



Implementación, aplicación y evaluación de la herramienta computacional XSEOS en el curso de Termodinámica

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE
ESCUELA DE INGENIERÍA

Martín Fuenzalida¹, Alumno de tercer año

J. Ricardo Pérez-Correa¹, Profesor Titular

José Cuevas-Valenzuela¹, Profesor Asistente Adjunto

¹DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA Y BIOPROCESOS

INTRODUCCIÓN

Termodinámica es un curso fundamental en la formación de los alumnos de la Escuela de Ingeniería UC. En este curso, los alumnos (de segundo y tercer año, sin especialidad definida) desarrollan las competencias para analizar y diseñar, conceptualmente, máquinas térmicas como plantas de poder, motores, sistemas de refrigeración y bombas de calor de gran relevancia para la industria. Una de las competencias fundamentales es aplicar balances de energía y entropía (primera y segunda leyes de la termodinámica) para describir el funcionamiento y eficiencia de máquinas térmicas y determinar, así, parámetros relevantes para su diseño.

Para ello, los alumnos deben conocer, previamente, las propiedades de los fluidos involucrados en la operación de las máquinas térmicas que se están analizando. Dichas propiedades pueden ser obtenidas a partir de bases de datos experimentales (por ejemplo, tablas o programas que compilan este tipo de información)

o calculadas usando modelos termodinámicos estándares. Para el caso de compuestos comunes, como el agua, existe vasta información experimental compilada en tablas que permiten estimar sus propiedades en función de temperaturas y presiones. Sin embargo, existen compuestos para los que, prácticamente, no existe información experimental o ésta no está disponible para los alumnos. En estos casos, se debe recurrir a modelos, como la ecuación de gases ideales o **ecuaciones de estado (EoS)**, como van der Waals (vdW), Peng-Robinson (PR) o Redlich-Kwong (RK). La ecuación de gases ideales es un modelo simple y fácil de aplicar, lo que la convierte en una herramienta de enseñanza de gran valor. Por otro lado, las ecuaciones de estado vdW, PR y RK son modelos más complejos que requieren un análisis más profundo y cuya aplicación y entendimiento exigen el uso de herramientas computacionales sofisticadas. Éstas deben facilitar el proceso de aprendizaje de los alumnos y fortalecer el desarrollo de las competencias del curso.

En este trabajo se describe la implementación, aplicación y evaluación de XSEOS [1], una herramienta computacional fácil de usar y de libre acceso para todos los alumnos. XSEOS es un complemento de Excel que permite calcular propiedades termodinámicas a partir de EoS como vdW, PR y RK y modelos de energía libre de Gibbs que, de otra forma, tomaría bastante tiempo y esfuerzo resolver. Como primera etapa, se analizan en profundidad las características y capacidades de esta herramienta. Luego, se desarrollan nuevas funciones y aplicaciones de XSEOS, útiles para la enseñanza de EoS en el curso de Termodinámica. Finalmente, se evalúa el uso de XSEOS y su contribución al desarrollo de competencias en el curso de Termodinámica del segundo semestre de 2012.

METODOLOGÍA

Con el fin de implementar adecuadamente XSEOS en el curso de Termodinámica, se analizaron previamente sus características, funcionalidades y capacidades. En particular, se probaron cada una de las EoS y funciones integradas en XSEOS y se resolvieron problemas básicos incluidos en el complemento (descritos en Ref. [1]) y otros de mayor complejidad.

En una segunda etapa (también previa al curso) se desarrollaron nuevas funciones de XSEOS para el cálculo de **entalpía y entropía** ideales (h^{ideal} y s^{ideal}) de fluidos, propiedades fundamentales para el uso de EoS. Originalmente, ambas propiedades debían ser obtenidas de literatura e ingresarse manualmente a XSEOS, lo que resultaba lento y engorroso. Las nuevas funciones utilizan una serie de polinomios que permiten obtener h^{ideal} y s^{ideal} para un sinnúmero de compuestos y en un amplio rango de temperaturas. Estos polinomios son dados por las Ecuaciones 1-3 [2]:

$$\frac{C_p^{ideal}}{R} = a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} + a_3 + a_4 T + a_5 T^2 + a_6 T^3 + a_7 T^4 \quad (1)$$

$$s^{ideal} = \int_{T_0}^T \frac{C_p^0}{T} dT - R \ln \frac{P}{P_0} \quad (2)$$

$$h^{ideal} = \int_{T_0}^T C_p^0 dT \quad (3)$$

donde C_p^{ideal} es el calor específico ideal a presión constante, R es la constante de gases ideales, T es la temperatura, T_0 es la temperatura de referencia, P es la presión, P_0 es la presión de referencia y los términos a_i son constantes que dependen del fluido en estudio y que fueron extraídas de Ref. [3]. Estas constantes están integradas a las nuevas funciones de XSEOS, por lo que el usuario sólo debe ingresar el nombre del fluido, la temperatura y la presión, para calcular la entalpía y entropía ideales.

