

PROYECTOS PROFESIONALES Y ACADEMICOS

DANIEL BELLO

DIC 2024

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

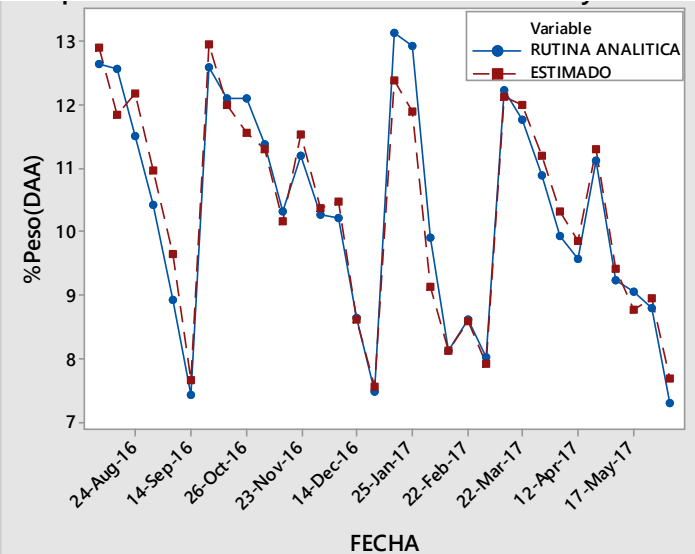


Gráfico 1. Comparación de valores entre rutina analítica y estimaciones del reactor R-3301 durante un año.

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 (Verde, Verde Claro, Rojiza, Amarilla) y un botón para guardar los datos. También se muestra la estructura química de OM+ V1.0 y el logo de Celanese.

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

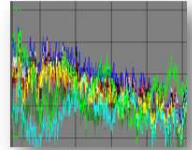
TAG	ECUACIONES DE REGRESIÓN	% DE R ²
R-3301	$1.0536X_1 + 0.341X_2 - 3.185$	94.26
R-3302	$-0.660 + 0.9091X_1$	91.35
R-3303S	$-1.831 + 0.8474X_1 + 4.43X_3$	90.80
R-3303I	$-9.34 + 1.3322X_1 + 0.2560X_2 + 2.113X_3$	90.16
R-3304S	$-5.81 + 3.578X_1 - 4.89X_2 - 0.1252X_1^2 + 0.699X_2^2$	92.81
R-3304I	$-18.83 + 3.645X_1 + 15.21X_3 - 0.1174X_1^2 - 15.91X_3^2$	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.DOMO	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 hacia 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

