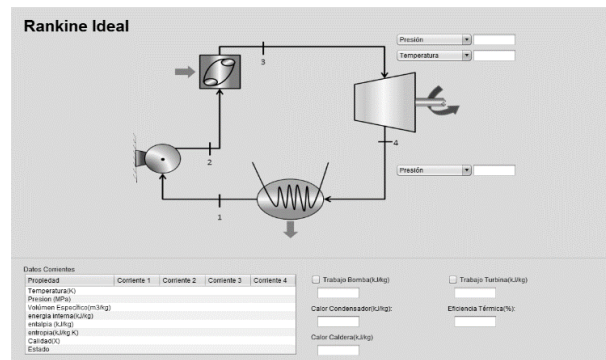


Figura 20: Ciclo Rankine ideal.

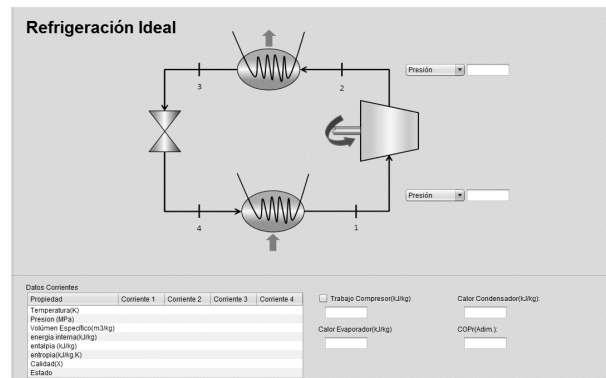


Figura 21: Ciclo de Refrigeración ideal.

y Shapiro [8], donde se requiere el cálculo del volumen específico para ciertas condiciones empleando como fluido: agua, el resultado de la comparación se puede observar en la Tabla 2.

Tabla 2: Desviación para el módulo de cálculo de propiedades.

Variable	Bibliografía (m ³ /kg)	<i>ThermoQuest-UC</i> (m ³ /kg)	Dev. (%)
Volumen específico	1,506	1,526	1,341

Para el cálculo de la primera y segunda ley de la termodinámica en equipos se agrega un JPanel “PanelLeyes.java” el cual posee una barra de configuración que permite la selección del tipo de fluido a utilizar, tipo de sistema (cerrado, abierto, cíclico o no cíclico) y si los cálculos serán solo respecto a la primera ley o a la primera y segunda ley de la termodinámica. Por otro lado se tiene una barra de menú vertical, un objeto JMenuBar que contiene botones como

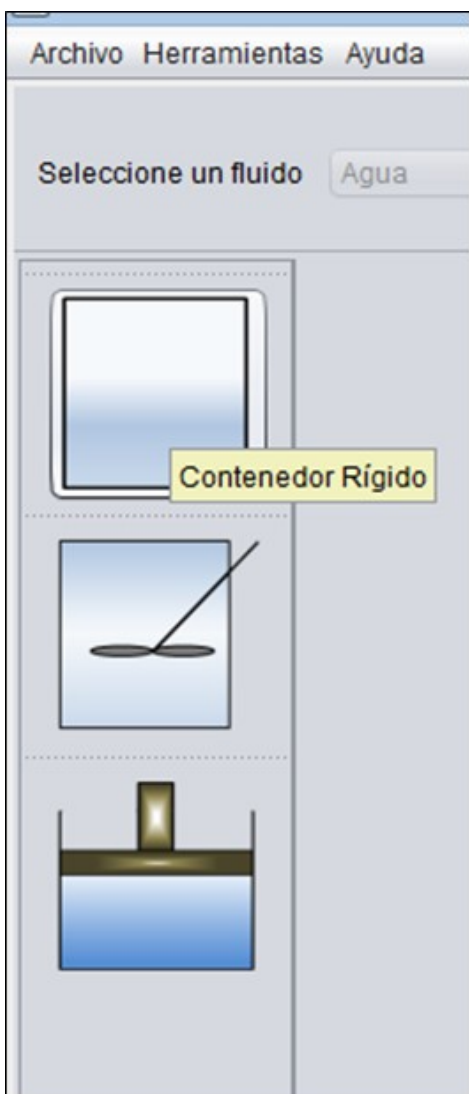


Figura 22: Barra de menú vertical.

elementos que lo conforman, cada botón tiene una figura característica del equipo que representa, los cuales son distribuidos dependiendo de la configuración de cálculo previamente establecida como se representa en la Figura22.

