

PROYECTOS PROFESIONALES Y ACADEMICOS

DANIEL BELLO

DIC 2024

Desarrollo de una herramienta en Excel con VBA para la planta Acetilos

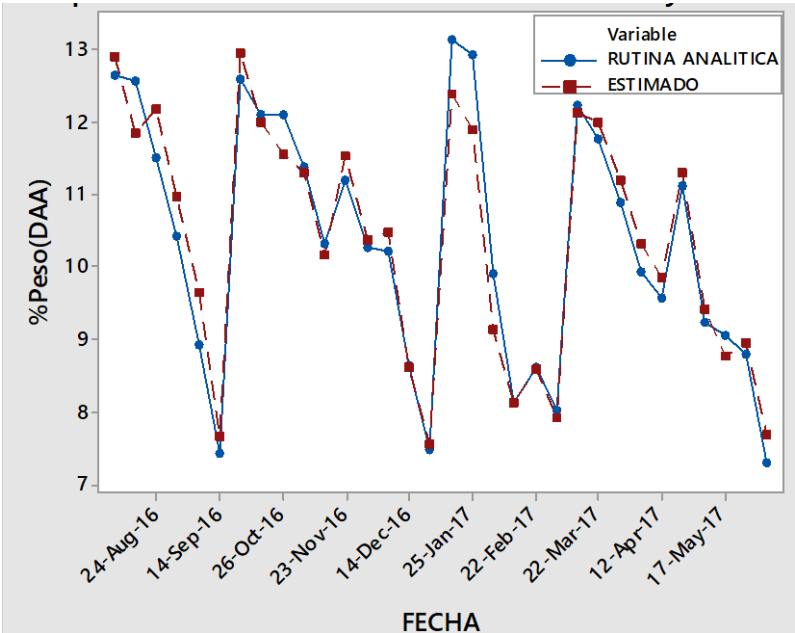


Gráfico 1. Comparación de valores entre rutina analítica y estimaciones del reactor R-3301 durante un año.

Imagen 5. Captura de datos de capa acuosa del FT-3301.

La interfaz de usuario muestra la captura de datos para el reactor FT-3301. Incluye un campo para el nivel de capa acuosa en mililitros, una selección de color de la muestra tomada (Verde, Verde Claro, Rojiza, Amarilla) y un campo para las características de la muestra y/o comentarios. Se visualiza la estructura molecular de OM+ V1.0 y el logo de Celanese.

Imagen 5. Captura de datos de capa acuosa del FT-3301

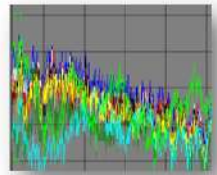
TAG	ECUACIONES DE REGRESIÓN	% DE R ²
R-3301	$1.0536X_1 + 0.341X_2 - 3.185$	94.26
R-3302	$-0.660 + 0.9091X_1$	91.35
R-3303S	$-1.831 + 0.8474X_1 + 4.43X_3$	90.80
R-3303I	$-9.34 + 1.3322X_1 + 0.2560X_2 + 2.113X_3$	90.16
R-3304S	$-5.81 + 3.578X_1 - 4.89X_2 - 0.1252X_1^2 + 0.699X_2^2$	92.81
R-3304I	$-18.83 + 3.645X_1 + 15.21X_3 - 0.1174X_1^2 - 15.91X_3^2$	93.94
R-3305S	$-4.942 + 1.168X_1 + 6.219X_3 - 0.02787X_1^2$	96.54
R-3305I	$-224.7 + 12.59X_1 + 1.601X_2 + 274.7X_3 - 0.1102X_2^2 - 66.6X_3^2 - 10.68X_1X_3$	90.63
R-3306S	$-0.731 + 0.8617X_1 + 0.4507X_2$	96.98
R-3306I	$-37.44 + 6.344X_1 + 0.433X_2 + 19X_3 + 75X_3^2 - 9.51X_1X_3$	91.40
R-3307S	$0.360 + 0.8813X_1$	94.68
R-3307I	$133.4 - 16.29X_1 + 1.083X_2 - 76.2X_3 + 0.533X_1^2 - 0.0757X_2^2 + 5.47X_1X_3$	91.82

Modelos obtenidos de datos de planta

REACTORES DE DAA CON T-3300							
TAG	TEMP.DOMOT	TEMP.ENTRADA	DT	%CONVERSION	ESPACIO VELOCIDAD	FLUJO	CONVERSION
R-3301	33.03	3.17	29.86	0.00	0.11	975.53	F/OP
R-3302	13.15	3.17	9.98	8.41	0.74	7000.32	BAJA
R-3303S	17.03	3.17	13.86	12.50	0.72	5510.53	ACEPTABLE
R-3303I	17.96	3.17	14.79	13.48	0.91	5500.40	ACEPTABLE
R-3304S	12.82	3.17	9.65	8.06	0.77	5497.56	BAJA
R-3304I	17.07	3.17	13.91	12.55	0.77	5500.42	ACEPTABLE
R-3306S	9.68	3.17	6.51	4.75	0.73	5513.97	BAJA
R-3306I	29.30	3.17	26.13	0.00	0.00	0.00	F/OP

AJUSTAR DELTAS DE TEMPERATURA:
Disminuir el flujo de alimentación hada los reactores con mala conversión
Notificar al Ingeniero de producción para enviarlo a regeneración

REACTORES DE DAA CON T-3350							
R-3305S	26.14	35.37	-9.23	0.00	0.00	0.00	F/OP
R-3305I	25.61	35.37	-9.76	0.00	0.00	0.00	F/OP
R-3307S	26.73	35.37	-8.63	0.00	0.14	1176.08	F/OP
R-3307I	25.85	35.37	-9.52	0.00	0.00	0.00	F/OP