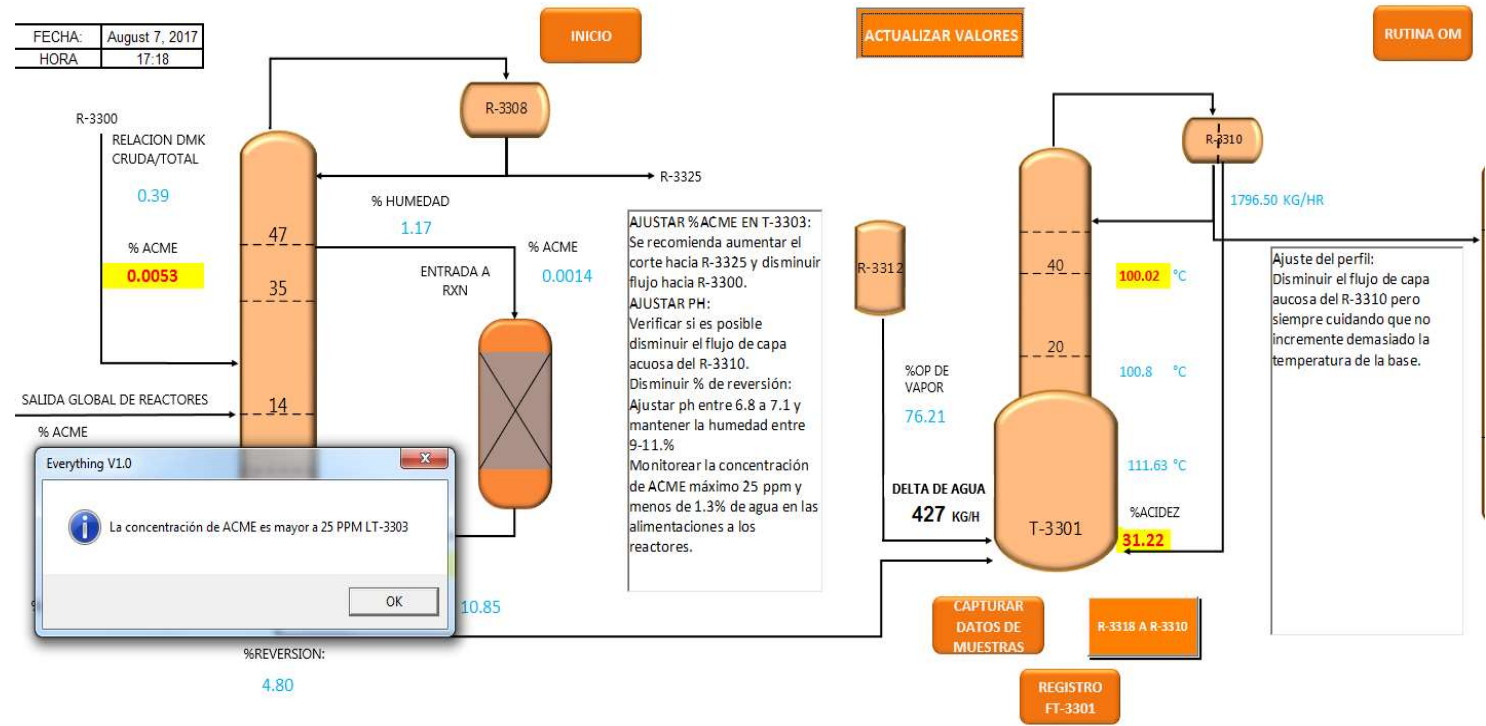


Imagen 2.Estado de la conversión de los reactores

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

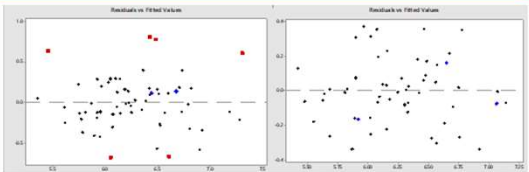


Figure 1. Model without outliers

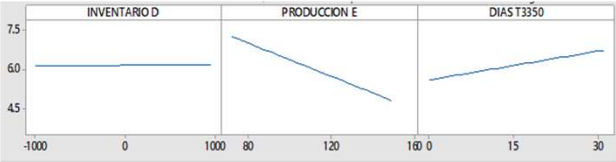
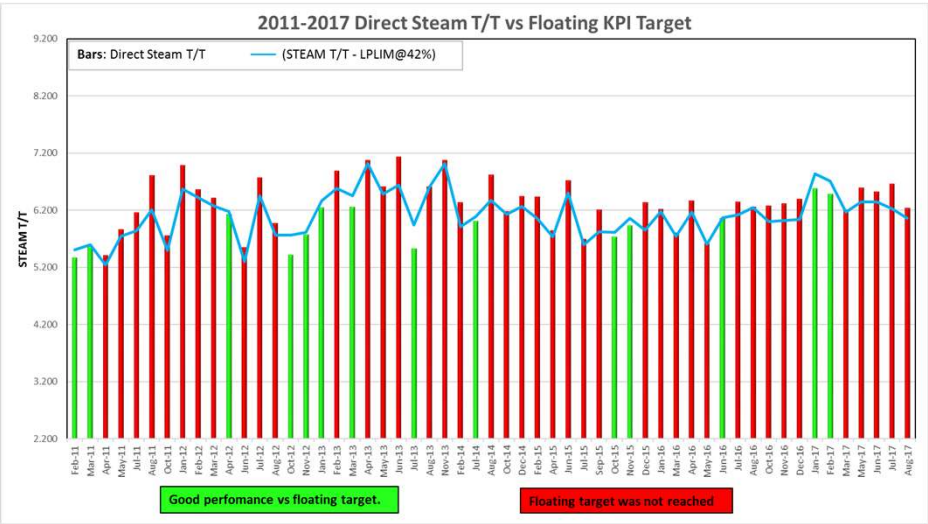


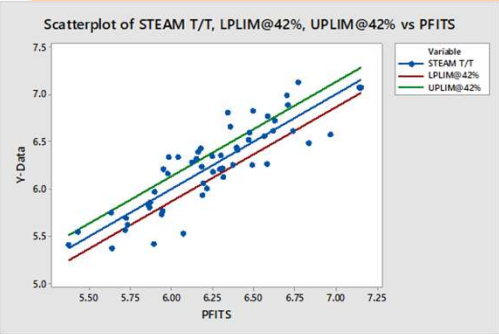
Figure 2. Relationship between KPI and its prediction variables

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.