Al seleccionar el equipo deseado independientemente de la configuración de cálculo establecida se dispone una configuración, como se puede observar en la Figura22, de campos de texto, etiquetas, objetos JCheckBox (cajas de chequeo), pestañas, listas y tablas de resultados las cuales cumplen la función de ingreso de datos como corrientes de entrada y salida (inicio y fin para procesos cerrados), tablas donde se mostraran los resultados del cálculo de propiedades de las

corrientes, pestañas donde están distribuidos cada uno de los datos necesarios y cálculos particulares de cada equipo

Para mostrar un ejemplo de este módulo de cálculo se tomó el problema 4.24 ubicado en la página 203 del Çengel y Boles [7] en el cual se tiene como objetivo el cálculo del trabajo que se realiza en un sistema cilindro-pistón, donde se lleva a cabo un proceso de expansión isotérmica empleando nitrógeno (N_2) como fluido de trabajo, el resultado de la comparación se puede observar en la Tabla 3.

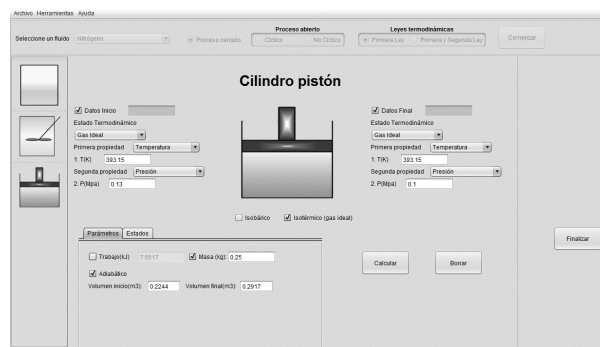


Figura 23: Panel del equipo seleccionado.

Tabla 3: Desviación para el módulo sistema cerrado-cilindro-pistón.

Variable	Bibliografía (kJ)	ThermoQuest-UC (kJ)	Desv. (%)
Trabajo	7,65	7,65	0,00

Para verificar el intercambiador de calor, se utilizaron datos de históricos extraídos del trabajo de investigación de la Universidad de Carabobo por los autores Ubieda y Vargas [9] donde se busca obtener el calor recibido por el agua, en un intercambiador de doble tubo, con fluido calefactor en paralelo. Los resultados de la comparación se pueden observar en la Tabla 4.

Como ejemplo para la verificación de los ciclos, se extrajo el ejercicio 9.5 ubicado en la página 518 del Çengel y Boles [7], en el cual se tiene como objetivo el cálculo del trabajo del compresor y la eficiencia térmica del ciclo, empleando aire como fluido de trabajo, como es mostrado en la Tabla 5.

Tabla 4: Desviación para el módulo del intercambiador de calor.

Variable	Trabajo de grado (kW)	<i>ThermoQuest-UC</i> (kW)	Desv. (%)
Flujo de calor	0,30098	0,30820	2,398

Tabla 5: Desviación para el módulo de ciclo Brayton ideal.

Variable	Bibliografía	<i>ThermoQuest-UC</i>	Desv. (%)
Trabajo compresor (kJ/kg)	244,16	247,73	1,462
Eficiencia térmica (%)	44,8	44,8	0,00

Como segundo ejemplo se utilizó el problema 13.4 ubicado en la página 548 [8], en el cual se tiene como objetivo el cálculo de la fracción licuada como resultado del proceso de licuefacción contando con las presiones tanto de alta como de baja, así como propiedades para definir las corrientes 4 y 9, el resultado se puede observar en la Tabla 6.

Tabla 6: Desviación para el módulo de ciclo Linde-Hampson ideal.