También se desarrollaron nuevas aplicaciones para XSEOS, entre las cuales se encuentra el cálculo de volúmenes de distintos compuestos (por ejemplo, agua y refrigerantes) y la descripción de las propiedades de saturación del oxígeno. La primera permite obtener volúmenes usando distintas EoS, comparar los resultados con datos experimentales y validar la precisión de los cálculos. La segunda permite calcular todas las propiedades necesarias para definir el equilibrio de fases del oxígeno en un rango amplio de temperaturas. Ambas aplicaciones son fundamentales para entender cómo se usa XSEOS y comprender la utilidad de las EoS para calcular propiedades termodinámicas esenciales para la descripción y diseño de diversos sistemas.

Luego, XSEOS fue implementado en el curso de Termodinámica del segundo semestre de 2012. Se capacitó a los alumnos a través de talleres y se facilitaron manuales de instalación y uso de la herramienta. Sus características básicas, y las nuevas funcionalidades desarrolladas, se aplicaron para explicar el uso de ecuaciones de estado como vdW, PR y RK, comprender la importancia del cálculo de propiedades termodinámicas y describir la operación de equipos y máquinas térmicas. En particular, se aplicó XSEOS para resolver

un **ciclo termodinámico de Rankine** complejo, máquina térmica fundamental para la generación de potencia a nivel industrial. Esta aplicación se incluyó en una tarea que los alumnos tuvieron que desarrollar en grupos y entregar hacia el final del curso de Termodinámica.

Finalmente, se evaluó la percepción de los alumnos respecto al uso de XSEOS y su contribución al desarrollo de competencias del curso. Para ello, se utilizó una encuesta especialmente diseñada para identificar las falencias en el proceso de implementación y aplicación de XSEOS y generar propuestas para aprovechar, de mejor manera, sus capacidades en el futuro.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Durante la etapa de implementación de XSEOS, se revisaron profundamente sus características y capacidades. Como resultado, se desarrolló un nuevo manual de instalación y uso de XSEOS, adecuado para su aplicación en el curso. En este nuevo manual se describen y explican cada una de las funciones y ecuaciones de estado incluidas en la herramienta, cuestión que no fue abordada adecuadamente en los documentos de apoyo originales de XSEOS. En particular, se incluyen cuadros resumen que permiten identificar los tipos de EoS, sus comandos en XSEOS y los parámetros requeridos para su uso (Tabla 1); también se muestran las distintas funciones que pueden utilizarse, en conjunto con las EoS para calcular propiedades específicas (Tabla 2). Todas las funciones y EoS fueron testeadas satisfactoriamente.

Tabla 1: Ecuaciones de estado (EoS) incluidas en XSEOS y los comandos y parámetros requeridos para su aplicación.

EoS	Comando XSEOS	Parámetros ^a
van der Waals	vdw	T_c, P_c, k
Redlich-Kwong	rk	T_c, P_c, k
Soave-Redlich-Kwong	srk	T_c, P_c, ω, k
Peng-Robinson	pr	T_c, P_c, ω, k
PR, quadratic mixing rule for b	prb2	T_c, P_c, ω, k
PR, for confined fluids	pra	T_c, P_c, ω, k
Patel-Teja-Valderrama	Ptv	T_c, P_c, ω, z, k
Stryjek-Vera	sv	$T_c, P_c, \omega, K1, k$
Predictive SRK	psrk	$T_c, P_c, c_1, c_2, c_3, a', b', c'$
Mattedi-Tavares-Castier	mtc	V_{inf}, Q_a, B, u_{00}

^a T_c - temperatura crítica, P_c - presión crítica, ω - factor acéntrico, z - factor de compresibilidad, k - parámetro de interacción binaria. Para $k1, c_p, c_2, c_3, a', b', c', V_{inf}, Q_a, B$ y u_{00} consultar referencia [1] o manual desarrollado por los autores.

