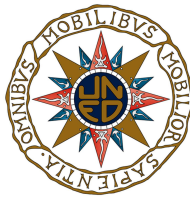


Tesis doctoral
2015

**Contribuciones al modelado dinámico
de procesos termoquímicos en
instalaciones termosolares**



Alberto de la Calle Alonso

Licenciado en Física

Programa de doctorado:
Ingeniería de sistemas y de control

Dirigida por:
Lidia Roca Sobrino
Javier Bonilla Cruz
Sebastián Dormido Bencomo

Contribuciones al modelado dinámico de procesos termoquímicos en instalaciones termosolares

Alberto de la Calle Alonso

Memoria que se presenta para optar al título de Doctor

Madrid, a 10 de julio de 2015

Departamento de Informática y Automática
Escuela Técnica Superior de Informática
Universidad Nacional de Educación a Distancia

Copyright © Alberto de la Calle

*A Almería,
mi tierra y mi gente*

Agradecimientos

Hace ya más de 5 años me embarqué en uno de los mayores retos que he aceptado en mi vida. Sin duda el trabajo que requiere la realización de una tesis doctoral es incommensurable. No voy a mentir si os digo que alguna vez he tenido dudas, pero bueno, los que me conocéis ya sabéis lo cabezón que soy (a veces) y si digo que yo puedo hacerlo, ¡es que puedo! Aquí tenéis un trocito de mí. Hay sangre, sudor y lágrimas, pero también hay cariño, felicidad y risas. Esta es la prueba de que Darwin tenía razón: adáptate o muere. La experiencia vivida me hace valorar aún más las contribuciones desinteresadas de los demás. Si miro hacia atrás, no hay más que palabras de agradecimiento para todos aquellos que habéis hecho posible esto.

En primer, lugar quiero dar las gracias al CIEMAT y a la Plataforma Solar de Almería por haberme permitido formar parte de esta gran institución. Gracias también a la Universidad de Almería y al CIESOL por haberme acogido y darme un pequeño respiro.

Gracias a mis directores a los que tantos dolores de cabeza les he dado. Gracias Lidia, excelente científica y mejor persona, si a día de hoy tenemos tesis es por ti. Gracias por todo, por no rendirte nunca. Gracias Javier, mi compañero, amigo, apoyo, confidente, director, corrector, traductor, técnico informático y profesor. Fíjate si te aprecio que hasta te perdono tus colores. Gracias Sebastián, porque siempre me has dicho qué era lo mejor para mí, por tus consejos y tu constante apoyo.

Gracias al profesor François E. Cellier por invitarme a hacer una estancia en el Instituto Federal de Tecnología de Zúrich (ETH). Allí tuve el privilegio de asistir a sus clases y el honor de trabajar con él. Gracias por enseñarme lo que esconden las ecuaciones, por escuchar mis ideas y por participar en mis batallas. Ya ves en lo que han quedado nuestros planes, pero la tesis tenía los suyos propios. Ojalá algún día podamos terminar el trabajo que empezamos.

Gracias en general a todo el personal de la PSA, los que están y los que ya no están, por luchar por la energía solar. Gracias Diego (Alarcón) por todo el tiempo que te he robado y nunca poner mala cara, por enseñarme casi todo lo que sé de la bomba de calor, por los planos, las especificaciones, los archivadores y toda la documentación que me has buscado a lo largo de todos estos años. Gracias Patricia, por ser tan buena amiga, por cuidarme la bomba, por cederme la MED, por enseñarme a operar, por tus planos, tus fotos, tus datos, por ser tan chapas, por darme las llaves de tu casa, de tu coche, por cuidar de mí y por estar ahí. Gracias Rafa por dar vida a las plantas, por cuidarlas y que

no se mueran, por pasar calor, por la cerveza, por jugar con los niveles y por hacerme los turnos. Gracias Agustín, por vigilar desde el otro lado, por tus dibujos, por tus chistes y por tus cafés. Gracias a las jefas del laboratorio, Isa y Eli, por hacer mis mejunjes con una sonrisa. Gracias Raquel, por contestarme mil preguntas, por buscarme datos, por tu termodinámica química y por esa gracia manchega. Gracias Sixto por confiar en mí. Gracias a becarios, el futuro de la ciencia está en vuestras manos. Sé que es duro, no os rindáis. Gracias Juanlu, David ¡se os echa de menos! Gracias Nacho (Maldonado) por ser un tío raro capaz de sacarle una sonrisa a cualquiera. Gracias también a Rocío (Baños), esa artistaza que me ha hecho la portada. Muchas gracias guapa, te debo unas cañas.

