
Comandos de OllinTS

OllinTS se ha programado para resolver los casos donde obligatoriamente se especifique la fracción mol de la mezcla de los cuales se derivan los siguientes casos:

1. Presión-Temperatura
2. Presión-Entalpía
3. Presión-Fracción Vapor
4. Temperatura-Fracción Vapor
5. Temperatura-Entalpía

Los comandos que a continuación se describen deben aplicarse desde un objeto, puede ser el servidor de propiedades o a un caso termodinámico. La sintaxis para estos comandos es que estos deberán estar escritos después de un punto que los separa del objeto al que apuntan (Objeto . Comando).

Comandos del administrador

En esta sección el objeto al cual se aplican los comandos es **Ollin** (*Ollin.Solve()*), que es el servidor de propiedades.

- **AddModel(A, B, C)**: Agrega un modelo termodinámico al administrador y regresa la dirección del modelo creado que puede se puede guardar como variable para acceder más rápidamente al modelo creado, siguiendo estas especificaciones:

A: Especifica el nombre con el cual se identifica al modelo termodinámico y con el cual se almacena en el administrador, este nombre debe ser una cadena de caracteres.

B: Especifica la ecuación de estado a usar en el modelo termodinámico, las opciones son las siguientes.

RKS = Redlich-Kwong-Simplicado

RK = Redlich-Kwong

SRK = Soave-Redlich-Kwong

PR = Peng-Robinson

Cuando se omite este argumento el servidor de propiedades usa el modelo RK por default

C: Designa la ecuación mediante la cual se calcula la presión de vapor dentro del modelo termodinámico. Actualmente OllinTS dispone de una base de datos para las ecuaciones de *Antonie* y *Harlacher*, aunque esta última aun no es recomendable, ya que con las constantes disponibles en nuestra base de datos los resultados son incorrectos. Si se omite este argumento se usa la ecuación de *Antoine*.

- **Add(A, B):** Agrega uno o varios compuestos que estén disponibles en la base de datos, cuando el componente no se encuentra o no coincide con los de la base de datos, se realiza una búsqueda de los compuestos que tengan en el nombre alguna equivalencia y se imprimen en la pantalla. Los nombre deberán escribirse en MAYUSCULAS. Debido a que los componentes no se pueden repetir, se ignoran los compuestos repetidos.

A: Especifica los compuestos que se van a agregar.

B: Especifica el modelo termodinámico al cual se agrega el componente.

- **Remove(A, B):** Elimina uno o varios compuestos que estén disponibles en el modelo termodinámico, en caso de no existir el compuesto se imprime un mensaje de error. De igual manera el nombre deberán ir en MAYUSCULAS.

A: Especifica el o los compuestos que se van a eliminar.

B: Especifica el modelo termodinámico al cual se elimina el componente.

- **AddCase(A, B):** Agrega un caso termodinámico al administrador y regresa la dirección del caso creado que puede guardarse en una variable para acceder más rápidamente, el caso se crea bajo las siguientes especificaciones:

A: Es el nombre con el cual el administrador identificará este caso.

B: Es el nombre del modelo termodinámico al cual se conecta el caso termodinámico, cuando se omite este argumento, el administrador conectará automáticamente este con el primer modelo termodinámico agregado en el administrador.

- **LoadConst(A)**: Carga todos las constantes necesarias para el modelo termodinámico especificado por el argumento “A”, en caso de que no se especifique se cargaran las constantes para todos los modelos que se han creado.
- **Connect (A, B)**: Conecta un modelo termodinámico [A], a un caso termodinámico [B]. Este comando se utiliza cuando se necesita cambiar el modelo termodinámico con el cual se resuelve el caso termodinámico.
- **Solve(A)**: Resuelve el caso termodinámico especificado por el argumento “A”. Cuando no se especifica, se resuelven todos los casos posibles, si no se han definido las condiciones de equilibrio imprime un error.
- **Resumen(A)**: Imprime los resultados de un caso resuelto especificando por el argumento “A”, en caso de que no este resuelto el caso imprime un mensaje de error.
- **Comp()**: Imprime los compuestos que estén en los modelos termodinámicos

Comandos de un caso termodinámico

Para esta sección el objeto al cual se aplican los comandos esta determinado por el nombre que se le asigna al caso termodinámico.

- **P(A)**: Especifica el valor de la presión por el argumento A en Kpa.
- **T(A)**: Especifica el valor de la temperatura por el argumento “A” en K.
- **FracVap(A)**: Especifica la fracción vaporizada definida por el argumento “A”
- **SetX(A)**: Especifica el valor de la fracción mol global definida por el argumento “A”, debe estar en forma de lista, este comando normaliza la concentración.
- **Rx()**: Calcula la fracción mol global a partir de la fracción vaporizada y las concentraciones de cada una de las fases
- **Reset()**: Borra todas las propiedades intensivas que definen las condiciones que se usan para calcular el equilibrio de fases.

- **CasePrint()**: Imprime los valores de las propiedades intensivas generales.
- **XPrint()**: Imprime los valores de las concentraciones en el equilibrio
- **Get(A)**: Regresa un arreglo de los valores especificados por el argumento **A**, los cuales se deberán guardar en una variable o ser usados inmediatamente. No se debe confundir con imprimir en pantalla los resultados. Los nombres de las variables están listadas en el apéndice.

Como resultado tenemos un servidor de propiedades capaz de calcular el equilibrio de fases y propiedades termodinámicas básicas que pueden usarse para construir programas de mayor complejidad.

Cálculo de equilibrio de fases-Ejemplo

A continuación se describe el procedimiento para la aplicación del servidor de propiedades en un ejemplo de calculo del equilibrio de fases.

Ejemplo 1. Equilibrio de fases a presión y temperatura definidos.

Para la mezcla de hidrocarburos de la Tabla 10 se desea conocer la la temperatura a la cual debe operar de evaporación súbita para que la fracción vaporizada se de 0.5, a una presión 101.325 Kpa.

Tabla 1. Composición de la mezcla de hidrocarburos

Compuest o	Fracción Mol
Etano	0.05
Propano	0.15
N-Butano	0.25
N-Pentano	0.20
N-Hexano	0.35

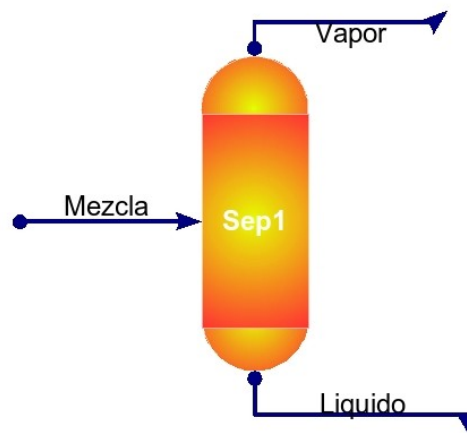


Figura 1. Separador por evaporación súbita

Procedimiento de aplicación: Los comandos pueden ser ejecutados directamente en la consola de comando de Python en *Inicio>Todos los programas>Python 2.4>Python (Comand line)* o se pueden escribir los comandos necesarios y guardar en un archivo de texto simple con la extensión py para ejecutarlos todos juntos.

Desde la consola de comandos de Python se invoca a OllinTS

```
>>> from ollin.Administrator.AdmOllin import Ollin
```

```
Loading Data Base data.db
```

```
\.....
```

Crea un modelos termodinámico y darle nombre

```
>>> PR=Ollin.AddModel("PR","PR","Antoine")
```

Agrega los compuestos de la mezcla

```
>>> Ollin.Add(["ETHANE","PROPANE","N-BUTANE","N-PENTANE","N-HEXANE"],"PR")
```

```
component 100 ETHANE was add to PengRobinson
component 132 PROPANE was add to PengRobinson
component 181 N-BUTANE was add to PengRobinson
component 223 N-PENTANE was add to PengRobinson
component 271 N-HEXANE was add to PengRobinson
```

Crea los casos termodinámicos y guardarlos dentro de una variable

```
>>> SI=Ollin.AddCase("SI")
```

Define la composición del caso termodinámico

```
>>> SI.SetX([0.05,0.15,0.25,0.20,0.35])
```

Especifica las condiciones de equilibrio

```
>>> SI.FracVap(0.5)
```

```
>>> SI.P(101.325)
```

Resuelve el caso

```
>>> Ollin.Solve()
```

```
Solving SI...
Defined Presure
...Defined FracVap
```