DELTAS

Imagen 3. Estado de la conversión de los reactores

Desarrollo de una herramienta en Excel con VBA



Imagen 1. Menú principal

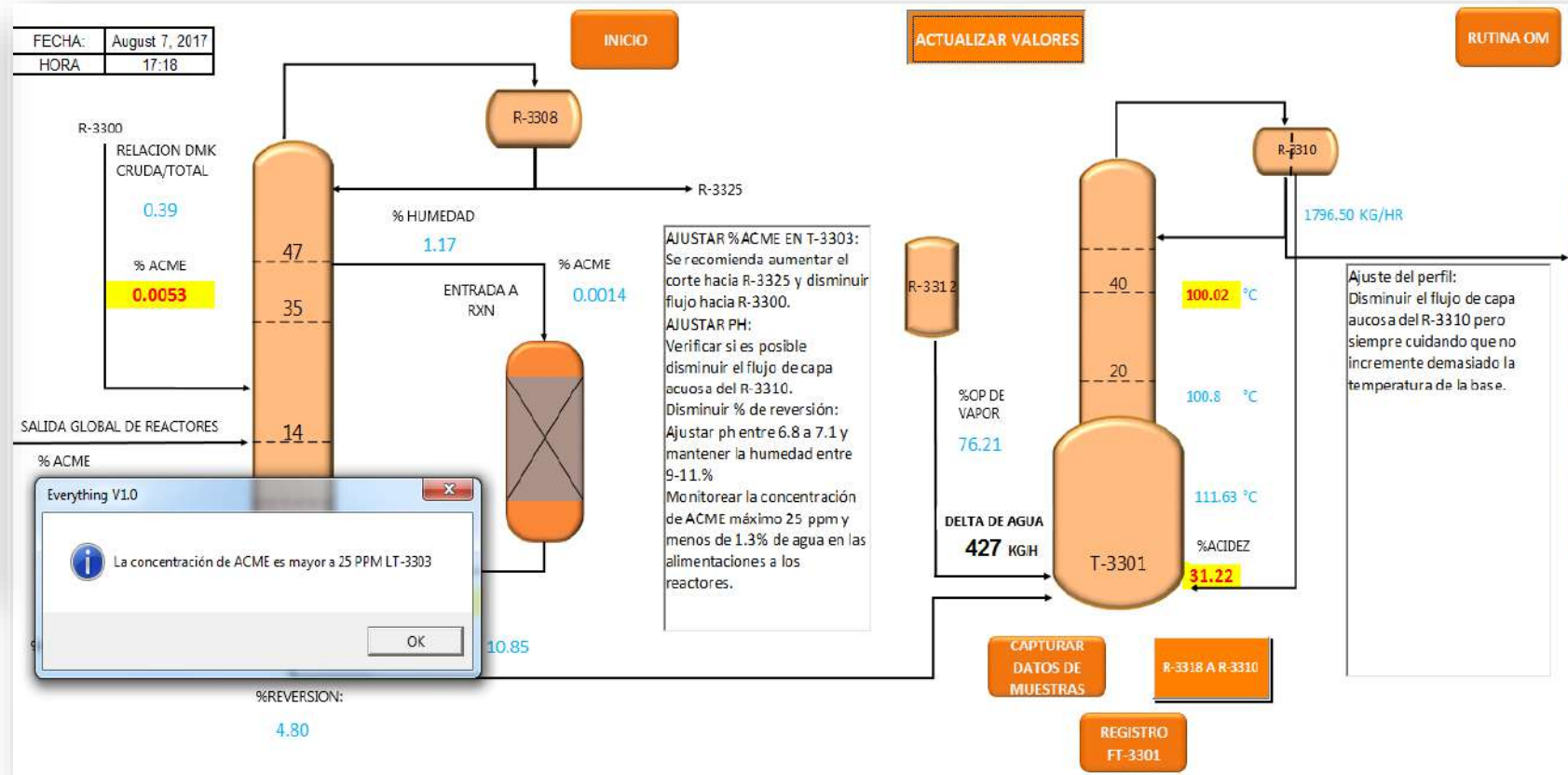


Imagen 2.Estado de la conversión de los reactores

Ajuste del modelo de energía (KPI'S) en la planta de OM

Analysis of the obtained model

Current KPI model
Direct Steam T/T= 7.73079 + 0.000689 Crude OM Inventory -
0.017070 Effective Daily Production
R² = 25.44 %

Vars	R ²	S	A	B	C
1	20.6	0.40894		X	
1	9.0	0.43777			X
2	73.7	0.23754		X	X
2	29.0	0.39055	X	X	
3	76.6	0.22650	X	X	X

Where:

- A: CRUDE OM INVENTORY
- B: EFFECTIVE DAILY PRODUCTION
- C: T-3350 OPERATION DAYS

The number of T-3350 operation days is directly proportional to monthly steam consumption because this column consume about 132 tons of steam per day and this one runs just when MO Unit is at high-capacity, at the same time T-3350 operation days is a predictable variable related with production target.

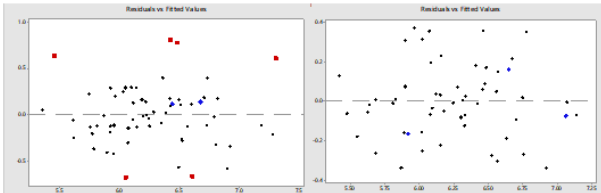
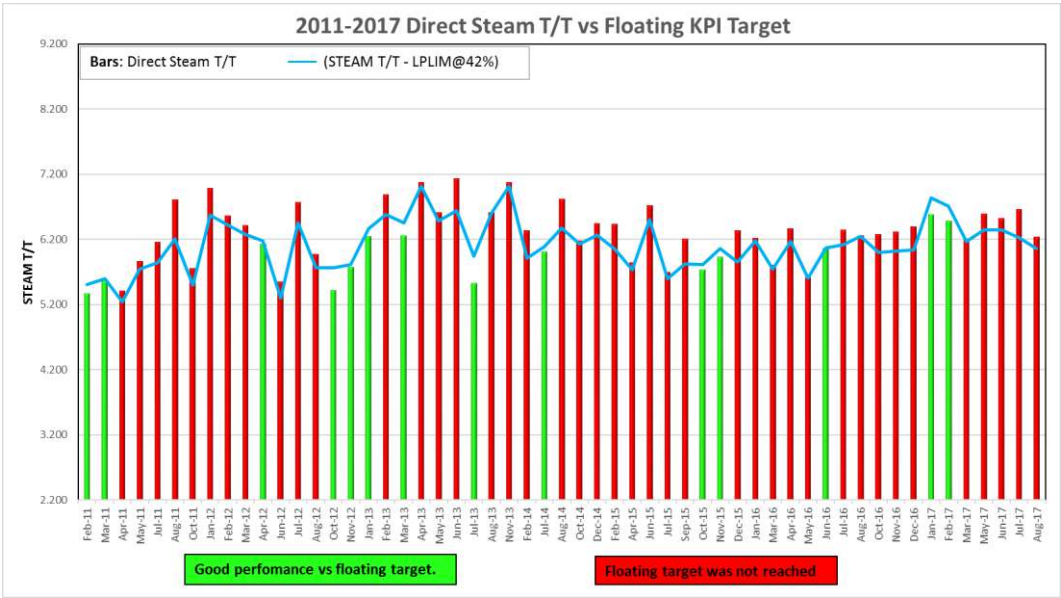


Figure 1. Model without outliers

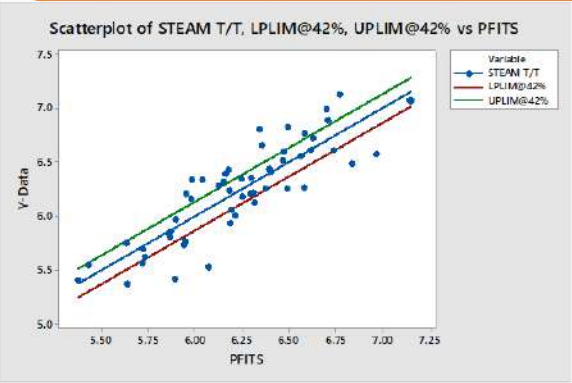


Figure 2. Relationship between KPI and its prediction variables



Ajuste del modelo de energía (KPI'S) en la planta de OM

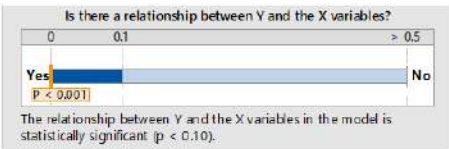
Model Summary



$R^2 = 76.57\%$

Coefficients

Term	Coef	P-Value
Constant	8.861	0.000
CRUDE OM INVENTORY	0.000254	0.016
EFFECTIVE DAILY PRODUCTION	-0.02931	0.000
T-3350 OPERATION DAYS	0.03412	0.000

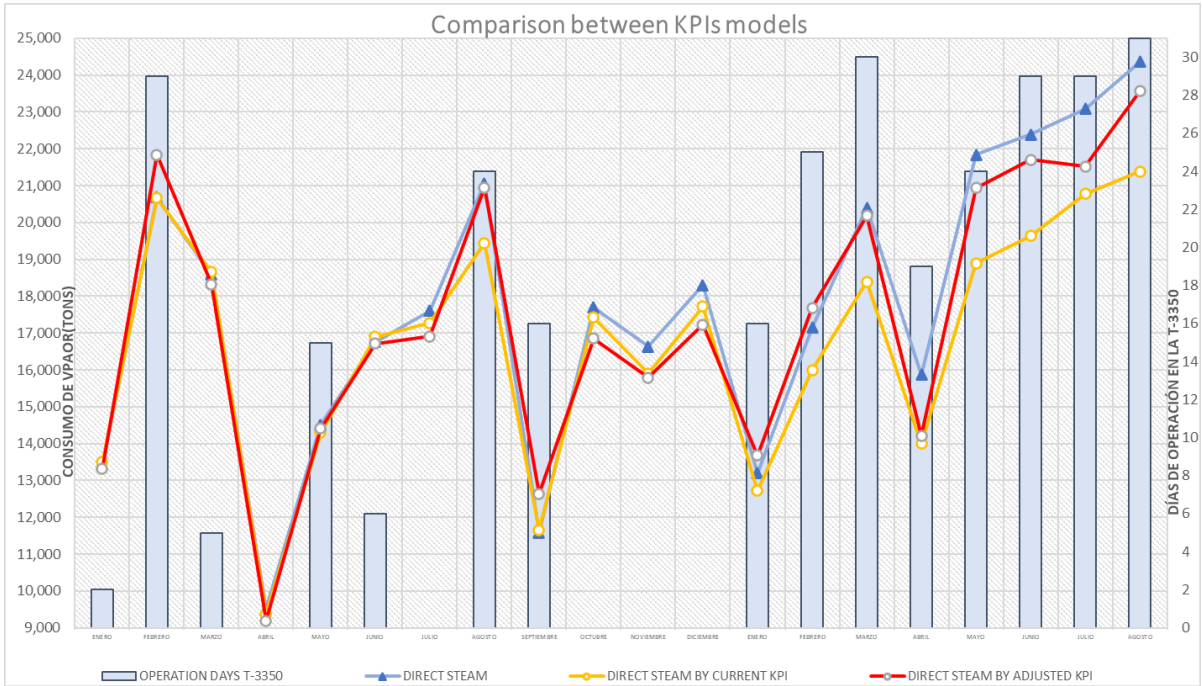


MODEL USING T-3350 OPERATION DAYS	STEAM T/T = $8.861 - 0.02931$ EFFECTIVE DAILY PRODUCTION + 0.000254 CRUDE MO INVENTORY + 0.03412 T-3350 OPERATION DAYS
MODEL USING T-3350 OPERATION DAYS AT 42% LOWER PREDICTION INTERVAL	STEAM T/T = $8.73246 - 0.029318$ EFFECTIVE DAILY PRODUCTION + 0.000255 CRUDE MO INVENTORY + 0.034038 T-3350 OPERATION DAYS