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

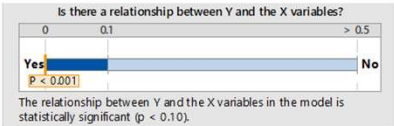
Model Summary



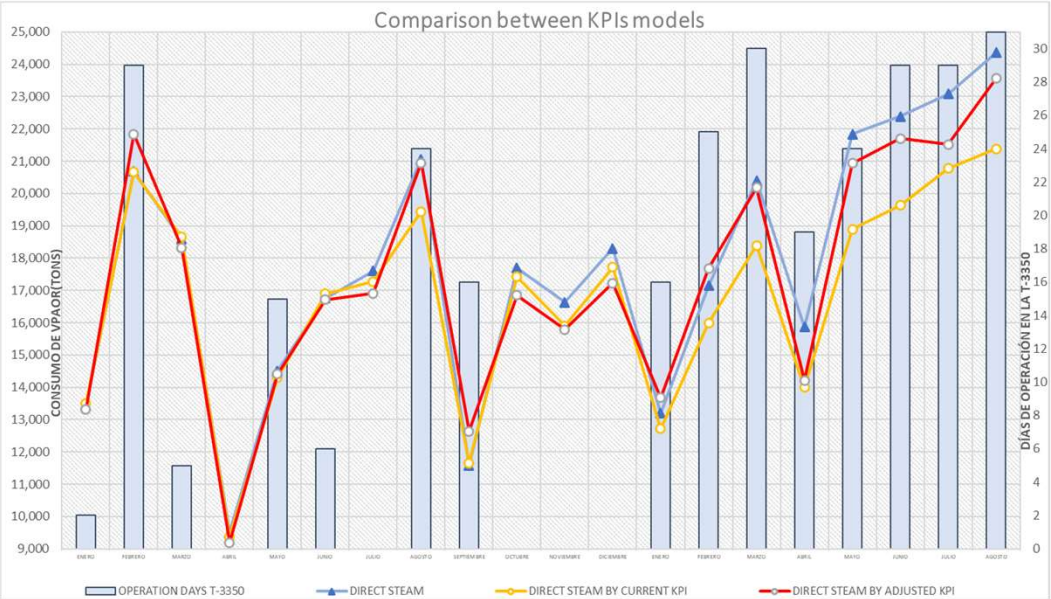
$R^2 = 76.57 \%$

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



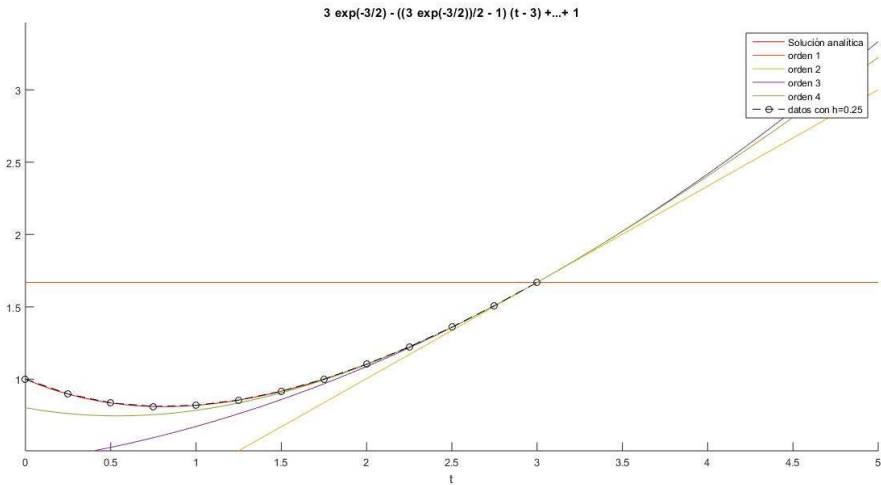
Resolución de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (EDO) por Series de Taylor.