Imprime los resultados

```
>>> Ollin.Resumen()
```

```
...:Resumen :...
```

```
FracVap    = 0.5000
Press KPa  = 101.325
```

```

Temp K = 295.273
Z L = 0.006
Z V = 0.977
Z = 0.492
Enthalpy KJ/Kgmol = 2607.51497846
Entropy KJ/KgmolK = 134.195509151
MolWt Kg/kgmol = 67.241
MolWt L Kg/kgmol = 76.538
MolWt V Kg/kgmol = 57.945
...::Component::... << Liq Fraction >> << Vap Fraction >>
ETHANE ==> 0.0046 /___/ 0.0954
PROPANE ==> 0.0395 /___/ 0.2605
N-BUTANE ==> 0.1585 /___/ 0.3415
N-PENTANE ==> 0.2335 /___/ 0.1665
N-HEXANE ==> 0.5640 /___/ 0.1360

```

Para acceder a los resultados de un caso termodinámico se usa el comando `Get` donde especificaremos el nombre de la variable. Por ejemplo, para conocer los valores del volumen molar de la fase gas que esta en la variable `Vvi` se ejecuta el siguiente comando:

```

>>> print SI.Get( Vvi )
[ 24.09860111 23.92423415 23.67905276 23.34669897 22.90005727]

```

Resultados: La temperatura a la cual debe operar el equipo de evaporación súbita es de 295.273 K, a estas condiciones la mezcla se concentran los compuestos mas pesados.

Tabla 2.Composición en el equilibrio

Componente	Composición fase liquida	Composición fase gas
Etano	0.0046	0.0954
Propano	0.0395	0.2605
N-Butano	0.1585	0.3415
N-Pentano	0.2335	0.1665
N-Hexano	0.5640	0.1360

Caso 1. Construcción de un diagrama de fases

En caso se describe como OlliTS puede ser usado para construir diagrama de fases donde se exprese la evolución de la fracción vaporizada de una mezcla de hidrocarburos, desde el punto de burbuja hacia el punto de rocío. Este ejemplo se encuentra dentro de la carpeta de OllinTS en la sección de ejemplos bajo el nombre de *diagrama.py*.

Tabla 3. Composición de la mezcla

Compuesto	Fracción Mol
Etano	0.05
Propano	0.15
N-Butano	0.25
N-Pentano	0.20
N-Hexano	0.35

Procedimiento de aplicación: El diagrama de fases se calcula para una presión de 101.325 Kpa, aproximadamente la temperatura de burbuja es de 240 K y la presión de rocío es de 300 K. Para obtener los datos necesarios para construir el diagrama se calcula el equilibrio en un intervalo de 2 K.

A continuación se describe el código fuente para construir el diagrama de fases:

Invoca OllinTS y pylab

```
from ollin.Administrator.AdmOllin import Ollin
from pylab import *
```

Crea el modelo termodinámico y agrega los compuestos


```
RK=Ollin.AddModel("RK","RK","Antoine")
```

```
Ollin.Add(["ETHANE","PROPANE","N-BUTANE","N-PENTANE","N-HEXANE"],"RK")
```

Crea una corriente y define la composición y la presión de la corriente

```
S1=Ollin.AddCase("S1")
```

```
S1.SetX([0.05,0.15,0.25,0.20,0.35])
```

```
S1.P(101.325)
```

Establece el rango de calculo del equilibrio de fases

```
plot_x = range(240,300,2)
```

Define las variables donde se guardan los datos

```
plot_y0 = []
```

```
plot_y1 = []
```

```
plot_y2 = []
```

```
plot_y3 = []
```

```
plot_y4 = []
```

```
plot_y5 = []
```

Inicia el calculo del equilibrio en el rango de equilibrio

```
for T in plot_x:
```

Define la temperatura y resolver el equilibrio

```
S1.T( T )
```

```
Ollin.Solve()
```

Recupera los valores de la concentración de la fase gas en el equilibrio

```
yf=S1.Get("yf")
```

Guarda los resultado en las variables

```
plot_y0.append( yf[0] )
```

```
plot_y1.append( yf[1] )
```

```
plot_y2.append( yf[2] )
```

```
plot_y3.append( yf[3] )
```

```
plot_y4.append( yf[4] )
```

```
plot_y5.append( S1.Get("FracVap") )
```

Fin de los cálculos

Grafica los resultados

```
plot(plot_x,plot_y0)
plot(plot_x,plot_y1)
plot(plot_x,plot_y2)
plot(plot_x,plot_y3)
plot(plot_x,plot_y4)
plot(plot_x,plot_y5)
```

Define las características del diagrama

```
axis([244,300,0,1])
grid(True)
titles = RK.library
titles.append("FracVap")
legend(titles)
title("Fraccion Vapor Vs T , Y vs T")
xlabel('T(K)')
ylabel('y,FracVap')
```

Muestra el diagrama

```
show()
```

El diagrama que resulta de la ejecución de este código representa la evolución de la concentración de los hidrocarburos en la fase gas.

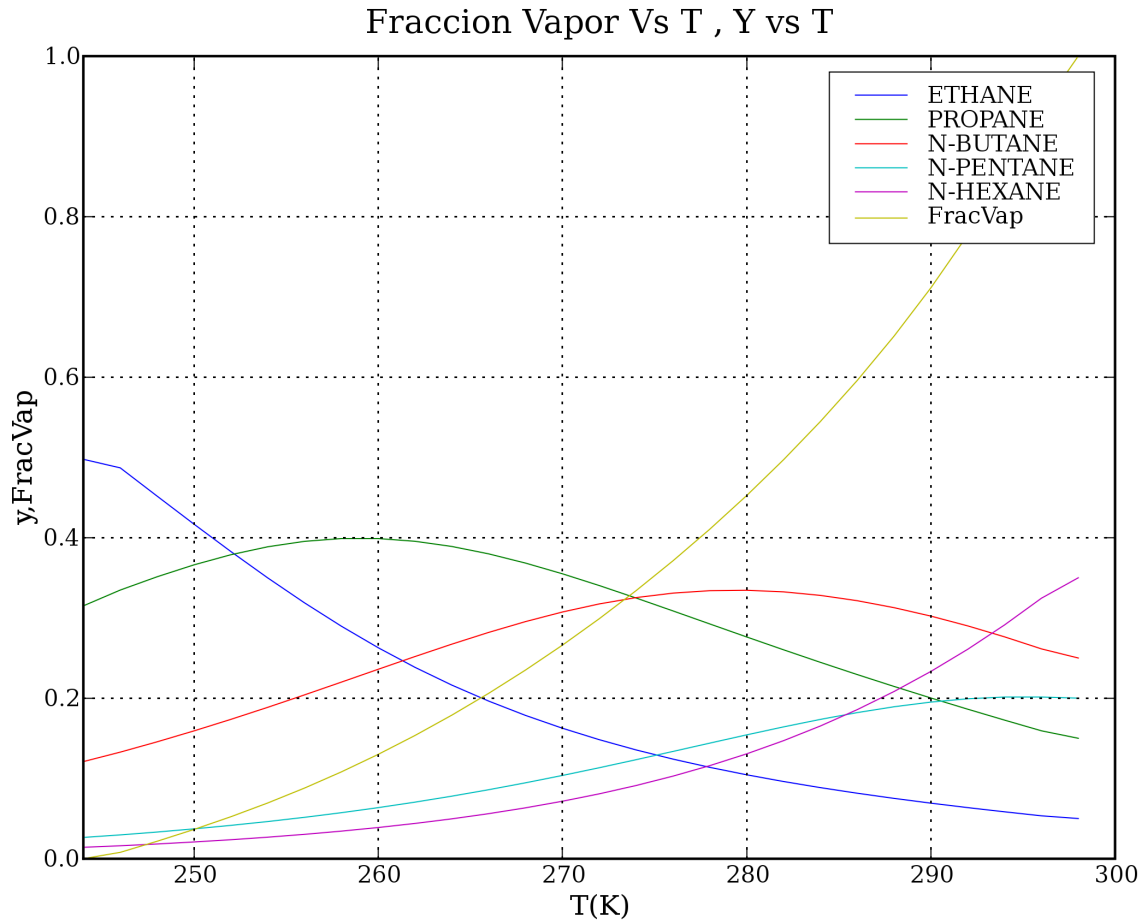


Figura 2. Gráfica del equilibrio de fases

Resultados: En el diagrama se puede observar que en el punto de burbuja hay una alta presencia de etano y conforme aumenta la fracción vaporizada y la presencia de los va en aumento hasta llegar el momento en que la composición en la misma que de la mezcla inicial.