internal / external/ confidential

Celanese Corporation

4



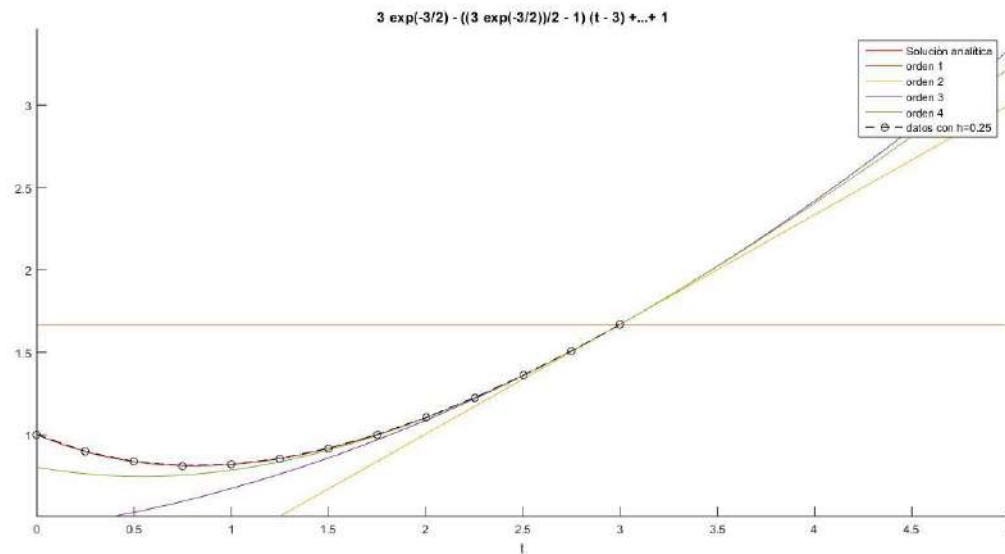
Resolución de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (EDO) por Series de Taylor.

Si la función representa el comportamiento de un sistema y se expresa en términos de un punto central x_i , entonces:

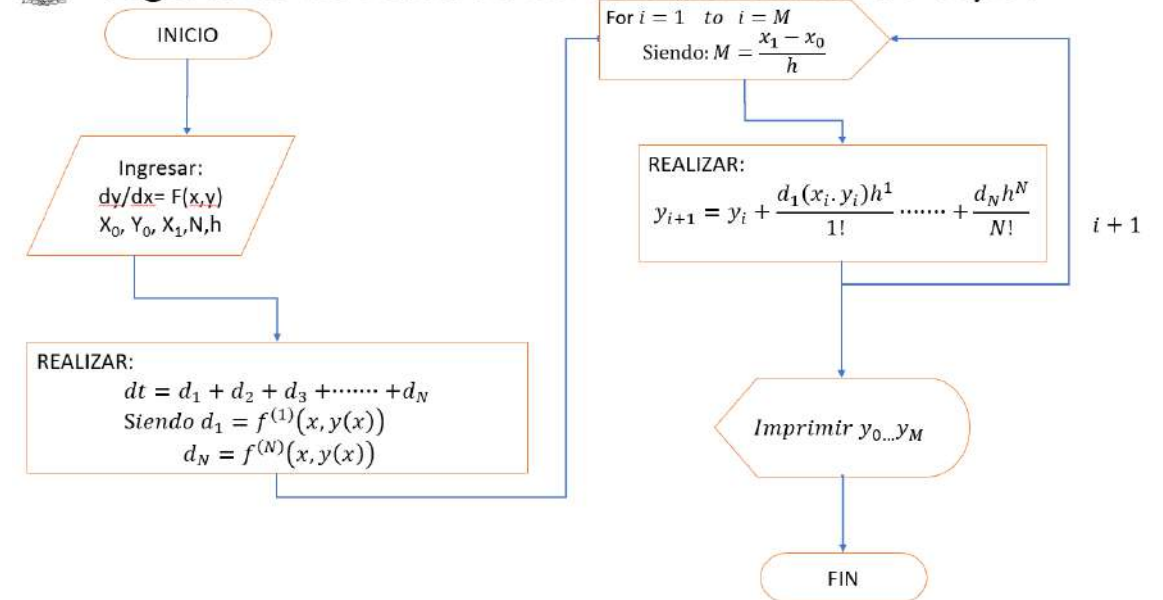
$$f(x) = \sum_{n=l}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!} (x_{n+1} - x_i)^n \quad (6)$$

Cuyo desarrollo de la expresión es:

$$f(x_{n+1}) = f(x_i) + \frac{f'(x_i)}{1!} (x_{n+1} - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2!} (x_{n+1} - x_i)^2 + \frac{f'''(x_i)}{3!} (x_{n+1} - x_i)^3 + \dots \quad (7)$$



Algoritmo de solución de EDO por Series de Taylor



Resolución de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (EDO) por Series de Taylor en Python.

```
import sympy as sp
import numpy as np

# Limpiar pantalla
print("\n" * 100)

# Declarar las variables simbólicas
x, y = sp.symbols('x y')

# Solicitar la función al usuario
f = sp.sympify(input('Ingresar f(x): '))

# Leer número de soluciones deseadas
ns = int(input('Ingrese el número de soluciones deseadas (ns): '))
x0 = float(input('Ingrese el valor inicial de x (x0): '))
y0 = float(input('Ingrese el valor inicial de y (y0): '))
x1 = float(input('Ingrese el valor final de x (x1): '))
n = int(input('Ingrese el orden máximo de derivadas (n): '))

d3 = [f]

# Calcular derivadas hasta el orden n+1
for j in range(n):
    d = sp.diff(d3[j], x)
    d2 = sp.diff(d3[j], y)
    d3.append(d + d2 * f)

for s in range(1, ns + 1):
    p = 10 + 5 * s
    h = (x1 - x0) / p # Tamaño de paso h
    xi = np.linspace(x0, x1, p + 1) # Vector x con un incremento h
    M = len(xi) - 1 # Número de iteraciones
```

```
yi = np.zeros(M + 1) # Vector para almacenar los valores de y
yi[0] = y0

print(f'*****Número de pasos {p}***** con h={h:.4f}*****')
print('i \txi \tyi \terror relativo \terror local truncado')

for i in range(M):
    deval = 0 # Variable para almacenar la evaluación de las derivadas
    a = sp.N(f.subs({x: xi[i], y: yi[i]})) * h # Primera derivada evaluada
    en xi, yi
    yi[i + 1] = yi[i] + a # yi con la primera derivada

    for k in range(1, n): # Evaluar derivadas desde orden 2 hasta N
        deval += sp.N(d3[k + 1].subs({x: xi[i], y: yi[i]})) * h**(k + 1) /
sp.factorial(k + 1)

    c = sp.N(d3[n].subs({x: xi[i], y: yi[i]})) * h**(n + 1) / sp.factorial(n
+ 1) # Derivada de orden n+1
    yi[i + 1] += deval

    relative_error = abs(a + deval) / 100
    local_truncation_error = abs(c)

    print(f'{i} \txi[i + 1]:.4f \tyi[i + 1]:.7f \t{relative_error:.7f}
\t{local_truncation_error:.10f}')

# Fin del programa
```

Diseño de un reactor de lecho fijo para el reformado de gas metano con vapor de agua (SMR) para producir gas hidrógeno.