Tabla 2: Funciones incluidas en XSEOS para el cálculo de propiedades determinadas. Estas funciones y sus parámetros son requeridos para la aplicación de cada EoS.

Función	Propiedad ^a	Parámetros ^a
vl o vv	v	R, T, P, x
soundspeedl o soundspeedv	ρ	
	$\frac{\partial P}{\partial \rho}$	
	$\frac{C_{p,r}}{R}$	
	$\frac{\partial P}{\partial T}$	
resl o resv	$\frac{g_R}{R}$	
	$\frac{h_R}{RT}$	
	$\frac{s_R}{R}$	
	$\frac{C_{p,r}}{R}$	
Inphil o Inphiv	$\ln \varphi$	
P	P	
residual	$\frac{g_R}{R}$	
	$\frac{h_R}{RT}$	
	$\frac{s_R}{R}$	
	$\frac{C_{p,r}}{R}$	

^a P - presión, T - temperatura, v - volumen molar, $C_{p,r}$ - calor específico residual, h_R - entalpía residual, s_R - entropía residual, φ - fugacidad, g_R - energía de Gibbs residual, R - constante de los gases ideales y x - fracción molar.

Las nuevas funciones y aplicaciones desarrolladas para XSEOS fueron utilizadas para calcular el volumen a presión atmosférica de distintos fluidos comúnmente utilizados en ciclos de refrigeración y determinar las curvas de saturación del oxígeno para varias temperaturas. En el primer caso, se determinaron los volúmenes usando la ecuación de gases ideales y tres EoS diferentes (vdW, PR y RK) y se compararon con datos experimentales para conocer la precisión y capacidades de la aplicación. Los resultados para uno de los compuestos analizados (Refrigerante 134a, un compuesto usado en refrigeración doméstica y acondicionamiento de aire en automóviles) son mostrados en la Figura 1. Como puede verse, las EoS vdW, PR y RK correlacionan adecuadamente los volúmenes experimentales, aunque PR y RK presentan una mayor precisión. Por otro lado, la ecuación de gases ideales no conduce a buenos resultados.

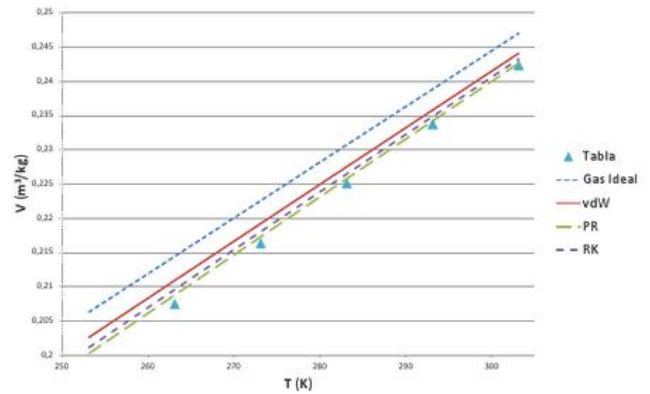


Figura 1: Comparación entre los volúmenes calculados con varias EoS usando XSEOS y aquellos experimentales obtenidos de tablas [4].

Para determinar las curvas de saturación del oxígeno, se utilizó la EoS PR y se resolvió el equilibrio líquido-vapor (ELV) del compuesto a través de la relación fundamental de fugacidades (f) en cada fase ($f(T_s, P_s) = f^o(T_s, P_s)$). Al resolver esta relación se obtuvieron las presiones de saturación (P_s) para distintos valores de temperatura (T_s) y se calcularon volúmenes, entalpías y entropías de saturación, todas propiedades que definen las condiciones en las que el oxígeno se encuentra como mezcla de dos fases (líquido y vapor) en equilibrio. Al graficar los valores calculados (curvas de saturación), y compararlos con datos experimentales [2], se puede ver cómo con una EoS relativamente simple se puede lograr una buena aproximación (Figura 2).