Caso 2. Cálculo de la presión de vapor

Con la ayuda del servidor de propiedades se puede calcular el valor de la presión de vapor corregida, en el siguiente ejemplo se gráfica los valores de la presión de vapor calculados mediante la ecuación de Antoine y la ecuación de Peng-Robinson para el N-Butano y N-Heptano. Este ejemplo se encuentra dentro de la carpeta de OllinTS en la sección de ejemplos bajo el nombre de *Presionv.py*.

Procedimiento de aplicación: Para la ecuación de Peng-Robinson la presión de vapor esta definida en un compuesto puro como el punto donde el valor de las fugacidades para cada fase es la misma. El código mediante el cual se realizan estas gráficas se escribe a continuación.

Invoca a OllinTS, pylab y la herramienta de interpolación lagrange

```
from ollin.Administrator.AdmOllin import Ollin
from ollin.Tools.tools import lagrange
from pylab import *
```

Crea un modelo y un caso termodinámico

```
RK=Ollin.AddModel("RK","PR")
S1=Ollin.AddCase("S1")
Ollin.Add(["N-HEPTANE"],"RK")
S1.SetX([1,])
```

Define el rango de temperaturas

```
Ti = range(300,450,10)
```

Crea la variables para guardar los resultados.

```
Ppi=[]
Ppv=[]
```

Inicia el calculo de la presión de vapor

```
for T in Ti:
```

Crea las variables para guardar las iteraciones

```
df=[]  
P= []
```

Define las condiciones de iniciales y resolver el equilibrio

```
S1.P(101.325)  
S1.T(T)  
Ollin.Solve()
```

Recuperar los valores iniciales

```
Pvi=S1.Get("PreVap")[0]  
Ppi.append(Pvi)  
fl=S1.Get("fl_i")[0]  
fv=S1.Get("fv_i")[0]  
P.append(S1.Get("P"))  
df.append(fl-fv)  
S1.P(Pvi)  
Ollin.Solve()  
fl=S1.Get("fl_i")[0]  
fv=S1.Get("fv_i")[0]  
P.append(S1.Get("P"))  
df.append(fl-fv)
```

Calcular el error mediante el valor de las fugacidades

```
E = fl-fv
```

Inicia las iteraciones para calcular la presión de vapor

```
while abs(E)>1e-3:  
    Pi = lagrange(df,P,0)  
    print Pi  
    S1.P(Pi)  
    Ollin.Solve()  
    fl=S1.Get("fl_i")[0]  
    fv=S1.Get("fv_i")[0]  
    P.append(S1.Get("P"))  
    E = fl-fv
```

Agrega los resultados a la lista de valores reales

```
df.append(E)
Ppv.append(Pi)
```

Grafica los resultado y define las características de la grafica

```
plot(Ti,Ppi)
plot(Ti,Ppv)
grid(True)
titles = ["Antoine","Peng-Robinson"]
legend(titles)
title("Presion de vapor de N-Heptano")
ylabel('P (Kpa)')
xlabel('Temperatura (K)')
```

Muestra la grafica

```
show()
```

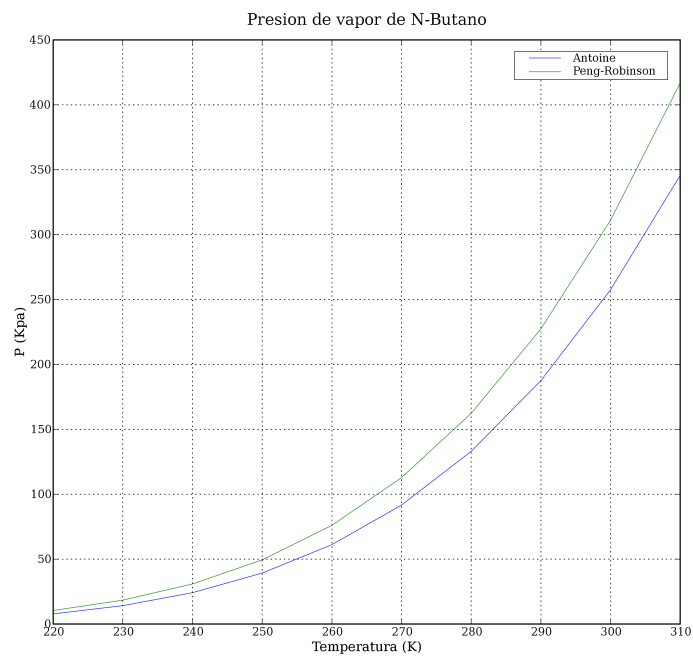


Figura 3. Presión de vapor de N-Butano

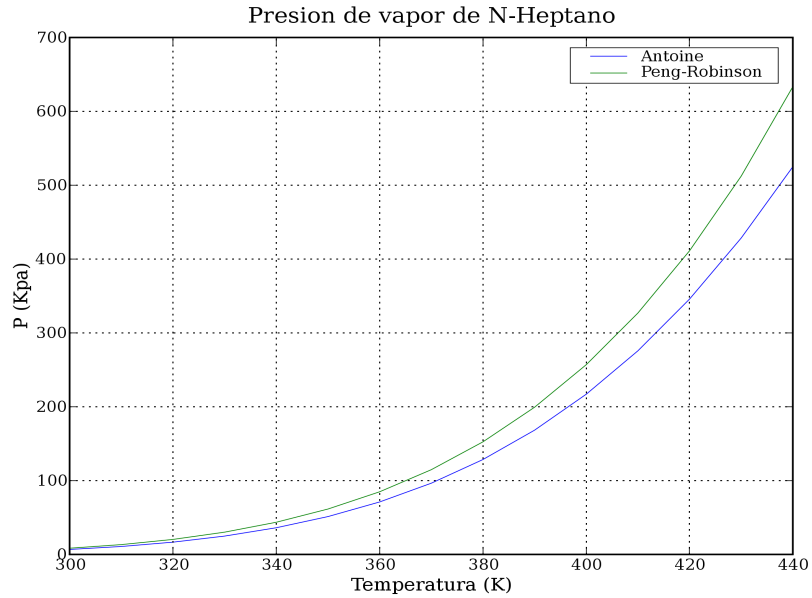


Figura 4. Presión de vapor de N-Heptano

Resultados: En ambas gráficas se observa como el valor de la presión de vapor calculada mediante la ecuación de estado cúbica es mayor a la calculada mediante la ecuación de Antoine, además de que la desviación entre ambos métodos es cada vez mas amplia conforme se acerca al punto critico.

Caso 3. Diseño de un separador de fases

L-V

A la salida de un reactor de producción de benceno a partir de Tolueno, se tiene un separador de fases tipo flash del cual se desea conocer la fracción vaporizada y las dimensiones del equipo para recuperar el benceno para un flujo de la mezcla de 1919.605 Kgmol/hr a un temperatura de 311.15 °K y una presión de 3206.062 Kpa. La composición de la alimentación es la siguiente:

Tabla 4. Composición de la mezcla de aromáticos

Compuesto	Fracción Mol
Hidrógeno	0.36602
Metano	0.54813
Benceno	0.062618
Tolueno	0.021503
Difenilo	0.000945

Procedimiento de aplicación: Las dimensiones del tanque Flash se determinan mediante el volumen del líquido que se procesa, estableciendo un tiempo de residencia de 5 minutos. Para un tanque vertical se recomienda que la altura del tanque sea la altura que ocupa el líquido más tres veces el diámetro y la relación altura sobre el diámetro sea 4. Este ejemplo se encuentra dentro de la carpeta de OllinTS en la sección de ejemplos bajo el nombre de TanqueFlash.py.

Por lo que la longitud del tanque flash sera:

$$L=3D+\frac{V_L}{\pi D^2} \quad (18)$$

Y el diámetro:

$$D = \frac{L}{4} \quad (18)$$

Agrupando y operando ambas ecuaciones se obtiene:

$$L = \sqrt[3]{\frac{256V_L}{\pi}} \quad (18)$$

Donde:

L = Longitud del Tanque

D = Diámetro del tanque

V_L = Volumen del líquido que reside en el tanque

La secuencia de comandos para resolver el problema planteado esta descrito detalladamente a continuación, en este ejemplo ademas de OllinTS, se necesitan invocar el valor numérico de π , la variable array y método power.