Catalizador $NiO/\alpha - Al_2O_3$

T= 675 K

Deducción de las ecuaciones LHHW

Gráficos de la velocidad de reacción

Diseño pseudohomogeneo – 336 tubos

Modelación:

- Isotérmico
- Adiabático
- Caída de presión
- Sistema de enfriamiento
- Trayectoria óptima – curvas de equilibrio

Se han considerado un gran seria de reacciones que representan el proceso de reformado, dichas ecuaciones son necesarias para poder interpretar y describir de una manera más precisa los fenómenos químicos y físicos del sistema, tal es el caso de la cinética de la reacción

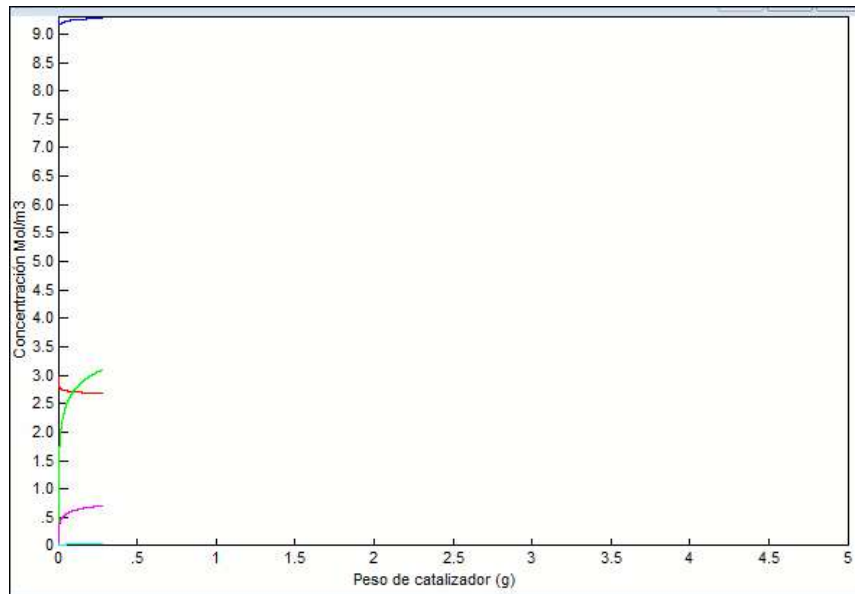
Equipo de la reacción

Características y propiedades:

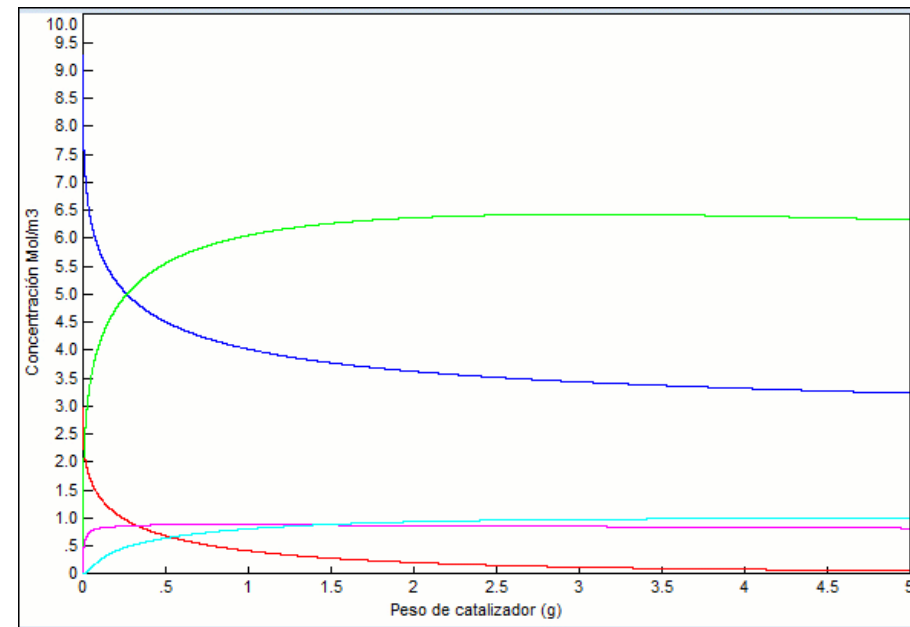
- Reactor de lecho empacado
- Material: Tubo de cuarzo
- Longitud: 49.5 cm
- Diámetro interno: 1.2 cm
- Catalizador: 18 wt. % NiO soportado en $\alpha - Al_2O_3$
- Masa de catalizador: 5 gramos

No.	Reacciones	$-\Delta H_{298}, KJ/mol$
I	$CH_4 + H_2O \leftrightarrow CO + 3H_2$	-206.1
II	$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$	+41.15
III	$CH_4 + 2H_2O \leftrightarrow CO_2 + 4H_2$	-165.0
IV	$CH_4 + CO_2 \leftrightarrow 2CO + 2H_2$	-247.3
V	$CH_4 + 3 \leftrightarrow 4CO + 2H_2O$	-330.0
VI	$CH_4 \leftrightarrow C + 2H_2$	-74.82
VII	$2CO \leftrightarrow C + CO_2$	+173.3
VIII	$CO + H_2 \leftrightarrow C + H_2O$	+131.3
IX	$CO_2 + 2H_2 \leftrightarrow C + 2H_2O$	+90.13
X	$CH_4 + 2CO = 3C + 2H_2O$	+187.6
XI	$CH_4 + CO_2 = 2C + 2H_2O$	+15.3

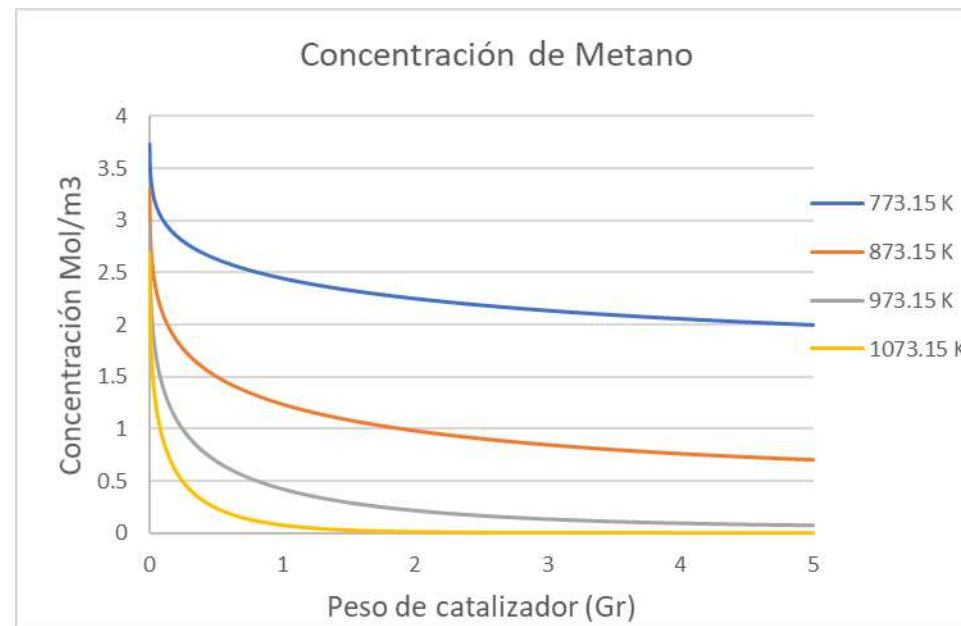
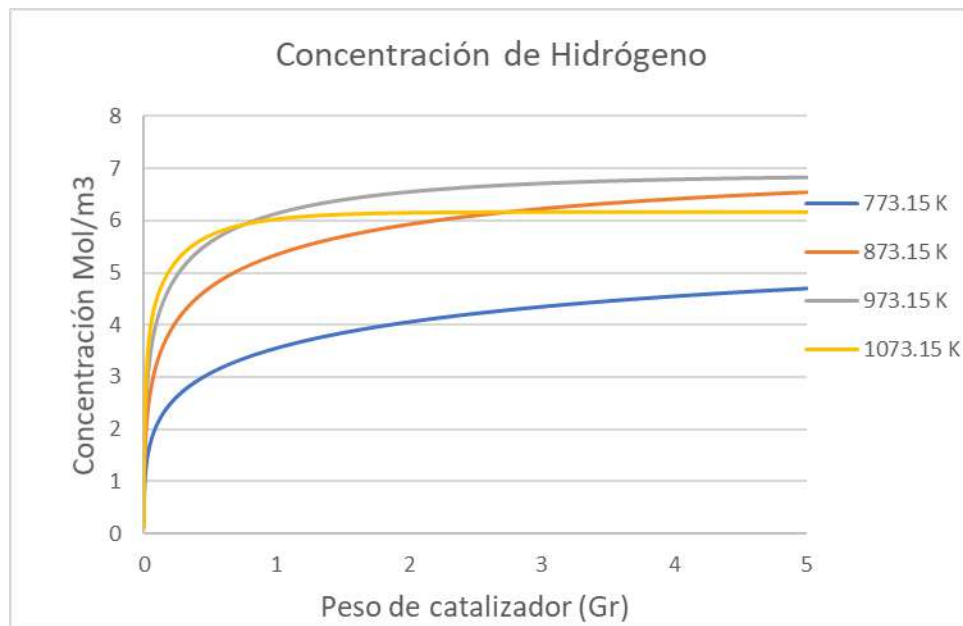




Modelo adiabático



Modelo con intercambio de calor



Caracterización de fracciones del petróleo con la ecuación de estado PC-SAFT.