Gracias a mis compañeros del grupo de Automática, Robótica y Mecatrónica por adoptarme. Realmente sois una familia y me habéis hecho sentir uno más. Gracias por los cafés, las comidas, las barbacoas, los cumpleaños, las loterías, las tesis, los debates futbolísticos, científicos o políticos. Gracias María del Mar por organizarlo siempre todo, por ser tan atenta y por hacerme compañía en nuestras aventuras suizas. Gracias Domingo por tus consejos, tus historias y tu revés (aunque hay que seguir practicando). Gracias Nacho, Carlos, Agustín (hijo) con vosotros las mañanas son mejores. Gracias Manolo (Berenguel), Jose Luis, Paco, Julián, Jorge, Andrzej, Pasamontes, Manolo (Pérez), Ricardo, Rafa... ¡Sois muchos! Seguro que se me olvida alguien, no es personal, pero daros todos por agradecidos.

Gracias Almería. Apenas te conocía cuando llegué. Eras una esquinita del mapa, de esas de las que raramente te acuerdas, pero cuando te pones a ver fotos no puedes parar de ver playas increíbles. Comenzar en un sitio siempre es difícil. Como otros antes que yo, llegué solo, en un coche prestado y con una maleta. Entonces, no sabía dónde me iba a meter y poco a poco he llegado a encontrar mi lugar. ¡Si ya soy un almeriense más! He visitado la Alcazaba más veces que nadie, en cualquier lado quiero mi tapa, pido tubo y chipirones y ya (casi) no me equivoco, el taranto es mi palo, cuando llueve quiero mis migas, en el mar no me meto antes de San Juan, el desayuno con tostada salada que no me lo quite nadie, juego (mal) al dominó en el bar del pueblo, me he bañado en todos los rincones del Cabo, he vivido en el desierto, he tocado nieve en Calar Alto, ahora llego tarde a los sitios (aunque todavía creo que debo practicar más), para mí dos calles ya es lejos, los de Madrid nos invaden las playas y si aún hablo fino es por lo mal que se me dan los idiomas. Aquí vi a mi Madrid ganar la décima, a una roja paseando por África y Europa y vibré con el ascenso de mi Almería. He hecho un máster en las Cuatro Calles, y he dejado mi impronta en el Malevaje, el Madchester, la Cueva, el Demodé, el Vhada (con el viejecillo), el Vértice, el Super 8, el Puga, el Chele, la Tasquilla, la Mala...

La suerte, siempre esquiva en lo profesional, fue agradecida en lo personal en esta tierra. He echado amigos, de esos de los que ya no te separas. Gracias a mis perroflaúuticos, mi manada, los cortijeros, la muchachada, compañeros de batallas, copas, cervezas y tapas. Lo que hemos vivido y viviremos. Volvemos como el turrón, somos *Common People* y quedamos en *Holy Shit*, bebemos agua, nos damos la chapa, algunas veces estamos en un vacío legal y tenemos cero credibilidad, pero no hay duda de que segui-

mos molando (alguno más que otro). Gracias Eneko, Fabián, Patri, Lu, Juanlu, Elena, Raquel, Aitor, Nik, Danilo, Carmen y los que seguro que se me olvidan, por todos esos momentos. Vosotros habéis hecho que yo sea feliz aquí. Gracias también a los alemanes del DLR por todas esas fiestas y por la foto de la portada. Y gracias a mi amiga Amalia y a sus arpiós, sois buena gente, gracias por acogerme a pesar de ser un jovencito madrileño de corte moderno.

Gracias también a mis amigos de Madrid, los del cole, los toda la vida. Gracias por estar siempre ahí, a las buenas y a las malas. Perdonadme todo el tiempo que os he quitado por estar con la tesis. Gracias por venir a visitarme aquí (Carlos, esta te la guardo) y a Zúrich, por todas esas risas e historias que nunca paramos de contar, por cuidarme y preocuparos por mí, por escuchar mis movidas y cortar cuando era necesario, por ser tan malos escuderos y “yo y todas mis amigas tenemos novio”, por espantarme a los amigos y ser tan buenos amigos de mis amigos (¡que hasta os quieren más que a mí!), por el “¡Ay Alberto!”, por los berberechos en la playa y por los cochinitos navideños, por el extintor que sirve copas y por toda esa vajilla y cubertería que aún conservo. Gracias Javi, Diego, Álvaro, Juanki y Carlos, y a vosotras que ya sois de la familia Tere, Ro, Carmen y Rocío. Tere, te prometo que siempre has estado invitada a venir. Gracias también a David y Lorena, ¡y por supuesto a mi Gael! Mis vecinitos y confesores, la de mensajes y correos que hemos intercambiado. Por los buenos días, buenas tardes y buenas noches. A pesar de la distancia siempre he sentido como si estuvieseis a mi *laillo*. ¡Gracias majetes! Gracias Padrino por venir a visitame siempre que te he dejado y por nunca (y mira que pase el tiempo) olvidarte de mí. Y gracias a Luis (de la Torre), me adelantaste y mira que yo había cogido carrerilla, ¡nos vemos en la meta!