Resolviendo esto con OllinTS tenemos el siguiente código:

Invoca a OllinTS, la constante π , y la variable array

```
from ollin.Administrator.AdmOllin import Ollin
from Numeric import array,power,pi
```

Crea un modelo termodinámico y define los componentes

```
PR=Ollin.AddModel("PR","PR")
Ollin.Add(["HYDROGEN","METHANE","BENZENE","TOLUENE","DIPHENYL"],"PR")
```

Crea un caso termodinámico y define las condiciones

```
S1=Ollin.AddCase("S1")
S1.SetX([0.366021,0.548913,0.062618,0.021503,0.000945])
S1.T(38+273.15)
S1.P(3206.062)
```

Resuelve el caso termodinámico e imprime los resultados

```
Ollin.Solve("SI")  
Ollin.Resumen("SI")
```

Calcula el caudal de líquido, el volumen residente, la longitud y diámetro del tanque

```
L = (1-SI.Get("FracVap"))*1919.605  
Gv = (L*SI.Get("MolWt_l"))/( SI.Get("LiqDen")*60 )  
Vr = Gv*5  
Lon = power((256*Vr/pi),0.333333)  
Dia = Lon/4
```

Se imprimen los resultados

```
print "Longitud", Lon  
print "Diametro",Dia
```

La salida de la ejecución de este código es la siguiente:

```
Loading Data Base data.db  
\.....  
OllinTS has been loaded  
  
component 19 HYDROGEN was add to PengRobinson  
component 61 METHANE was add to PengRobinson  
component 242 BENZENE was add to PengRobinson  
component 286 TOLUENE was add to PengRobinson  
component 429 DIPHENYL was add to PengRobinson  
Solving SI...  
Defined Temperature  
...Defined Presure  
  
...:Resumen :..  
  
FracVap    = 0.9138  
Press KPa  = 3206.062  
Temp K     = 311.150  
Z L        = 0.132  
Z V        = 1.031
```

$$Z = 0.954$$

$$\text{Enthalpy KJ/Kgmol} = 6499.86626874$$

$$\text{Entropy KJ/KgmolK} = 236.251421265$$

$$\text{MolWt Kg/kgmol} = 16.562$$

$$\text{MolWt L Kg/kgmol} = 74.482$$

$$\text{MolWt V Kg/kgmol} = 11.098$$

...:Component:... << Liq Fraction >> << Vap Fraction >>

HYDROGEN ==> 0.0164 |____| 0.3990

METHANE ==> 0.1051 |____| 0.5908

BENZENE ==> 0.6317 |____| 0.0089

TOLUENE ==> 0.2359 |____| 0.0013

DIPHENYL ==> 0.0110 |____| 0.0000

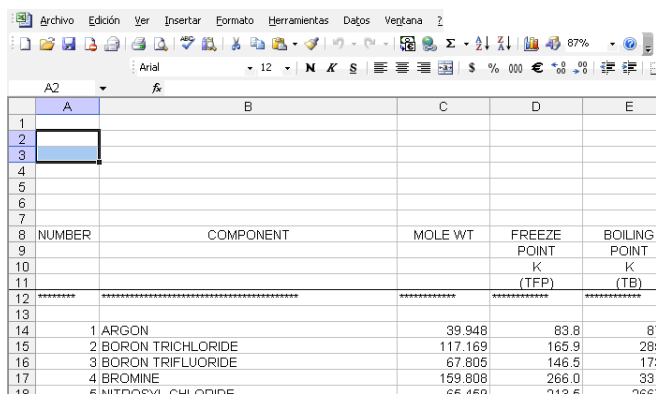
$$\text{Longitud(m)} = 4.6729013708$$

$$\text{Diametro(m)} = 1.1682253427$$

Resultados: A las de operación del tanque flash se observa que la mayor cantidad de hidrógeno y metano se encuentra en la fase gas, por lo que el benceno se encuentra en la fase liquida. Además resultan las dimensiones de un diámetro de 1.1682 y una altura de 4.6729 mtrs. efectivamente,

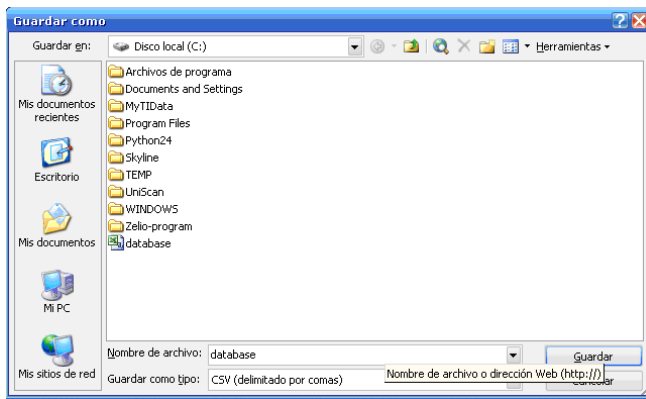
Creación de la base de datos

A continuación se describe el procedimiento para crear una base de datos con formato SQL a partir de una hoja de cálculo con la ayuda de una aplicación gráfica para SQLite llamada SQLite Data Browser [SQLbrow,2007].

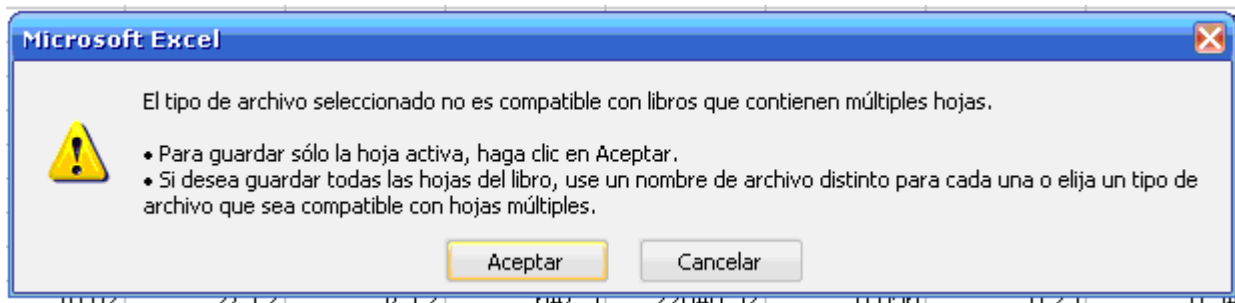


NUMBER	COMPONENT	MOLE WT	FREEZE POINT K (TFP)	BOILING POINT K (TB)
1	ARGON	39.948	83.8	87.3
2	BORON TRICHLORIDE	117.169	165.9	284.7
3	BORON TRIFLUORIDE	67.805	146.5	173.8
4	BROMINE	159.808	266.0	331.9
5	NITROSYL CHLORINE	65.454	213.5	266.1

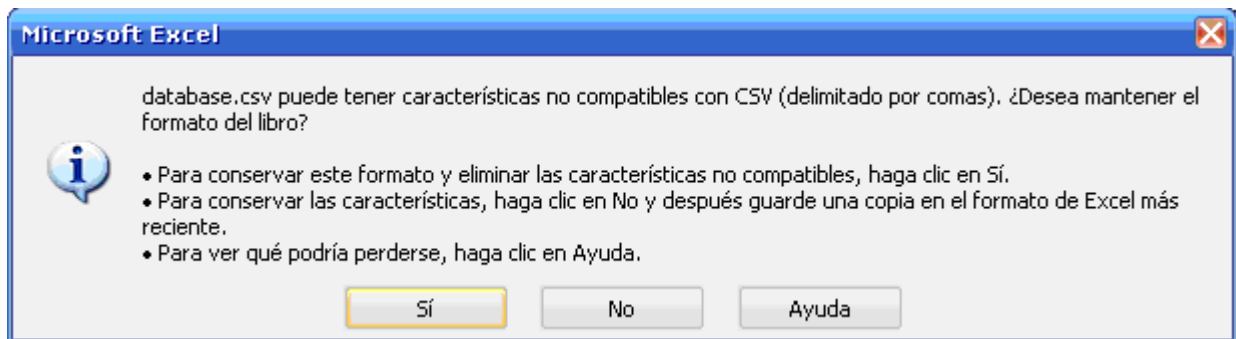
Inicialmente se dispone de la hoja de cálculo que contiene todos los datos necesario, los cuales serán guardados en en una hoja de cálculo en blanco, las columnas no deberán tener ningún dato extra. Por ejemplo el nombre de la columna.