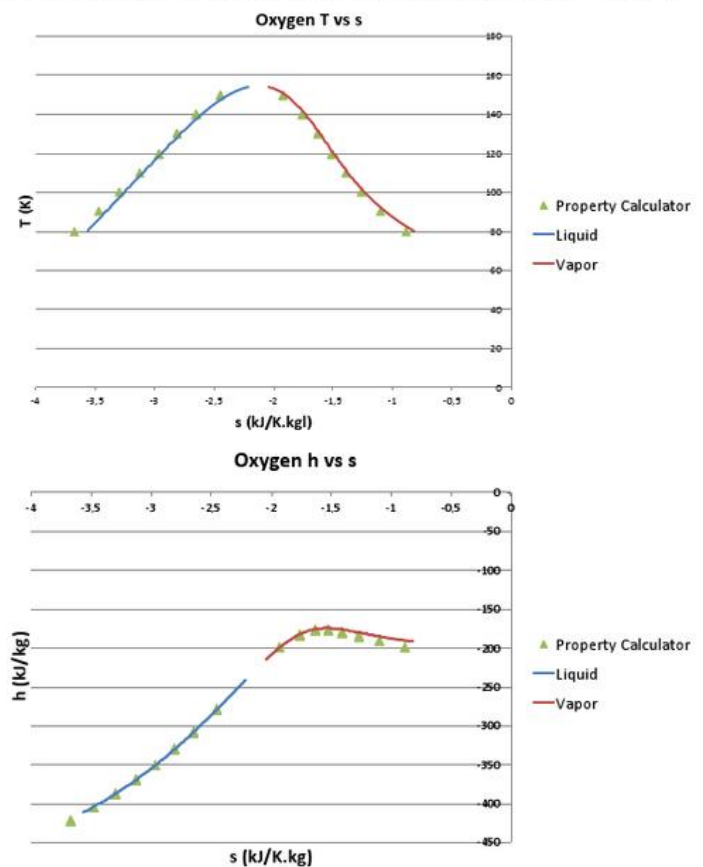


Figura 2: Curvas de saturación del oxígeno: (a) Temperatura-Entropía (b) Entalpía-Entropía.

Luego de la implementación y aplicación de XSEOS en el curso de Termodinámica (que incluyó talleres, actividades y tareas), 55 alumnos (de un total de 83) participaron en la evaluación de esta herramienta. Los resultados de esta evaluación (obtenidos a través de la aplicación de la encuesta descrita en la sección de Metodología) se muestran en la Tabla 3. Los números correspondientes a Evaluación corresponden al promedio de las percepciones de los alumnos respecto a una afirmación en particular (que son medidas en una escala de 1 a 5, donde 1 es muy en desacuerdo y, 5, muy de acuerdo). En general, las percepciones rondan la neutralidad y se presentan desviaciones estándares considerables. En cuanto a la implementación de XSEOS (instalación, uso y comprensión de la herramienta), existe una leve tendencia a una evaluación que demuestra mayor satisfacción (en términos cuantitativos, los valores promedios son cercanos a 4). Esto demuestra que los talleres de capacitación, las actividades complementarias y el manual desarrollados en el curso tuvieron una buena acogida y cumplieron con sus objetivos. Sin embargo, la disparidad en las respuestas (altas desviaciones estándares) indica que aún puede mejorarse bastante en este aspecto. Por ello, los talleres, el manual y las actividades complementarias serán revisados y reestructurados con el fin de lograr una mayor efectividad.

En cuanto a la contribución de XSEOS al desarrollo de competencias, los resultados son buenos, aunque no satisfactorios. Esto puede deberse a varios factores: (i) baja participación en talleres y actividades complementarias para aprender a usar y aplicar XSEOS; (ii) premura en la aplicación de XSEOS (los alumnos tuvieron poco tiempo para familiarizarse con la herramienta); (iii) alta dificultad de los problemas que los alumnos tuvieron que resolver con XSEOS (en particular el correspondiente a la tarea final) y (iv) poco entendimiento del concepto de competencia, su importancia y alcances. Todo lo anterior indica que XSEOS debe implementarse en forma gradual en el curso de Termodinámica, promoviendo una mayor participación en talleres y actividades complementarias y procurando relacionar contenidos y competencias del curso con cada una de las funcionalidades y capacidades de XSEOS.

Tabla 3: Resultados de la aplicación de la encuesta de evaluación de XSEOS en el curso de Termodinámica (promedio de percepciones). Cada alumno asignaba puntajes según la siguiente escala de percepción: (1) muy en desacuerdo, (2) desacuerdo, (3) neutral, (4) de acuerdo o (5) muy de acuerdo.