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

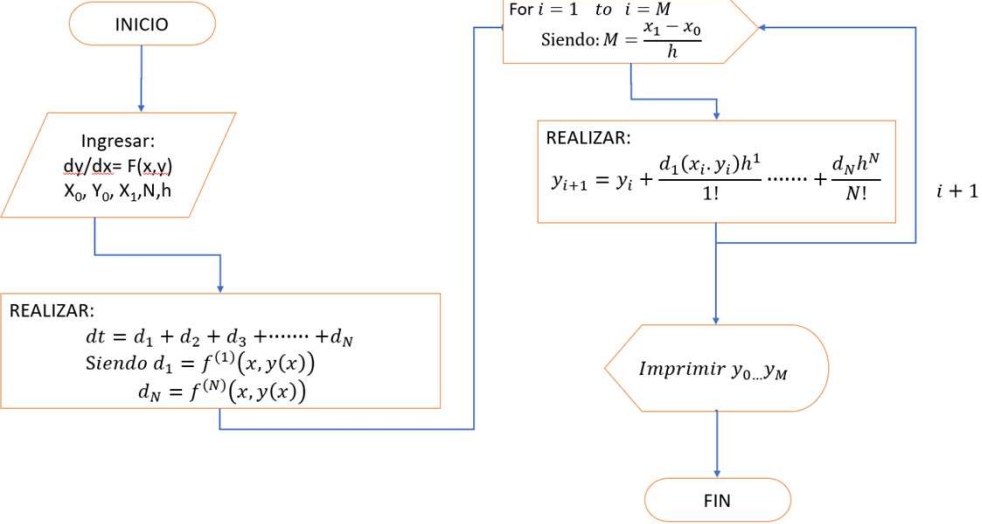
$$f(x) = \sum_{n=i}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!} (x_{n+1} - x_i)^n \tag{6}$$

Cuyo desarrollo de la expresión es:

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



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

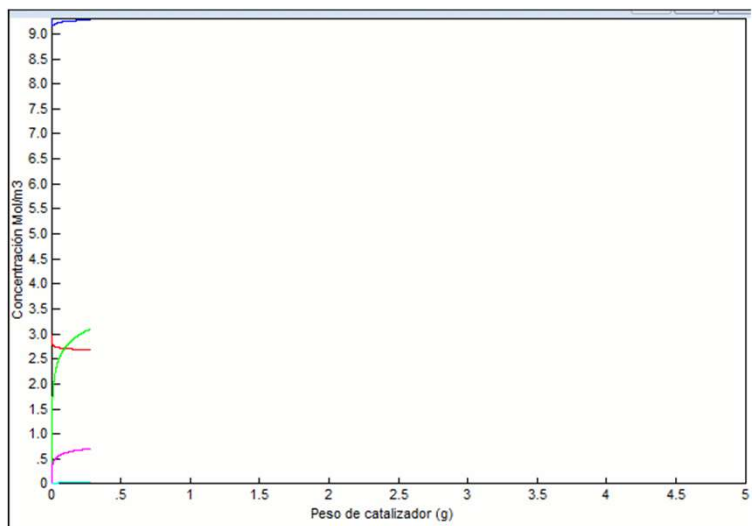
Equipo de la reacción

Características y propiedades:

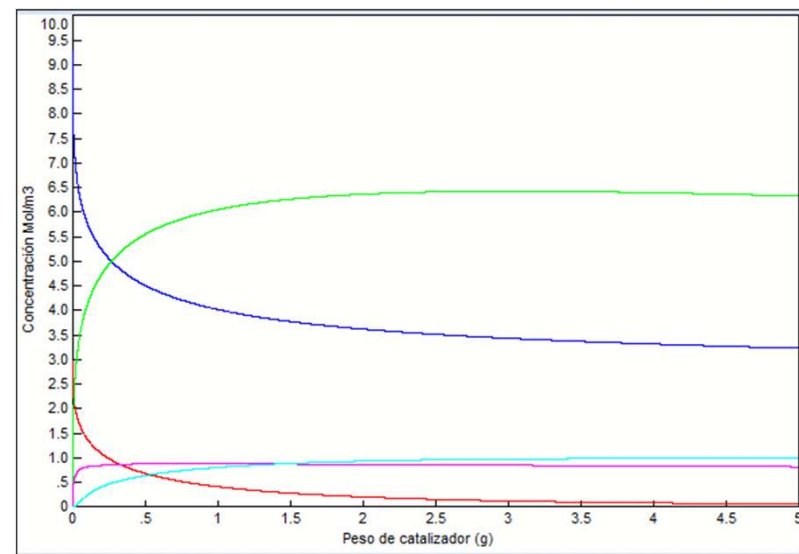
- Reactor de lecho empacado
- Material: Tubo de cuarzo
- Longitud: 49.5 cm
- Diámetro interno: 1.2 cm
- Catalizador: 18 wt. % NiO soportado en $\alpha - Al_2O_3$
- Masa de catalizador: 5 gramos

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	$CH_4 + 2CO \rightleftharpoons 3C + 2H_2O$	+187.6
XI	$CH_4 + CO_2 = 2C + 2H_2O$	+15.3