Guarda la nueva hoja de cálculo con el formato CSV (delimitado por comas)el cual puede ser usado por SQLite Database Browser



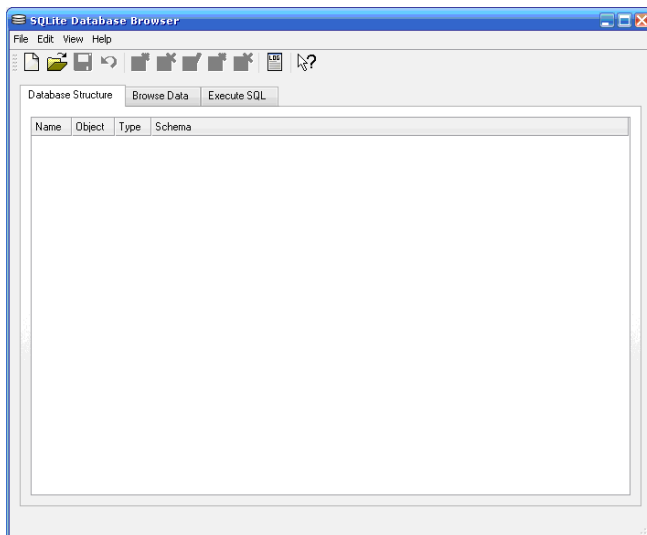
Esta ventana aparece para advertirnos que estamos seleccionando un formato que no soporta hojas múltiples cuando se guarda la hoja de cálculo. Se selecciona la opción “Aceptar” para continuar con el proceso.



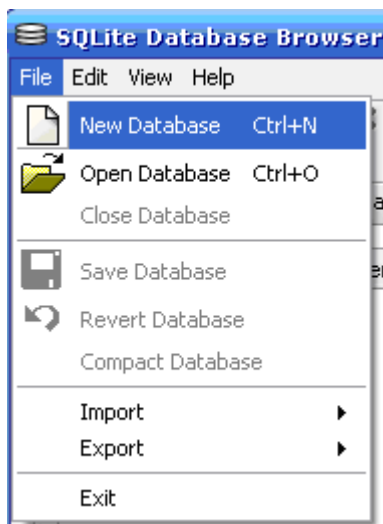
Cuando aparece esta venta, se presiona la opción “Sí” para guardar la base de datos en el formato CSV SQLite Database Browser.



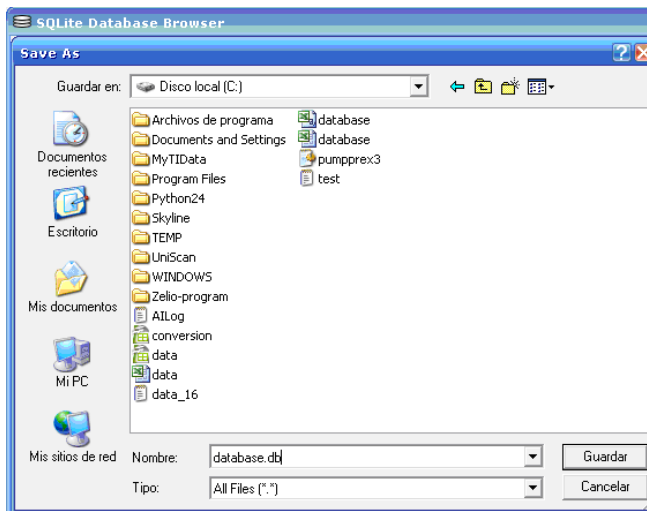
Una vez creado el archivo CSV se ejecuta SQLite Database Browser, el cual también es un programa de código abierto. Puede descargarse de la pagina www.souceforge.net



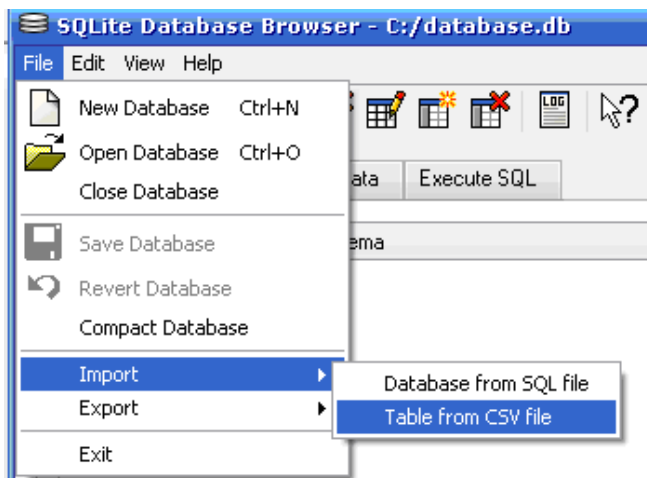
SQLite Database Browser, permite crear la base de datos de una manera muy fácil, ya que no se necesitan tener conocimientos de SQL. Además de se acerca mucho a la apariencia de una hoja de cálculo.



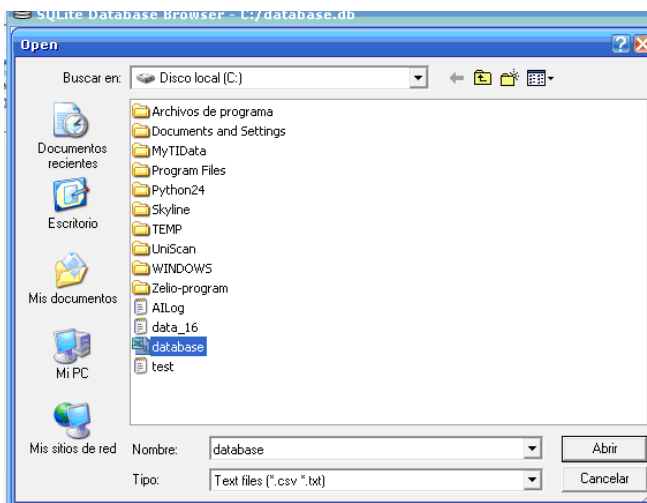
A continuación se crea una base de datos donde insertaremos nuestra información. Esto se puede hacer a través del menú en “File>New DataBase [Ctrl+N]”



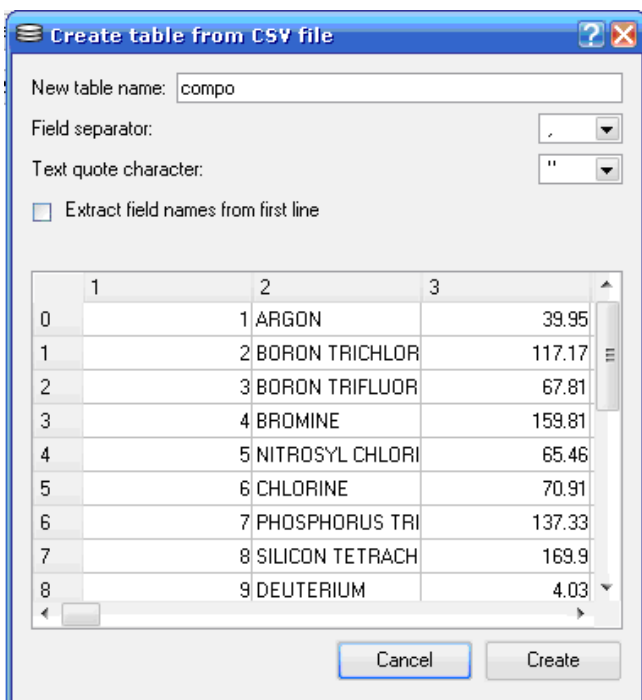
Al seleccionar la opción guardar aparece esta ventana que permite seleccionar el directorio y el nombre para la base de datos. Para este ejemplo se usa el nombre de database.db.



A continuación se importa la hoja de cálculo creada anteriormente con el formato. Para seleccionar el directorio y el nombre del archivo a importar se selecciona el menú File>Import>Table from CSV file.



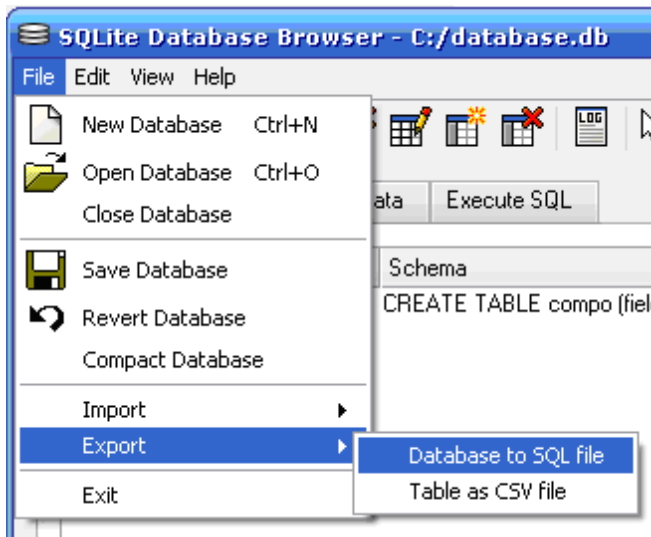
Por medio de esta ventana se selecciona el directorio y el nombre del archivo. Para este ejemplo se el archivo tiene el nombre database.csv y finalmente se selecciona la opción abrir.