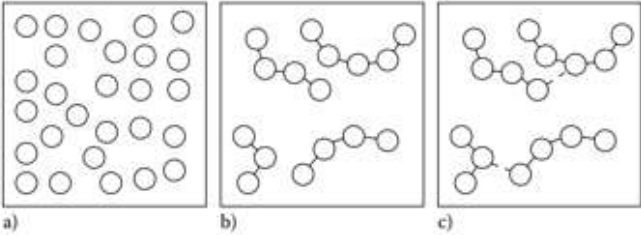


Fig. 2.3. Representación de PC-SAFT. (Pedersen et al., 2015).

$$\tilde{a}^{res} = \tilde{a}^{cd} + \tilde{a}^{disp} + \tilde{a}^{asoc}$$

Esta variante de la ecuación de estado SAFT fue propuesta por Gross & Sadowski, la energía de Helmholtz para el término de dispersión viene dada como:

$$\frac{a^{disp}}{kTN} = \frac{A_1}{kTN} + \frac{A_2}{kTN}$$

Donde:

$$\frac{A_1}{kTN} = -2\pi\rho m^2 \left(\frac{\varepsilon}{kT}\right) \sigma^3 \int_1^\infty \tilde{u}(x) g^{hc}(m; x\sigma/d) x^2 dx$$
$$\frac{A_2}{kTN} = -\pi\rho m \left(1 + Z^{hc} + \rho \frac{\partial Z^{hc}}{\partial \rho}\right)^{-1} m^2 \left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)^2 \sigma^3 \frac{\partial}{\partial \rho} \left[\rho \int_1^\infty \tilde{u}(x)^2 g^{hc}(m; x\sigma/d) x^2 dx \right]$$

donde $x = r/\sigma$ y $\tilde{u}(x) = u(x)/\varepsilon$ es el potencial intermolecular reducido

$$\left(1 + Z^{hc} + \rho \frac{\partial Z^{hc}}{\partial \rho}\right) = \left(1 + m \frac{8\eta - 2\eta^2}{(1-\eta)^4} + (1-m) \frac{20\eta - 27\eta^2 + 12\eta^3 - 2\eta^4}{((1-\eta)(2-\eta))^2}\right)$$

Donde:
 σ el diámetro del segmento
 ε/k el parámetro de energía del segmento
 m el número de segmentos

Las dos integrales se obtienen a partir de las siguientes expresiones:

$$I_1 = \int_1^\infty \tilde{u}(x) g^{hc}(m; x\sigma/d) x^2 dx = \sum_{i=0}^6 a_i \eta^i$$
$$I_2 = \frac{\partial}{\partial \rho} \left[\rho \int_1^\infty \tilde{u}(x)^2 g^{hc}(m; x\sigma/d) x^2 dx \right] = \sum_{i=0}^6 b_i \eta^i$$

con la serie de potencias en densidad reducida dada por las ecuaciones:

$$a_i = a_{0i} + \frac{m-1}{m} a_{1i} + \frac{m-1}{m} \frac{m-2}{m} a_{2i}$$
$$b_i = b_{0i} + \frac{m-1}{m} b_{1i} + \frac{m-1}{m} \frac{m-2}{m} b_{2i}$$

La tabla 2.1 proporciona los coeficientes para llevar a cabo los cálculos de los parámetros anteriores.

<i>i</i>	<i>a</i> _{0<i>i</i>}	<i>a</i> _{1<i>i</i>}	<i>a</i> _{2<i>i</i>}	<i>b</i> _{0<i>i</i>}	<i>b</i> _{1<i>i</i>}	<i>b</i> _{2<i>i</i>}
0	0.910 563 144 5	− 0.308 401 691 8	− 0.090 614 835 1	0.724 094 694 1	− 0.575 549 807 5	0.097 688 311 6
1	0.636 128 144 9	0.186 053 115 9	0.452 784 280 6	2.238 279 186 1	0.699 509 552 1	− 0.255 757 498 2
2	2.686 134 789 1	− 2.503 004 725 9	0.596 270 072 8	− 4.002 584 948 5	3.892 567 339 0	− 9.155 856 153 0
3	− 26.547 362 491 0	21.419 793 629 0	− 1.724 182 913 1	− 21.003 576 815 0	− 17.215 471 648 0	20.642 075 974 0
4	97.759 208 784 0	− 65.255 885 330 0	− 4.130 211 253 1	26.855 641 363 0	192.672 264 470 0	− 38.804 430 052 0
5	− 159.591 540 870 0	83.318 680 481 0	13.776 631 870 0	206.551 338 410 0	− 161.826 461 650 0	93.626 774 077 0
6	91.297 774 084 0	− 33.746 922 930 0	− 8.672 847 036 8	− 355.602 356 120 0	− 165.207 693 460 0	− 29.666 905 585 0

Tabla 2.1. Constantes del modelo universal [16] para las ec. 2.63 y 2.64.