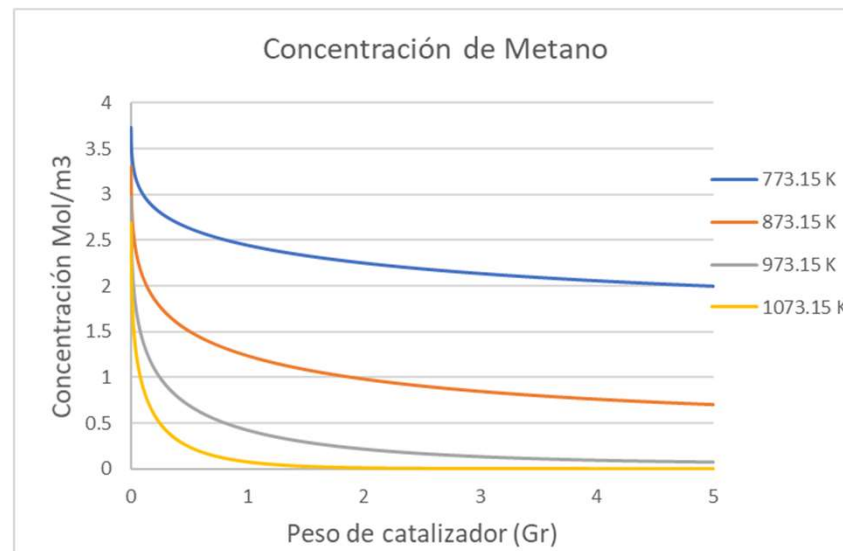
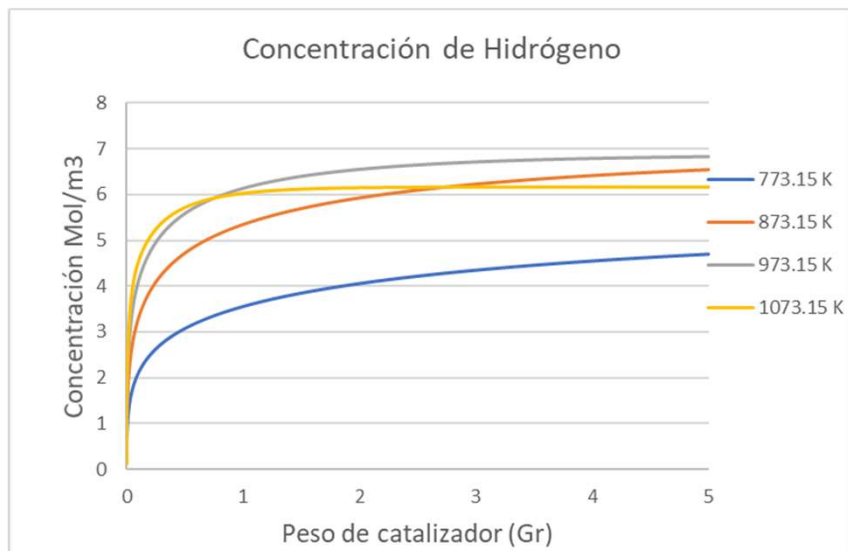




Modelo adiabático



Modelo con intercambio de calor



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

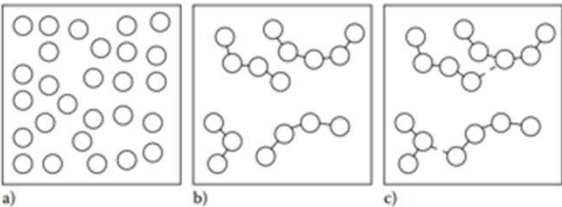


Fig. 2.3. Representación de PC-SAFT. (Pedersen et al., 2015).

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

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	a_{0i}	a_{1i}	a_{2i}	b_{0i}	b_{1i}	b_{2i}
0	0.9105631445	-0.3084016918	-0.0906148351	0.7240946941	-0.5755498075	0.0976883116
1	0.6361281449	0.1860531159	0.4527842806	2.2382791861	0.6995095521	-0.2557574982
2	2.6861347891	-2.5030047259	0.5962700728	-4.0025849485	3.8925673390	-9.1558561530
3	-26.5473624910	21.4197936290	-1.7241829131	-21.0035768150	-17.2154716480	20.6420759740
4	97.7592087840	-65.2558853300	-4.1302112531	26.8556413630	192.6722644700	-38.8044300520
5	-159.5915408700	83.3186804810	13.7766318700	206.5513384100	-161.8264616500	93.6267740770
6	91.2977740840	-33.7469229300	-8.6728470368	-355.6023561200	-165.2076934600	-29.6669055850