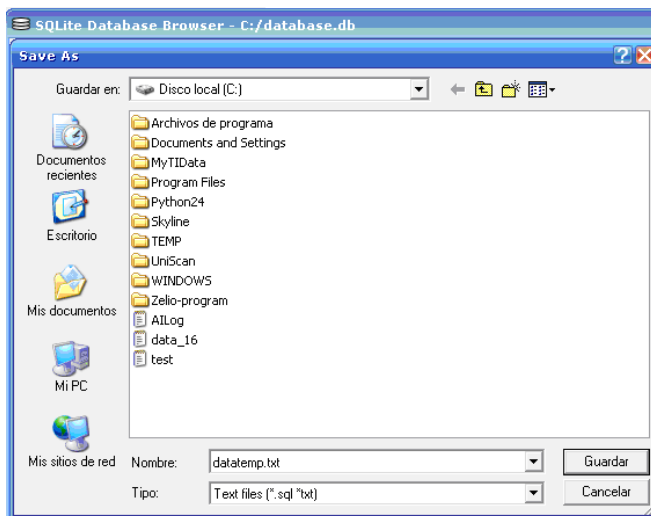
Esta ventana muestra el resultado del proceso de importación del archivo CSV. En el campo "New table name:" se escribe nombre "compo", este es el nombre con el cual OllinTS accesa a la base de datos. Para crear la base de los datos importados s selecciona la opción "Create"



Esta venta confirma que se ha importado la información. Ahora se procede a dar los nombres correctos a los campos de información de la base de datos.



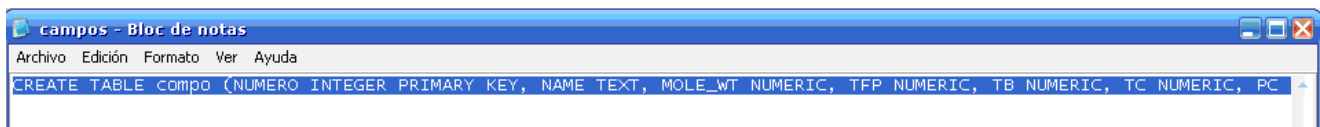
Se exporta la base de datos en formato de SQL, para modificar los nombre de los campos más fácilmente. Seleccionamos la acción: File>Export>Database to SQL file.

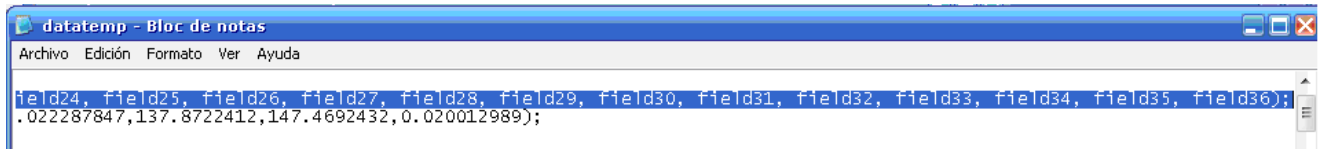


En la venta se da el nombre a la base de datos con el formato “txt”, para este ejemplo el nombre es “datatemp.txt” y se selecciona la opción “Guardar”

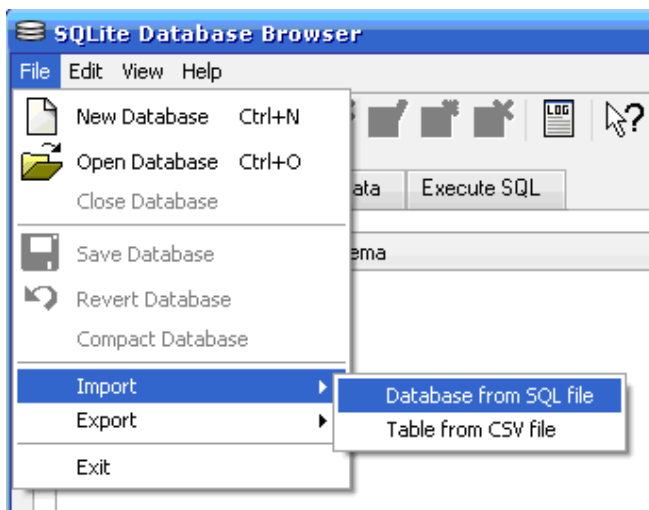


Esta ventana indica que la información se a exportado satisfactoriamente.

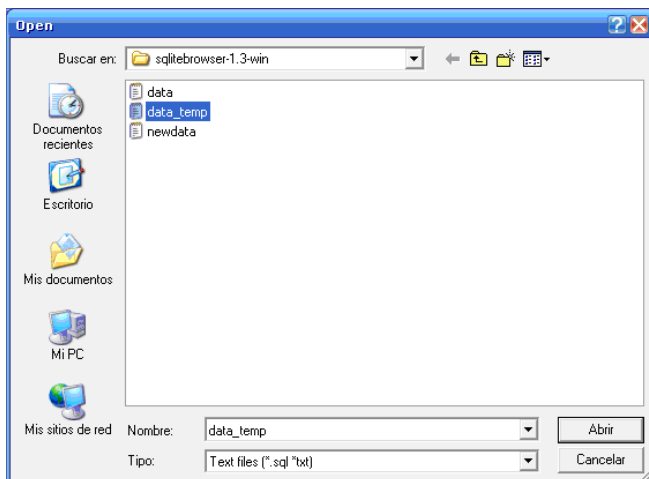




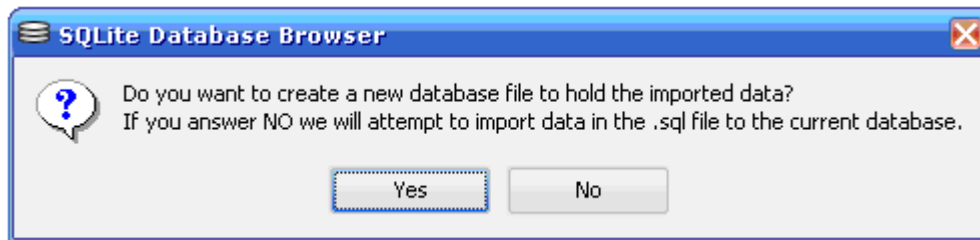
A continuación se abre el archivo “datatemp.txt” y el archivo “campos.txt” que contiene los nombre de los campos tal como los necesita OllinTS del cual se copia el renglón que empieza en “CREATE” y termina en “ ; ”, lo remplazaremos en el archivo “datatemp.txt” por el renglón que empieza en “CREATE” y termina en “ ; ”. Al final guardamos el archivo “datatemp.txt”.



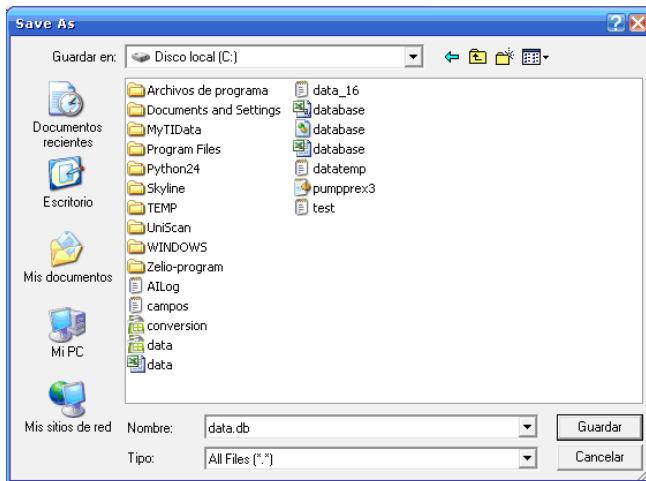
Para importar la base de datos corregida, se selecciona en el menú de SQLite Data Browser : File>Import>DataBase from SQL file.



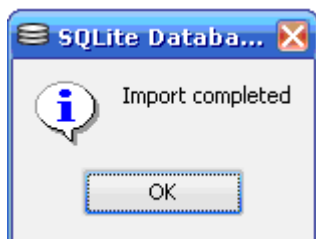
Por medio de esta ventana se selecciona el archivo modificado “datatemp.txt”, y se selecciona la opción “Abrir”.