Por último, mi familia. Sois muchos muchos (los que están, los que llegarán y los que nos abandonaron pero nunca olvidamos). La sucursal del sur os da las gracias. Gracias por vuestro constante apoyo y ánimos, habéis sido un empujón en momentos difíciles. Perdonad el poco tiempo que he podido pasar con vosotros estos años, intentaré compensarlo a partir de ahora. Sabéis que tenéis una casa allá donde vaya a parar. Gracias en especial a mis padres, Mayte y Jaime, lo vuestro sí que es apoyo incondicional, y aunque a veces discutamos, sois los mejores padres que uno podría desear. Y gracias a mi hermano, Javier, la persona del mundo a la que más echo de menos y bien lo sabe. Gracias por todo, esto también es un poquito tuyo. Gracias también a ti Lorena (Pozo), mi cuñada favorita. Sin ti, ahora no tendría al sobrino que más quiero del mundo entero. Gracias Lorenzo, estoy deseando conocerte y algún día, dentro de mucho, contarte mis batallitas sureñas.

Cuando en mi momentazo del día me ponga a escuchar al siempre genial George Harrison, me acordaré de todos vosotros. Y es que *I'm grateful to anyone, that is happy or 'free' for giving me hope while I'm looking to see the light that has lighted the world.*

Resumen

La creciente demanda energética, el agotamiento de las reservas de combustibles fósiles y la amenaza de la irreversibilidad del cambio climático urgen a encontrar una solución al problema energético al que nos enfrentamos. Las energías renovables son una prometedora alternativa como fuentes de energías limpias y virtualmente inagotables. Entre ellas, hay una que motiva esta tesis: la energía solar térmica. Esta tiene la capacidad de poder reemplazar en su mayor parte a los combustibles fósiles en numerosos procesos industriales.

Los tipos de procesos térmicos a los que pueden ser acopladas las plantas termosolares son muy diversos. Pero a pesar de las diferencias que existan entre ellos, los principios y leyes fundamentales que los rigen son comunes. El foco de atención de este documento son los procesos que interrelacionan calor y trabajo con reacciones químicas y cambios de fase, también llamados procesos termoquímicos. El método de estudio de este tipo de procesos es a través del modelado y simulación de sistemas dinámicos, una herramienta capaz de resolver problemas complejos. Precisamente, la contribución original de esta tesis pretende ser un avance en esta técnica aplicada a los procesos termoquímicos que se dan en las instalaciones termosolares.

Para ello, primero se revisa la herramienta. Los conceptos básicos de modelado son expuestos y se destaca la metodología de modelado orientado a objetos como la mejor opción para resolver sistemas complejos. A continuación, se estudian los principales problemas que se originan en la simulación cuando se emplea este tipo de metodología, i.e. la partición, los lazos algebraicos y las singularidades, y se analizan algunos algoritmos para su resolución. Se presenta el lenguaje de modelado con el que se ha trabajado, Modelica, y su entorno de simulación, Dymola.

El siguiente paso es revisar la disciplina científica que se desea modelar. Se introduce la termodinámica química partiendo de los principios y leyes empíricas fundamentales hasta llegar a los desarrollos matemáticos de los principales fenómenos que aquí se tratan, i.e. las reacciones químicas y los cambios de fase. Con ello, se consigue dar un contexto físico y matemático apropiado para poder comprender y mejorar los modelos de este tipo de procesos.

El conocimiento adquirido con ambos estudios, herramienta y disciplina científica, se pone en práctica en tres procesos de diferente naturaleza: la producción de hidrógeno con ciclos termoquímicos de ruptura del agua, la recuperación de la energía por medio

de una bomba de calor de tecnología de absorción y la desalinización de agua salobre mediante la destilación multiefecto. Los modelos de estos tres procesos, asociados con plantas de energía solar térmica, están basados en tres instalaciones reales situadas en CIEMAT-Plataforma Solar de Almería. El objetivo de los trabajos de modelado y simulación para estos sistemas tiene una finalidad muy concreta: que permitan estudiar el comportamiento de las instalaciones en diferentes escenarios y que puedan emplearse para el diseño de sistemas de control avanzado que mejoren la operación de las plantas. Es por ello por lo que los modelos desarrollados deben cumplir con unos requisitos de precisión y esfuerzo computacional determinados.