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),rhomolarise a 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 dijab(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), 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,dijab, &
    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,dijab, &
    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)

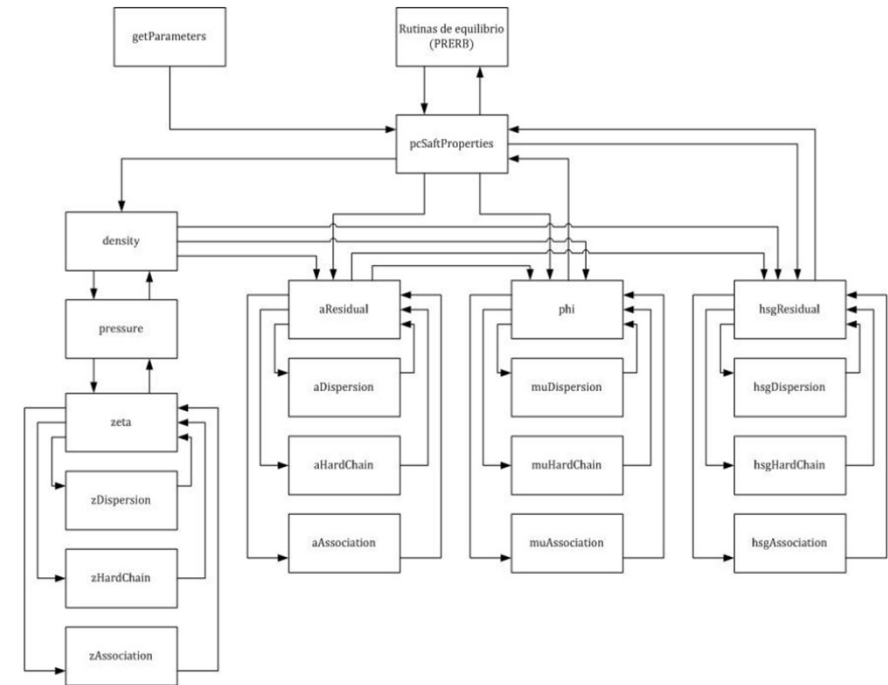
  !-----d(f)/d(x) : hard sphere contribution-----
  fhs_sg = ( 3.d0*z1*z2/zms + z2**3.d0/z3/zms/zms &
    + (z2**3.d0/z3/z3-z0)*DLOG(zms) )/z0
  fhs_sx = - z0dx/z0*fhs_sg &
    + ( 3.d0*(z1dx*z2+z1*z2dx)/zms + 3.d0*z1*z2*z3dx/zms/zms &
    + 3.d0*z2*z2*z2dx/z3/zms/zms &
    + z2**3.d0*z3dx*(3.d0*z3-1.d0)/z3/z3/zms**3.d0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

  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*dijab(i,j)*(z2dx+2.d0*z2*z3dx/zms)/zms/zms &
        +dijab(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()
19     arg0 = Worksheets("ENVOLVENTE").Cells(2, 8)
20     arg9 = Worksheets("ENVOLVENTE").Cells(2, 9)
21     arg10 = Worksheets("ENVOLVENTE").Cells(2, 10)
22     arg11 = Worksheets("ENVOLVENTE").Cells(2, 11)
23     MsgBox (arg1)
24
25     Shell ruta & " " & arg1 & " " & arg2 & " " & arg3 & " " & arg4 & " " & arg5 & " " & arg6 & " " & arg7 & " " & arg8 & " " & arg9 &
26
27     'MsgBox contador
28 End Sub
29
30 Sub ImportarDatos(i As Integer, LASTCOL As Long, rutaARCHIVO As String)
31     Dim ruta As String
32     i = i Mod 2 'si es par o no
33     If i = 0 Then
34         ruta = "C:\Output" & "\resultados.txt"
35         'ruta = rutaARCHIVO & "\resultados.txt"
36         MsgBox ruta
37         ' Seleccionar el archivo de datos
38         Dim rutaArchivo As String
39         Call EliminarConexionesDatos
40         ' Call seleccionarRuta(rutaArchivo) 'compara entre dos rutas, selecciona resultados.txt mas reciente, ver en modulo3
41         'rutaArchivo = "D:\dameDocuments\DMAESTRIA UNAM 2018 ING DE PROCESOS\TESIS UNAM\Tesis 2023\EnvolventePT_2gamma\resultados.txt"
42         'MsgBox "La ruta mas reciente es: " & rutaArchivo
43         Worksheets("RESULTADOS").Activate
44         LASTCOL = Cells(4, Columns.Count).End(xlToLeft).Column
45         ' Verificar que se seleccionó un archivo
46         'If rutaArchivo = "Falso" Then Exit Sub
47         MsgBox lastcol
48         ' Crear objeto para la hoja de cículo destino
49         Dim hojaDestino As Worksheet
50         Set hojaDestino = ThisWorkbook.Sheets("RESULTADOS") ' Modificar por el nombre de la hoja de destino
51
52         ' Importar los datos del archivo
53         ' hoja activa
54
55         With hojaDestino.QueryTables.Add(Connection:="TEXT;" & ruta, _
56             Destination:=hojaDestino.Cells(4, LASTCOL + 1))
57             .TextFileStartRow = 1
58             .TextFileParseType = xlDelimited
59             .TextFileCommaDelimiter = False ' separador de campos
60             .RefreshStyle = xlOverwriteCells
61             .SaveData = False
62             .TextFilePromptOnRefresh = False
63
64             .Refresh ' refrescar la consulta
65         End With
66         ' FileClose rutaArchivo & "\resultados2.txt"
67         Call separa_y_ordena(LASTCOL)
68         Call graficar(LASTCOL)
69         Call EliminarConexionesDatos(rutaARCHIVO)
70         Call copiar_gammas(LASTCOL)
71     Else
72         Exit Sub
73     End If
74 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,l
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=c1
    y=0
    V_F=0
else
    IE=2 !SE SELECCIONA PUNTOS DE ROCIO
    x=c1
    y=c1
    V_F=0
end if
end do
```

91