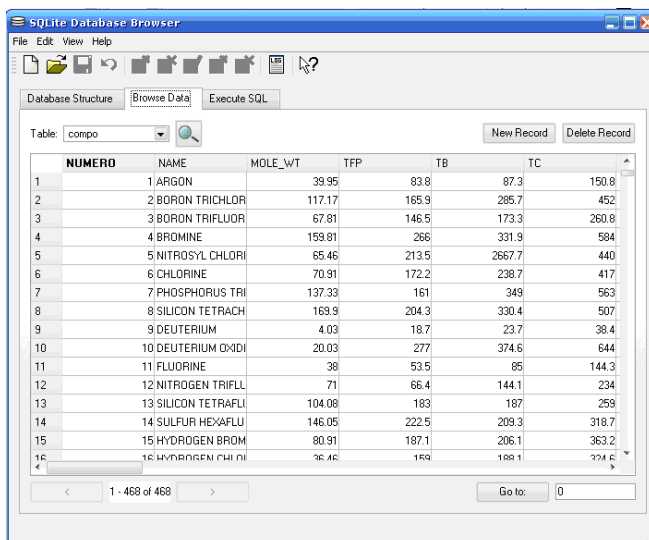
Esta ventana solo aparece cuando se tiene abierta otra base de datos, para lo cual se selecciona la opción “YES” para guardar la información en un nuevo archivo.



Al nuevo archivo se le da el nombre “data.db” ya que este es el nombre con el cual OllinTS llama al archivo contenedor de la base de datos.



Esta ventana confirma que la creación de la base de datos se completo correctamente.



Al final se pudo revisar que la base de datos este completa y sin errores en la pestaña “Browse Data”

La nueva base de datos debe ser copiada a la carpeta DataBase que se encuentra dentro de la carpeta de OllinTS.

para el sistema operativo Windows XP es C:\Python24\OllinTS\DataBase

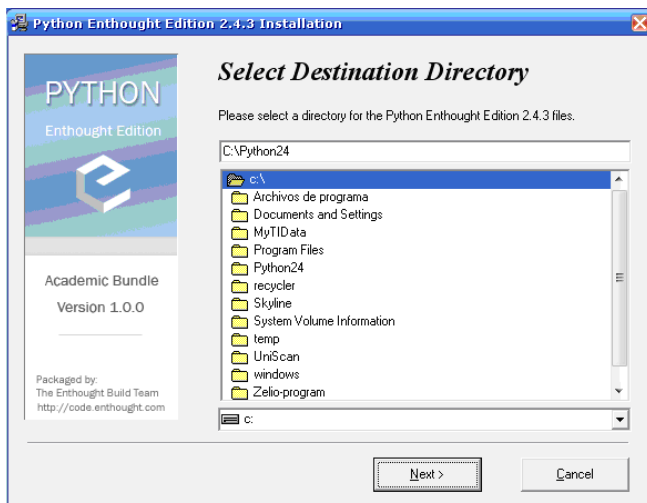
Apéndice C: Procedimiento de instalación en Windows XP

Para la instalación de OllinTS en Windows usaremos una versión modificada de Python(Python Enthought Edition) la cual incluye todas las librerías necesarias para ejecutar OllinTS, esta versión puede descargarse de la pagina <http://code.enthought.com/enthon/>. A continuación describiremos el proceso para instalar Python y OllinTS.

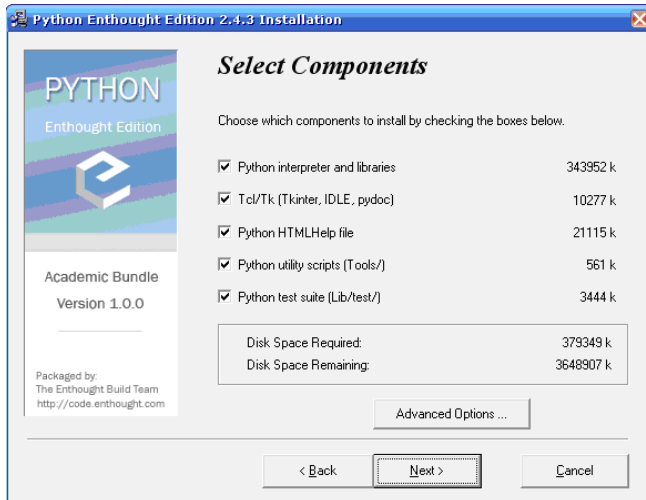


enthon-python2.4-1.0.0

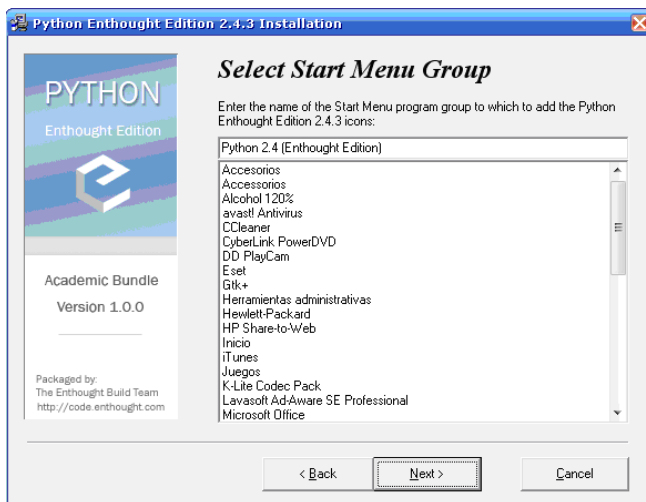
Ejecutar el programa de instalación de Python con el nombre “enthon-python2.4-1.0.0”.



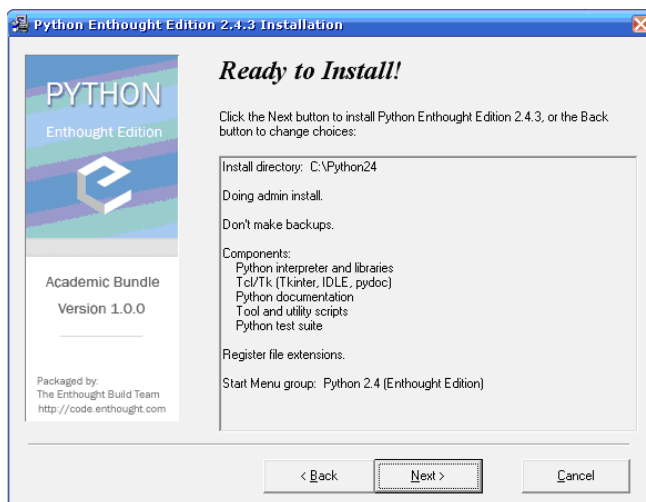
Se selecciona la dirección de instalación, conviene dejarlo como viene configurado(<C:\Python24>), Seleccionar “Next”



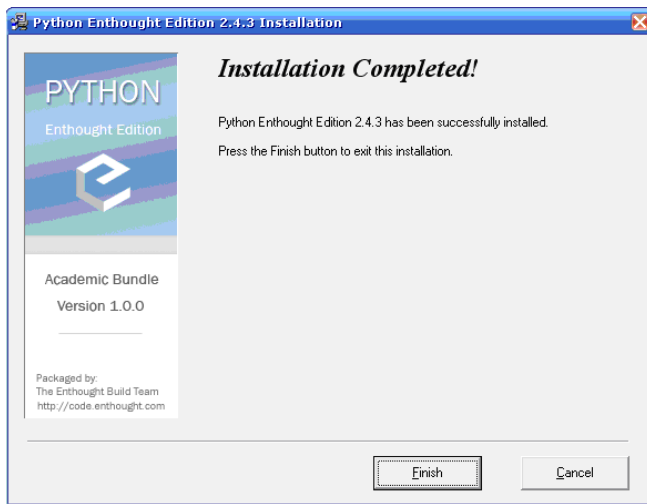
En esta ventana se seleccionan los componentes que se instalar con Python, se seleccionan todas las casillas. Seleccionar “Next”



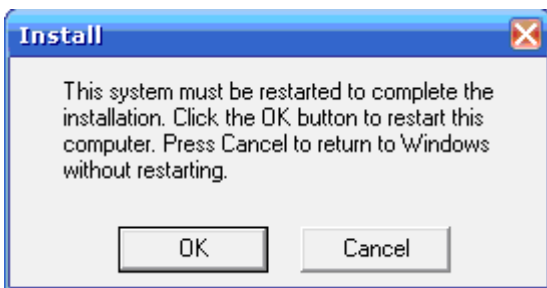
En esta venta se seleccionar el grupo donde se crearan los accesos directos, se recomienda usar los predeterminados. Seleccionar “Next”



En esta ventana se muestran las opciones seleccionadas antes de realizar la instalación. Seleccionar “Next”



En esta ventana se confirma que Python se ha instalado.