Variable	Bibliografía	<i>ThermoQuest-UC</i>	Desv. (%)
Fracción licuada	0,053	0,051	3,774

4. Conclusiones

Se desarrolló un software en lenguaje libre (Java) *ThermoQuest-UC* para el estudio de casos termodinámicos. *ThermoQuest-UC* será empleado específicamente en la cátedra de termodinámica de manera que los estudiantes aprecien los resultados ante los datos entregados al software facilitando el análisis de los resultados obtenidos.

El programa cuenta con una base de datos de 14 compuestos como: agua, aire, dióxido de carbono,

metano, etano, propano, butano, isopentano, pentano, hexano, nitrógeno, oxígeno, R-134a y R-23. Los datos de cada sustancia se encuentran en hojas de cálculo provenientes de un software libre como lo es OpenOffice. Las propiedades disponibles en la base de datos corresponden a Saavedra [1] con excepción de las propiedades del aire y el oxígeno, para los cuales se utilizó a Perry [2]. Los fluidos aire, dióxido de carbono, nitrógeno y oxígeno; sus propiedades fueron extraídas tanto de Van Wylen [3] y Stull [4]. *ThermoQuest-UC* cuenta con modelos algoritmos y matemáticos que definen el comportamiento termodinámico de los fluidos, basándose en principios fundamentales como la primera y segunda ley de la termodinámica. Se verificó el buen funcionamiento del programa comparando sus resultados con casos reportados en la bibliografía y trabajos de investigación encontrándose desviaciones menores al 5%. Se realizaron pruebas de cálculo con el programa tomando casos de sistema cerrado obteniendo desviaciones por debajo al 1% así como también sistema abierto con desviaciones entre 0 y 5%.

ThermoQuest-UC dispone de diversos equipos y la representación de los principales ciclos termodinámicos, permitiendo de esta manera plantear diversidad de casos que amplían y sustentan el conocimiento en el área termodinámica por lo que se cuenta con una herramienta versátil con no solo la posibilidad de trabajar con lo que ya contempla el programa sino también poder realizar las modificaciones necesarias de manera de incorporar modelos para ampliar sus funciones ya existentes.

Referencias

- [1] Francisco Saavedra. Aplicación de la computación al cálculo de las propiedades termodinámicas mediante el uso de los compiladores Quick Basic ver 4.5 y Basic PDS ver 7.1. Trabajo de Ascenso, Escuela de Ingeniería Mecánica, Facultad de Ingeniería, Universidad de Carabobo, Valencia, Venezuela, 1993.
- [2] Peter Lilley, Robert Reid y Evan Buck. Datos físicos y químicos. En R. Perry, D. Green y J. Maloney, editores, *Manual del Ingeniero Químico*, volumen 1, capítulo 3. McGraw Hill, 6^{ta} edición, 2001.
- [3] G. Van Wylen, R. Sonntag y C. Borgnakke. *Fundamentos de termodinámica*. Limusa Wiley, 2^{da} edición, 1992.

- [4] Daniel R. Stull, Harold Prophet, and National Standard Reference Data System. JANAF thermochemical tables. Technical report, U.S. Dept. of Commerce, National Bureau of Standards, Washington, 1971.
- [5] J. M. Smith, H. C. Van Ness y M. M. Abbott. *Introducción a la termodinámica en ingeniería química*. Mc Graw Hill, 6^{ta} edición, 2003.
- [6] J. R. Kenneth Wark. *Termodinámica*. McGraw-Hill, 5^{ta} edición, 1991.
- [7] Yunus Çengel y Michael A. Boles. *Termodinámica*. Mc Graw Hill, 5^{ta} edición, 2006.
- [8] Michael J. Moran y Howard N. Shapiro. *Fundamentos de termodinámica técnica*. Editorial Reverté, S. A., 2^{da} edición, 2005.
- [9] Jonathan Ubieda y Joanna Vargas. Desarrollo de un software para la evaluación del banco de intercambiadores de calor del Laboratorio de Ingeniería Química. Trabajo Especial de Grado, Escuela de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de Carabobo, Valencia, Venezuela, 2006.