```
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 línea 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))') 1,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 línea para separar puntos de burbuja con
rocio
End Do
End Subroutine
```

```
P=100.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) !i 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.
```

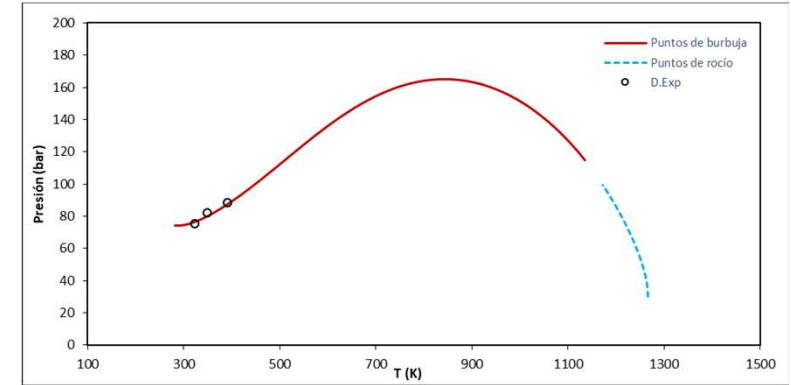


Gráfico 4.1. Envolvente de fases Presión—Temperatura del crudo 1.

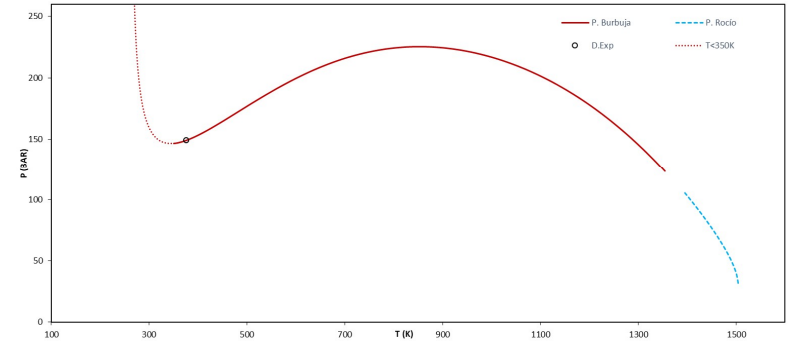


Gráfico 4.24. Envolvente de fases Presión—Temperatura del crudo 5.

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
```

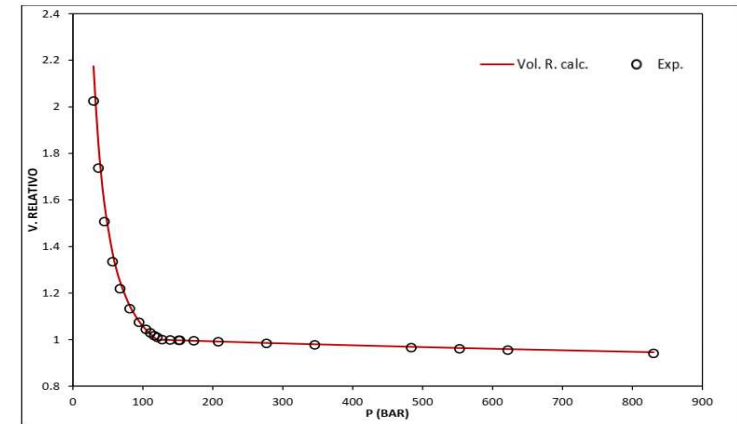


Gráfico 4.13. Volumen relativo en la expansión del crudo 3.