Finalmente se reinicia la computadora para completar la instalación.

Al terminar la instalación de Python, se procede a copiar la carpeta de OllinTS a la carpeta de Python, la cual tiene la ruta C:\Python24\. Ahora se puede ejecutar OllinTS.

Nomenclatura de OllinTS

Tabla 5. Nomenclatura de OllinTS

Variable	Unidades	Especificaciones
T	$^{\circ}K$	Temperatura
P	Kpa	Presión
FracVap	-	Fracción vaporizada
xf	-	Fracción mol fas líquida
yf	-	Fracción mol fase gas
x	-	Fracción mol de la mezcla
Zl	-	Factor de compresibilidad fase líquida
Zv	-	Factor de compresibilidad fase gas
CoefPureVap	-	Coeficiente de fugacidad de los compuestos puros fase gas- Arreglo numérico
CoefMixVap	-	Coeficiente de fugacidad de los compuestos en mezcla fase gas- Arreglo numérico
CoefMixVLiq	-	Coeficiente de fugacidad de los compuestos en mezcla fase líquida- Arreglo numérico
Vvi	$\frac{M^3}{Kgmol}$	Volumen de los compuestos puros fase gas- Arreglo numérico
Vli	$\frac{M^3}{Kgmol}$	Volumen de los compuestos puros fase líquida- Arreglo numérico
Vv	$\frac{M^3}{Kgmol}$	Volumen de la fase gas

Tabla 5. Nomenclatura de OllinTS(continuación)

Variable	Unidades	Especificaciones
Vl	$\frac{M^3}{Kgmol}$	Volumen de los compuestos puros fase líquida
ActivityVap	-	Coeficiente de actividad de los compuestos puros fase gas - Arreglo numérico
ActivityLiq	-	Coeficiente de actividad de los compuestos puros fase líquida - Arreglo numérico
PreVap	KPa	Presion de Vapor - Arreglo numérico
Ki	-	Coeficiente de distribución- Arreglo numérico
AlphaT	-	Función de temperatura
Tr	-	Temperatura reducida
fw	-	Función del factor acéntrico y la temperatura reducida - Arreglo numérico
a	-	Factor “a” para la ecuación cúbica de estado
A	-	Factor A para la ecuación cúbica de estado
B	-	Factor B para la ecuación cúbica de estado
dadT	-	Primera derivada del factor “a” para la ecuación cúbica de estado
d2adT2	-	Segunda derivada del factor “a” para la ecuación cúbica de estado
MolWt	$\frac{Kg}{Kgmol}$	Masa molecular media de la mezcla
MolWt_l	$\frac{Kg}{Kgmol}$	Masa molecular media de la fase líquida
MolWt_v	$\frac{Kg}{Kgmol}$	Masa molecular media de la fase vapor
LiqDen	$\frac{Kg}{M^3}$	Densidad líquida promedio
Cp_v	$\frac{KJ}{Kgmol^{\circ}K}$	Capacidad calorífica a presión constante fase vapor- Arreglo numérico
Cv_v	$\frac{KJ}{Kgmol^{\circ}K}$	Capacidad calorífica a volumen constante fase vapor- Arreglo numérico

Tabla 5. Nomenclatura de OllinTS(continuación)

Variable	Unidades	Especificaciones
HF	$\frac{KJ}{Kgmol}$	Energía estándar de formación
GF	$\frac{KJ}{Kgmol}$	Energía libre de Gibbs de formación
G	$\frac{KJ}{Kgmol}$	Energía libre de Gibbs de la mezcla
H	$\frac{KJ}{Kgmol}$	Entalpía de la mezcla
S	$\frac{KJ}{Kgmol}$	Entropía de la mezcla
U	$\frac{KJ}{Kgmol}$	Energía interna de la mezcla
AFree	$\frac{KJ}{Kgmol}$	Energía de libre de Helmholtz
G_v	$\frac{KJ}{Kgmol}$	Energía libre de Gibbs fase gas
G_l	$\frac{KJ}{Kgmol}$	Energía libre de Gibbs fase líquida
H_v	$\frac{KJ}{Kgmol}$	Entalpía de la fase gas
H_l	$\frac{KJ}{Kgmol}$	Entalpía libre de la fase líquida
S_v	$\frac{KJ}{Kgmol^{\circ}K}$	Entropía de la fase gas
S_l	$\frac{KJ}{Kgmol^{\circ}K}$	Entropía libre de la fase líquida
U_v	$\frac{KJ}{Kgmol}$	Energía interna de la fase gas
U_l	$\frac{KJ}{Kgmol}$	Energía interna de la fase líquida
AFree_v	$\frac{KJ}{Kgmol}$	Energía de libre de Helmholtz de la fase gas

Variable	Unidades	Especificaciones
AFree_l	$\frac{KJ}{Kgmol}$	Energía de libre de Helmholtz de la fase líquida

Tabla 6. Nomenclatura de la base de datos

Nombre en OllinTS Ollin.DataBase.Sy sData	Nombre en la Base de datos	Descripción	Unidades
ZC	ZC	Factor de compresibilidad critico	-
OMEGA	OMEGA	Factor acéntrico de Pitzer	-
<i>LIQDEN</i>	<i>LIQDEN</i>	Densidad líquida	
<i>TDEN</i>	<i>TDEN</i>	Temperatura de la densidad líquida	°K
<i>DIM</i>	<i>DIM</i>	Momentum de dipolo	-
CP_A	CP_A	Coeficiente de capacidad calorífica de gas ideal A	$\frac{KJ}{Kgmol^{\circ}K}$
CP_B	CP_B	Coeficiente de capacidad calorífica de gas ideal B	$\frac{KJ}{Kgmol^{\circ}K}$
CP_C	CP_C	Coeficiente de capacidad calorífica de gas ideal C	$\frac{KJ}{Kgmol^{\circ}K}$
CP_D	CP_D	Coeficiente de capacidad calorífica de gas ideal D	$\frac{KJ}{Kgmol^{\circ}K}$
VL_B	VISC_LIQ_B	Coeficiente de Viscosidad de líquido B	C_p
<i>VL_C</i>	<i>VISC_LIQ_C</i>	Coeficiente de Viscosidad de líquido C	C_p
<i>DELHF</i>	<i>DEL_HF</i>	Energía de formación estándar	$\frac{KJ}{Kgmol}$
<i>ANT_A</i>	<i>ANTOINE_VP_A</i>	Coeficiente A para para la ecuación de Antoine	$P=mmHg$ $T=^{\circ}K$

Tabla 6. Nomenclatura de la base de datos(continuación)

Nombre en OllinTS Ollin DataBase.Sy sData	Nombre en la Base de datos	Descripción	Unidades
<i>ANT_B</i>	<i>ANTOINE_VP _B</i>	Coeficiente B para para la ecuación de Antoine	$P=mmHg$ $T=^{\circ}K$
<i>ANT_C</i>	<i>ANTOINE_VP _C</i>	Coeficiente C para para la ecuación de Antoine	$P=mmHg$ $T=^{\circ}K$
<i>ANT_MAX</i>	<i>TMAX</i>	Temperatura máxima para la ecuación de Antoine	$^{\circ}K$
<i>ANT_MIN</i>	<i>TMIN</i>	Temperatura mínima para la ecuación de Antoine	$^{\circ}K$
<i>HAR_A</i>	<i>HARLACHER_VP_A</i>	Coeficiente A para para la ecuación de Harlacher	$P=mmHg$ $T=^{\circ}K$
<i>HAR_B</i>	<i>HARLACHER_VP_B</i>	Coeficiente B para para la ecuación de Harlacher	$P=mmHg$ $T=^{\circ}K$
<i>HAR_C</i>	<i>HARLACHER_VP_C</i>	Coeficiente C para para la ecuación de Harlacher	$P=mmHg$ $T=^{\circ}K$
<i>HAR_D</i>	<i>HARLACHAR_VP_D</i>	Coeficiente D para para la ecuación de Harlacher	$P=mmHg$ $T=^{\circ}K$
<i>HV</i>	<i>HV</i>	Calor de vaporización estándar	$\frac{KJ}{Kgmol}$
<i>RK_A</i>	<i>RK_ac</i>	Constante ac para el caso Redlich-Kwong	-
<i>RK_B</i>	<i>RK_b</i>	Constante b para el caso Redlich-Kwong	-

Tabla 6. Nomenclatura de la base de datos(continuación)