Implementación de PC-SAFT en Fortran 90

```

SUBROUTINE PHIEOS (phi,x,t,p,param,kij,ncomp,densta,dense,rhomolar)

IMPLICIT NONE

!----variables used in the parameter list of subroutine-----
INTEGER nc
PARAMETER (nc=16)
INTEGER ncomp

DOUBLE PRECISION phi(nc),valor
DOUBLE PRECISION kij(nc,nc),param(nc,25)
DOUBLE PRECISION h_res,s_res,g_res
DOUBLE PRECISION pges,pgesdz,gij(nc,nc),zges
DOUBLE PRECISION fres
DOUBLE PRECISION x(nc),t,p,mseg(nc)
DOUBLE PRECISION densta,dense,dap_dx(nc,7),dbp_dx(nc,7),rhomolar!se aade nueva variable rhomolar
DOUBLE PRECISION order1,order2,apar(7),bpar(7)
DOUBLE PRECISION z0t,z1t,z2t,z3t,z0,z1,z2,z3
DOUBLE PRECISION PI, RGAS, NA, KBOL, TAU
DOUBLE PRECISION dij_ab(nc,nc),uij(nc,nc),sig_ij(nc,nc),sig_t(nc)

!----local variables-----
INTEGER i,j,k,m
DOUBLE PRECISION zms, rho, m_mean
DOUBLE PRECISION mhs(nc), mhc(nc), mdsp(nc), mpart(nc), &
myres(nc), myresq, lnphi(nc)
DOUBLE PRECISION dgijdx(nc,nc,nc)
DOUBLE PRECISION zres,zgs
DOUBLE PRECISION fhs_sg, fhs_sx
DOUBLE PRECISION z0dx,z1dx,z2dx,z3dx,m_mndx(nc)
DOUBLE PRECISION I1, I2, I1_dx, I2_dx, c1_con,c2_con,c1_dx, &
ord1dx, ord2dx

!write(2,'(10(2x,e12.6))',advance='no') t,p
!----obtain parameters and density independent expressions-----
CALL PERTPAR (kij,param, &
ncomp,x,t,p,mseg,densta,dense,dap_dx,dbp_dx, &
order1,order2,apar,bpar,z0t,z1t,z2t,z3t,dij_ab, &
PI, RGAS, NA, KBOL, TAU, sig_t, uij, sig_ij)

!----density iteration-----
CALL DENSITR (pges,pgesdz,gij, &
ncomp,x,t,p,mseg,densta,dense,dap_dx,dbp_dx, &
order1,order2,apar,bpar,z0t,z1t,z2t,z3t,dij_ab, &
PI, RGAS, NA, KBOL, TAU, sig_t, uij, sig_ij, valor)

!write(1,'(3(2x,e12.6))') pges,p,valor

rho = dense/z3t
rhomolar=rho !linea nueva
z0 = z0t*rho
z1 = z1t*rho
z2 = z2t*rho
z3 = z3t*rho

zms = 1.d0 - dense
m_mean = z0t/(PI/6.d0)

!----compressibility factor z = p/(kT*rho)-----
zges = (pges * 1.d-30)/(KBOL*t*rho)
zres = zges - 1.d0

!----calcul. the derivatives of f to mole fraction x ( d(f)/d(x) )---
DO 1 k = 1,ncomp

!----derivative d(zeta(i))/d(x)-----
z0dx = rho*PI/6.d0*mseg(k)
z1dx = rho*PI/6.d0*mseg(k)*sig_t(k)
z2dx = rho*PI/6.d0*mseg(k)*sig_t(k)*sig_t(k)
z3dx = rho*PI/6.d0*mseg(k)*sig_t(k)**3.d0

!----derivative d(m_mean)/d(x)-----
m_mndx(k) = mseg(k)

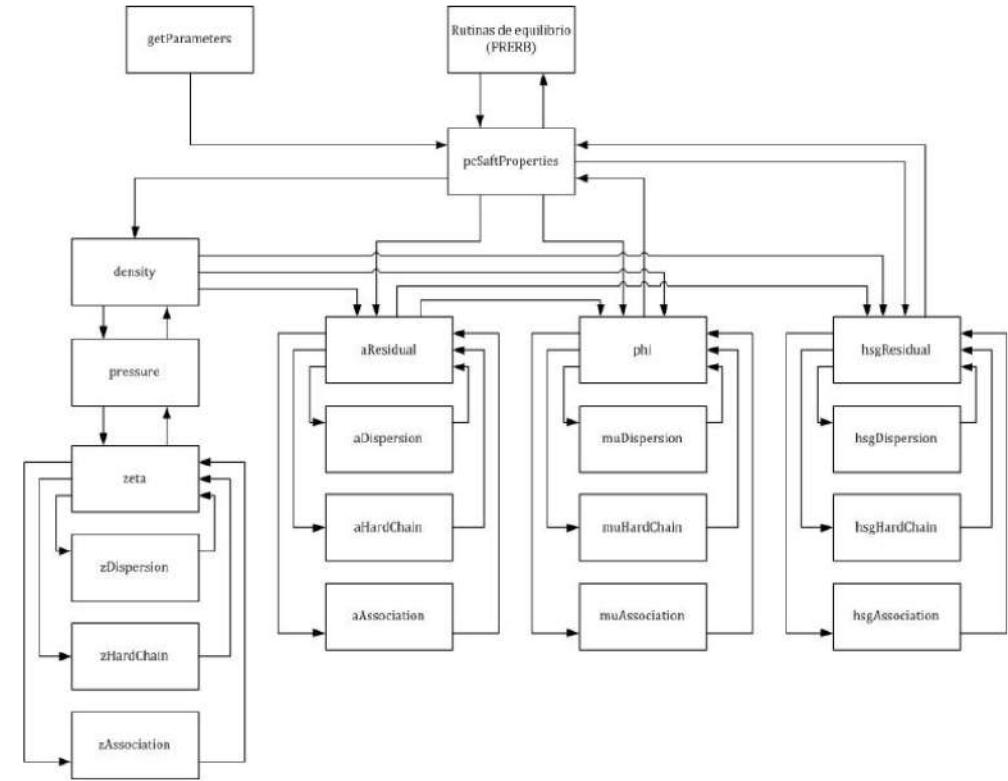
!-----d(f)/d(x) : hard sphere contribution-----
fhs_sg = ( 3.d0*z1*z2/zms + z2**3.d0/z3/zms/zms &
+ (z2**3.d0/z3/z3-z0)*DLOG(zms) )/z0
fhs_sx = - z0dx/z0*fhs_sg &
+ ( 3.d0*(z1dx*z2+z1*z2dx)/zms + 3.d0*z1*z2*z3dx/zms/zms &
+ 3.d0*z2*z2*z2dx/z3/zms/zms &
+ z2**3.d0*z3dx*(3.d0*z3-1.d0)/z3/z3/zms**3.d0 &
+ ((3.d0*z2*z2*z2dx*z3-2.d0*z2**3.d0*z3dx)/z3**3.d0-z0dx) &
+ (z0-z2**3.d0/z3/z3)*z3dx/zms )/z0 *DLOG(zms) &

mhs(k) = m_mndx(k)* fhs_sg + m_mean*fhs_sx

!-----d(f)/d(x) : chain term-----
DO i = 1, nc
DO j = 1, nc
dgijdx(i,j,k) = z3dx/zms/zms &
+3.d0*dij_ab(i,j)*(z2dx+2.d0*z2*z3dx/zms)/zms/zms &
+dij_ab(i,j)**2.d0*z2/zms**3.d0 &
*(4.d0*z2dx+6.d0*z2*z3dx/zms)
END DO
END DO

mhc(k) = 0.d0
DO i = 1, ncomp
mhc(k) = mhc(k) + x(i) * (1.d0-mseg(i)) &
* (1.d0/gij(i,i)) * dgijdx(i,i,k)
END DO
mhc(k) = mhc(k)+( 1.d0-mseg(k))*DLOG(gij(k,k))

```



Programa principal de PC-SAFT EOS

Análisis de sensibilidad en Excel con Vba y Fortran 90.

```

18 Sub LlamarPrograma()
40     arg8 = Worksheets("ENVOLVENTE").Cells(2, 8)
41     arg9 = Worksheets("ENVOLVENTE").Cells(2, 9)
42     arg10 = Worksheets("ENVOLVENTE").Cells(2, 10)
43     arg11 = Worksheets("ENVOLVENTE").Cells(2, 11)
44     MsgBox (arg1)
45
46     Shell ruta & " " & arg1 & " " & arg2 & " " & arg3 & " " & arg4 & " " & arg5 & " " & arg6 & " " & arg7 & " " & arg8 & " " & arg9 & " " & arg10 & " " & arg11 & ".bat"
47
48     'MsgBox contador
49 End Sub
50
51 Sub ImportarDatos(i As Integer, LASTCOL As Long, rutaARCHIVO As String)
52 Dim ruta As String
53 i = i Mod 2 'si es par o no
54 If i = 0 Then
55     ruta = "C:\Output" & "\resultados.txt"
56     'ruta = rutaARCHIVO & "\resultados.txt"
57     'MsgBox ruta
58     ' Seleccionar el archivo de datos
59     'Dim rutaArchivo As String
60     ' Call EliminarConexionesDatos
61     ' Call seleccionarRuta(rutaArchivo) 'compara entre dos rutas, selecciona resultados.txt mas reciente, ver en modulo3
62     'rutaArchivo = "D:\danbe\Documents\DMAESTRIA UNAM 2018 ING DE PROCESOS\TESIS UNAM\Tesis 2023\EnvolventePT_2gamma\resultados.txt"
63     'MsgBox "La ruta más reciente es: " & rutaArchivo
64     Worksheets("RESULTADOS").Activate
65     LASTCOL = Cells(4, Columns.Count).End(xlToLeft).Column
66     ' Verificar que se seleccionó un archivo
67     'If rutaArchivo = "Falso" Then Exit Sub
68     ' MsgBox lastcol
69     ' Crear objeto para la hoja de cálculo destino
70 Dim hojaDestino As Worksheet
71 Set hojaDestino = ThisWorkbook.Sheets("RESULTADOS") ' Modificar por el nombre de la hoja de destino
72
73     ' Importar los datos del archivo
74     ' hoja activa
75
76 With hojaDestino.QueryTables.Add(Connection:="TEXT;" & ruta, _
77     Destination:=hojaDestino.Cells(4, LASTCOL + 1))
78     .TextFileStartRow = 1
79     .TextFileParseType = xlDelimited
80     .TextFileCommaDelimiter = False ' separador de campos
81     '.RefreshStyle = xlOverwriteCells
82     .SaveData = False
83     .TextFilePromptOnRefresh = False
84
85     .Refresh ' refrescar la consulta
86 End With
87 ' FileClose rutaArchivo & "\resultados2.txt"
88 Call separa_y_ordena(LASTCOL)
89 Call graficar(LASTCOL)
90 Call EliminarConexionesDatos(rutaARCHIVO)
91 Call copiar_gammas(LASTCOL)
92 Else
93 Exit Sub
94 End If
95 End Sub