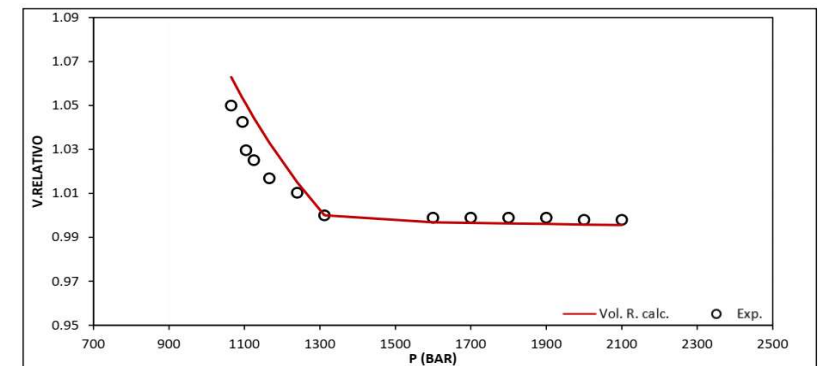


Gráfico 4.19. Volumen relativo en la expansión del crudo 4.

Algoritmo del DLE y rutina en Fortran 90.

Código:

```
Subroutine DLE(intervaloP,gammaV,param,x,y,zi)
INTEGER(KIND=1) i,j,k,inic,ite
Real(DP):: IntervaloP(11),param(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,param)
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
```

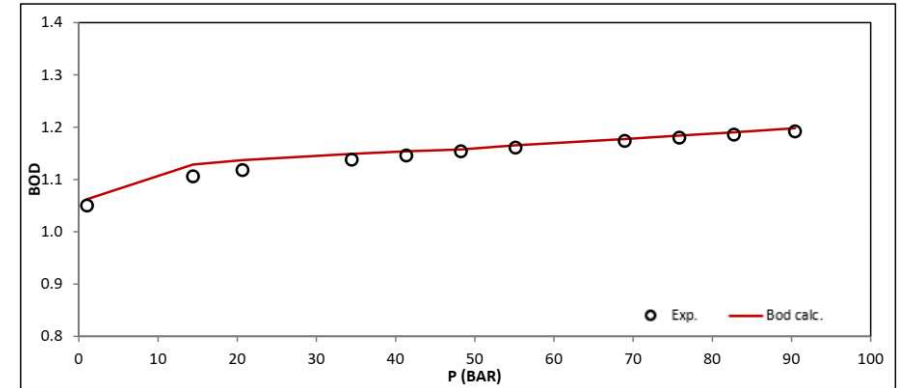


Gráfico 4.22. Factor volumétrico (Bod) en cada expansión del experimento DLE del crudo 4.

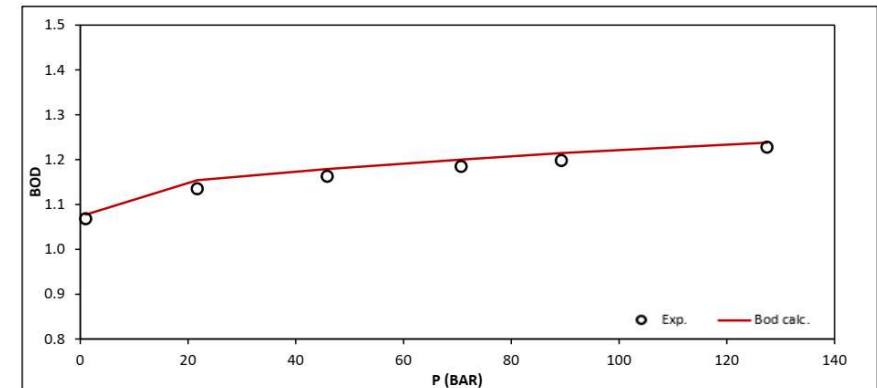


Gráfico 4.16. Factor volumétrico (Bod) en cada expansión del experimento DLE del crudo 3.