Afirmación	Evaluación	Desviación Standard
La instalación de XSEOS fue fácil y simple	3,8	1,4
XSEOS es fácil de utilizar	3,2	1,0
Los talleres de XSEOS fueron útiles para comprender su funcionamiento y aplicación	3,5	1,2
Entendí los cálculos que realicé con XSEOS	3,6	1,1
Leí y consulté el manual de XSEOS para la resolución de las tareas	3,4	1,4
(En caso de haber utilizado el manual) El manual fue de gran utilidad para la aplicación de XSEOS	3,4	1,1
Me siento capacitado para utilizar XSEOS en problemas parecidos pero no idénticos a los vistos en tareas y clases	3,1	1,0
XSEOS contribuyó al desarrollo de competencias esenciales para el entendimiento y aplicación de ciclos termodinámicos	2,7	1,1
XSEOS contribuyó al desarrollo de competencias esenciales para el entendimiento y aplicación de ecuaciones de estado	3,0	1,2
XSEOS es una herramienta importante para el proceso de aprendizaje en Termodinámica	2,9	1,0
Yo recomendaría continuar implementando XSEOS en futuros cursos de Termodinámica	3,3	1,2

CONCLUSIONES

Aunque los resultados de la encuesta de evaluación de XSEOS no fueron totalmente satisfactorios, el complemento de Excel, XSEOS, demostró ser una herramienta muy útil para la enseñanza y aplicación de ecuaciones de estado y el cálculo de propiedades fundamentales en Termodinámica. Por esto, se seguirá implementando en futuras versiones del curso, procurando incluir todas las modificaciones necesarias para aprovechar al máximo su potencial. En particular, se desarrollará una nueva estrategia de implementación y aplicación de XSEOS que promueva activamente la participación de los alumnos en su proceso de aprendizaje y que contribuya efectivamente al desarrollo de competencias esenciales para la formación de ingenieros.

PRINCIPIO CIENTÍFICO UTILIZADO

Las ecuaciones de estado (EoS) son muy útiles para el diseño y descripción de procesos industriales que involucran máquinas térmicas y principios termodinámicos. La aplicación de estas EoS exige el uso de herramientas computacionales que permitan realizar cálculos de manera simple y eficiente. Entre estas herramientas se encuentra XSEOS, un complemento de Excel de gran utilidad para adentrarse en el mundo de las EoS y desarrollar aplicaciones con distintos niveles de dificultad.

GLOSARIO

Ciclo de Rankine: Es un ciclo termodinámico que tiene como objetivo la conversión de calor en trabajo, constituyendo lo que se denomina un ciclo de potencia.

Ecuación de Estado: Es una ecuación constitutiva que describe el estado de agregación de la materia como una relación matemática entre la temperatura, la presión y el volumen.

Entalpía: Magnitud termodinámica cuya variación expresa una medida de la cantidad de energía absorbida o cedida por un sistema termodinámico que opera a presión constante.

Entropía: Es una magnitud termodinámica que permite determinar la parte de la energía que no puede utilizarse para producir trabajo.

AGRADECIMIENTOS

Agradecimientos a los alumnos y ayudantes del curso de Termodinámica (IIQ1003), sección dos, segundo semestre año 2012, por su colaboración con esta investigación.

REFERENCIAS

1. CASTIER, M., AMER, M. XSEOS: An evolving tool for teaching chemical engineering thermodynamics, *Education for Chemical Engineers*, Volume 6, Issue 2, April 2011, pp. e62- e70, [citado 15.3.2012] ISSN 1749-7728.
2. SANDLER, S. *Chemical and Engineering Thermodynamics*. 4ta ed. New York: Wiley, 2004, Cap. 6, pp. 28 [citado 20.3.2012] ISBN 0471661740.
3. MCBRIDE, B. *Coefficients for Calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species*. Washington D.C, September 2002, National Aeronautics and Space Administration, Office of Management, Scientific and Technical Information Program, pp. 52-218, [citado 18.6.2012] <<http://hdl.handle.net/2060/20020085330>>.
4. KLEIN, S.A., *Property Calculator* [computer program]. Versión 8.872 3D, 2011, [citado 5.5.2012] <http://www.fchart.com/assets/downloads/setup_property_calculator.exe>.

EQUIPO DE INVESTIGADORES

- 1 Martín Fuenzalida
- 2 Profesor J. Ricardo Pérez-Correa
- 3 Profesor José Cuevas-Valenzuela