```



Envolvente de fases Presión–Temperatura

Código:

```
Subroutine PT(gammaV,param,z,P0)
INTEGER(KIND=4) i,j,k,ite,Imax,inic,V_F,1
Real(DP)::
gammaV(5),error,zi(nc),P0,x(nc),y(nc),Pnueva,Tnueva,param(nc,3),rhoph(nph)
Real(DP):: DPT,DT,DP,T0,phi(nph,nc),pmtot(nph),tiempo

Imax=40
DT= 10.D0 !DELTA TEMP. 10 KELVIN
DP=10.D5 !INCREMENTO DE PRESION EN PASCALES IGUAL A 10 BAR
call PAREOS(gammaV,param) !obtiene parámetros moleculares de pseudos con gammaV
!se calcularon las composiciones de los pseudos y se normalizaron Ci
Do l=1,1
error=0.d0
inic=0
P=P0 !en Bar, se asigna presion inicial
if (l==1) then
IE=1
x=Ci
Y=0
V_F=0
else
IE=2 !SE SELECCIONA PUNTOS DE ROCIO
y=Ci
x=0
end if
do k = 1,nc
write(3,'(2(2x,f12.4),2x,A7,8(4x,f12.6))')
T,P/1.d5,comp(k),x(k),y(k),phi(1,k),phi(2,k),rhoph,pmtot
end do
write(3,*) ' ' !salto de linea que divide cada punto de burbuja
Do j=1, nc
Error= error+dabs(y(j)-x(j))
End do
write(7,'(2X,I3,2X,I2,4X,4(3X,f12.4))') i,V_F,T,P/1.D5,DPT,Error
write(9,'(I2,2X,4(3X,f12.4))') V_F,T,P/1.D5,DPT,Error
IF (ERROR.LT.0.1) THEN
write (*,*) 'LA SUMA DE LA DIFERENCIAS DE COMPOSICIONES L-V ES MENOR A 0.1'
END IF
END DO
write(7,*) 'PUNTOS DE ROCIO' !salto de linea para separar puntos de burbuja con
rocio
End Do
End Subroutine
```

91

```
P=180.D0
dt=10.d0
imax=25
V_f=1
end if
write(5,*) T,P
write(9,'(A7,10(f6.4,2x))') 'Gamma= ',gammaV,kij(4,nc-4),kij(4,nc-3),kij(4,nc-2),kij(4,nc-1),kij(4,nc)

CALL PRERB(x,y,inic,ite,pnueva,gammaV,rhoph,phi,pmtot) !última línea ocultada el
write(9,'(I2,2X,4(3X,f12.4))') V_F,T,P/1.D5,DPT,Error
T0=T
T=T+DT!SE CALCULA SEGUNDO PUNTO
!P=75d5 !Presión inicial supuesta
CALL PRERB(x,y,1,ite,pnueva,gammaV,rhoph,phi,pmtot)
DPT= (P/1.d5-P0)/(T-T0) !P0 ESTABA EN BAR DESDE QUE SE INGRESÓ COMO DATO INICIAL,
POR LO QUE SE CONVIERTE P EN BAR
write(9,'(I2,2X,4(3X,f12.4))') V_F,T,P/1.D5,DPT,Error
!Write(3,'(2(3x,f12.8))') DPT !Primer DeltaPT de los dos primeros puntos
write(3,'(A122)')
' T(K) P(Bar) Comp. x(i) y(i) phi_liq(
i) phi_vap(i) RhoLiq RhoVap'
write(7,*)
' i V/F Temperatura(K) Presión(Bar) DT/DP Error '
!write(9,'(A7,3(f6.4,2x))') 'Gamma= ',gammaV
Do i=1,Imax
Error=0.d0
T0=T
P0=P
! IF (DPT.LT.0.5) THEN
V_F=0
T=T+DT!SE CALCULA PRIMER PUNTO
IF (DABS(376.05D0-T).LT.8.D0) T=376.05D0 !PARA CALCULAR LA P. DE BURBUJA A
LA T DE YACIMIENTO
CALL PRERB(x,y,1,ite,pnueva,gammaV,rhoph,phi,pmtot) !l es para que no se
llame a la rutina de inicialización de P en este caso
! ELSE
V_F=2
P=(P+DP)/1.d5 !se convierte en Bar
! CALL TERB(x,y,1,ite,tnewa,gammaV,rhoph,phi,pmtot) !SE CALCULA SEGUNDO
PUNTO
!END IF
DPT= (P-P0)/1.D5/(T-T0) !Se convierten a bar las presiones para tener similitud
numérica con la temperatura.
```

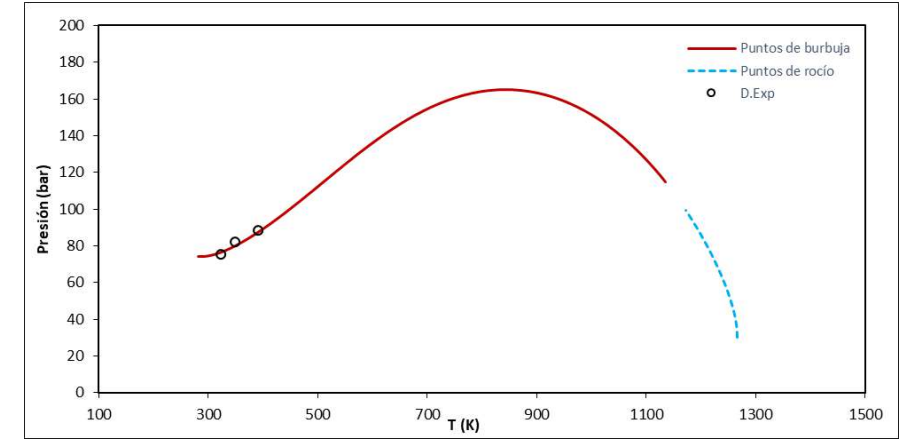


Gráfico 4.1. Envoltura de fases Presión–Temperatura del crudo 1.

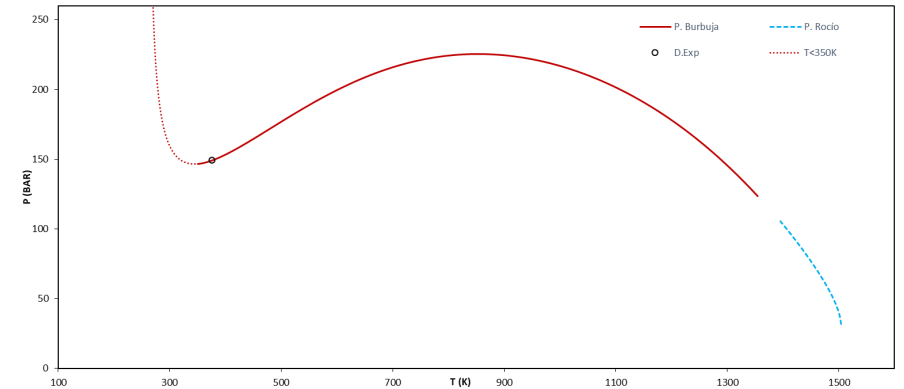


Gráfico 4.24. Envoltura de fases Presión–Temperatura del crudo 5.

Algoritmo del CCE y rutina en Fortran 90.

Código:

```
Subroutine CCE(intervaloP,gammaV,parame,x,y,zi)
  INTEGER(KIND=1) i,j,inic,ite
  Real(DP)::IntervaloP(18),parame(nc,3),x(nc),y(nc),zi(nc),gammaV(5),rhoph(nph),phi
    (nph,nc)
  real(dp):: Vtot(18),vsat,VR
  ite=20
  inic=0
  x=0
  y=0
  T=102.9+273.15d0 !en Kelvin
  j=size(IntervaloP)
  DO i=1,j
    P=IntervaloP(i)*1d5 !se convierte a Pa, para que funcione correctamente la
    rutina del flash
    Call FLASH(zi,x,y,inic,ite,rhoph,gammaV)
    IF (BIN.LT.0) BIN=0 !BIN ES LA V/F
    VTOT(i)=BIN/RHOPH(2)+(1-BIN)/rhoph(1) !SE SUMAN LOS VOL. DE LIQ Y VAPOR, SE
    CONSIDERA 1 KMOL COMO BASE DE CALCULO
    IF (I.EQ.9) VSAT= VTOT(i) !7 es la posicion de la presión de burbuja a la T de
    Yacimiento.
  End Do
  DO I=1,j
    VR=Vtot(i)/vsat
    write (5,'(2(3x,f8.4))') intervaloP(i),VR
  END DO
End Subroutine
```

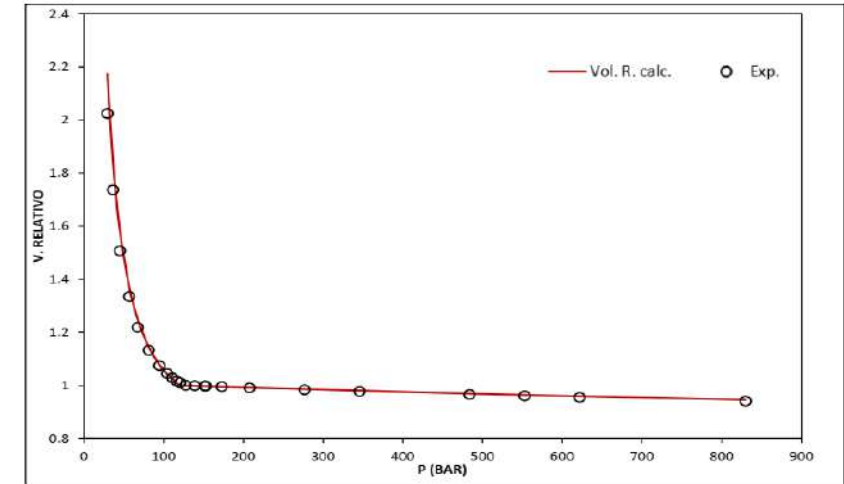


Gráfico 4.13. Volumen relativo en la expansión del crudo 3.

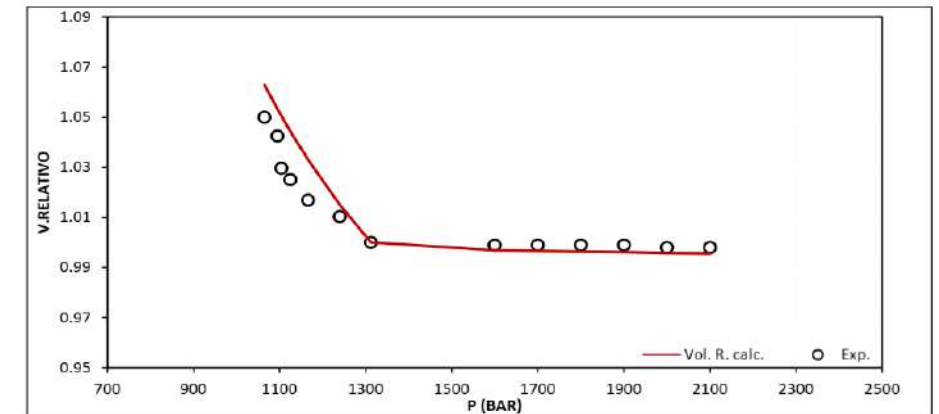


Gráfico 4.19. Volumen relativo en la expansión del crudo 4.

Algoritmo del DLE y rutina en Fortran 90.

Código:

```
Subroutine DLE(intervaloP,gammaV,parame,x,y,zi)
  INTEGER(KIND=1) i,j,k,inic,ite
  Real(DP):: IntervaloP(11),parame(nc,3),x(nc),y(nc),zi(nc),gammaV(5),rhoph(nph)
  Real(DP):: N,Nvap(11),Nliq(11),Vgas(11),Vliq(11),Vsto,RGA(11),Nlib !Vsto volumen
  stock tank oil
  ite=20
  inic=0
  k=size(IntervaloP)
  T=102.9d0+273.15d0 !en Kelvin, T de yacimiento
  N=1000 !N número base de moles
  nliq(1)=N
  nvap(1)=0
  ! P= 1.01325d5
  Call PAREOS(gammaV,parame)
  x=0
  Write(4,*) 'RESULTADOS DLE'
  P=IntervaloP(1)*1d5 !Se convierte en Pa
  Call FLASH(zi,x,y,inic,ite,rhoph,gammaV)
  Do i=2,k
    P=IntervaloP(i)*1d5
```

```
    Call FLASH(zi,x,y,inic,ite,rhoph,gammaV)
    if (BIN.lt.0) bin=0
    !write(5,*)BIN
    Nvap(i)=Nliq(i-1)*bin
    Nliq(i)=Nliq(i-1)-Nvap(i)
    zi=x
  End Do
  T=15.56d0+273.15d0
  Do i=1,k-1
    Nlib=0
    do j = i+1, k
      Nlib=Nlib+Nvap(j) !Nlib moles liberados
    end do
    Vgas(i)=(Nlib*8.314*T/101325)*35.3147 !unidad en m3, si se quiere en pies cúbicos
    multiplicar por 35.3147
  End Do

  call FLASH(zi,x,y,inic,ite,rhoph,gammaV)

  Vsto=Nliq(k)/1000/rhoph(1)*6.2898 !6.2898 factor de conv. de m3 a barriles
  estándar
  write(5,*) 'P(Bar) NVapor Nliq Vgas RGA'
  Do i=1,k
    RGA=Vgas(i)/Vsto
    write (5, '(5(3x,f10.4))') IntervaloP(i),Nvap(i),Nliq(i),Vgas(i),RGA(i)
  end do
  !write (5, '(7(3x,f10.4))') P/1.d5,gammaV,rhoph(1)
End Subroutine
```

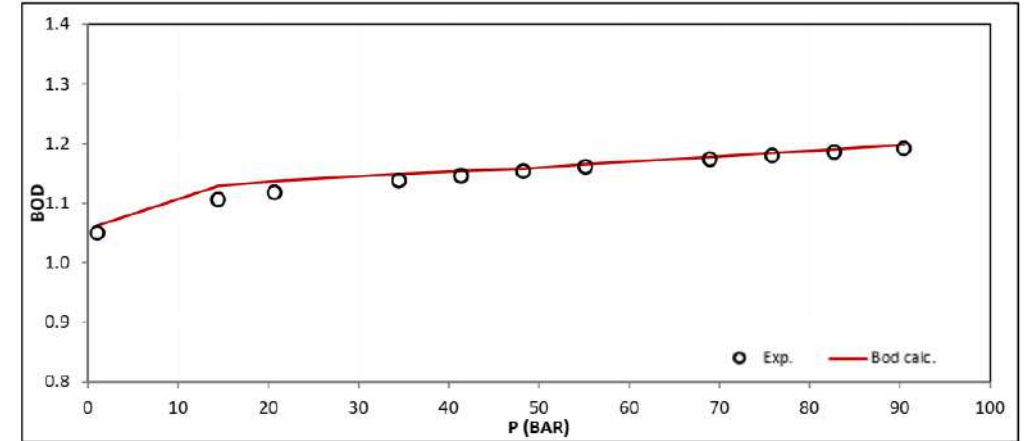


Gráfico 4.22. Factor volumétrico (Bod) en cada expansión del experimento DLE del crudo 4.

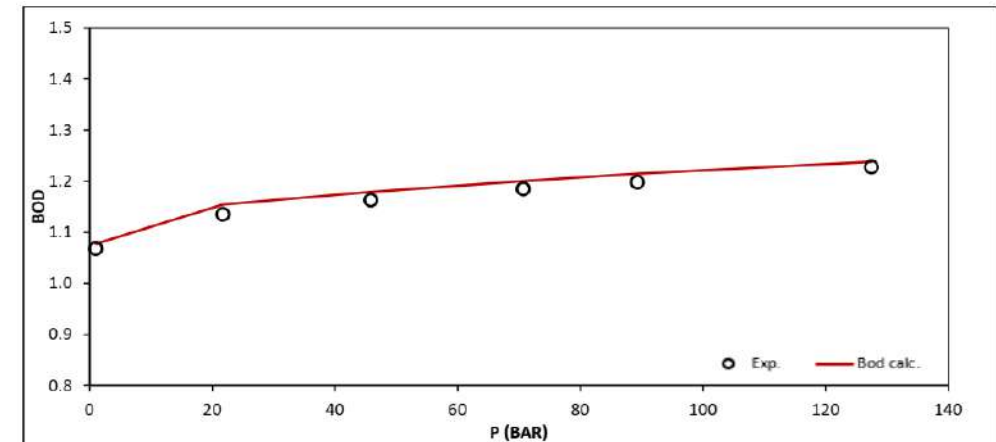


Gráfico 4.16. Factor volumétrico (Bod) en cada expansión del experimento DLE del crudo 3.