En la planta de generación de hidrógeno se analiza la dinámica de las reacciones químicas. Esta instalación se basa en la ruptura de la molécula de agua mediante un proceso termoquímico de dos pasos con dos reacciones, una de reducción y otra de oxidación. Para que estas tengan lugar es necesaria una cantidad concreta de potencia térmica, que en este caso, es proporcionada por un campo de heliostatos. Los otros dos sistemas, la bomba de calor y la planta de destilación multiefecto, han permitido analizar la dinámica de los cambios de fase tanto de un fluido monocompuesto (evaporación y condensación) como de uno multicompuesto (absorción y desorción). El primer sistema basa su tecnología en la capacidad que tienen ciertos fluidos líquidos de absorber-desorber vapor a diferentes temperaturas que las de evaporación-condensación de ese vapor. Gracias a esta tecnología se puede extraer calor de un foco frío y cederlo a uno más caliente. Su uso permite recuperar parte del calor perdido por determinados procesos industriales, como por ejemplo la destilación multiefecto. Esta, a su vez, basa su tecnología en una serie de procesos de evaporación y condensación que tienen lugar en una secuencia decreciente de presiones y temperaturas. El acople a gran escala de este tipo de tecnología con plantas termosolares es una prometedora solución en regiones áridas costeras con altos niveles de insolación.

Cada uno de estos ejemplos prácticos ha sido tratado de la misma forma: primero se hace una breve introducción del proceso y se revisan los últimos avances del estado de la tecnología, se describe la planta experimental en la que se basa, se presenta un modelo orientado a objetos, modular y jerárquico del sistema y se finaliza analizando las simulaciones con una calibración y una validación frente a datos experimentales.

Tabla de contenidos

Agradecimientos	VII
Resumen	XI
Tabla de contenidos	XIII
Lista de figuras	XVII
Lista de tablas	XXI
Lista de acrónimos	XXII
Nomenclatura	XXV
1. Presentación	1
1.1. Motivaciones	1
1.1.1. Energía solar térmica	4
1.2. Objetivos	6
1.3. Estructura de la tesis	7
1.4. Contribuciones científicas derivadas	9
2. Modelado y simulación de sistemas dinámicos	13
2.1. Introducción	13
2.2. Conceptos básicos acerca del modelado de sistemas dinámicos	15
2.2.1. Modelado modular y jerárquico de sistemas dinámicos	15
2.2.2. Modelado orientado a objetos de sistemas dinámicos	16
2.2.3. Modularidad y causalidad computacional	17
2.3. Conceptos básicos acerca de la simulación de sistemas dinámicos	18
2.3.1. Transformación de modelos matemáticos para su resolución: solución del problema de la asignación de la causalidad compu- tacional	18
2.3.2. Lazos algebraicos	21

2.3.3.	Singularidades	24
2.3.4.	Índice del problema	26
2.3.5.	Solución de sistemas de ecuaciones no lineales: el método de Newton	26
2.3.6.	Solución eficiente del problema de la causalidad computacional: el algoritmo de Tarjan	28
2.3.7.	Solución eficiente de sistemas de ecuaciones: el algoritmo de tearing	31
2.3.8.	Solución eficiente de sistemas de ecuaciones: el algoritmo de relajación	36
2.3.9.	Eliminación de singularidades estructurales: el algoritmo de Pantelides	38
2.3.10.	Integración numérica: DASSL	43
2.4.	El lenguaje Modelica	44
2.4.1.	Características principales	45
2.4.2.	Fundamentos del lenguaje	45
2.4.3.	Modelica Standard Library	47
2.4.4.	Entornos de simulación: Dymola	48
2.4.5.	FMI	49
2.4.6.	Depuración de errores: incrementar la calidad del modelado	49
2.5.	Herramientas de modelado y simulación utilizadas en esta tesis	50
2.6.	Resumen	51
2.7.	Contribuciones científicas relacionadas	51
3.	Introducción a la termodinámica química	53
3.1.	Introducción	53
3.2.	Definiciones fundamentales	54
3.3.	Principios de la termodinámica	55
3.3.1.	Principio cero	55
3.3.2.	Primer principio	56
3.3.3.	Segundo principio	57
3.3.4.	Tercer principio	57
3.4.	Funciones termodinámicas	58
3.4.1.	Potenciales termodinámicos	58
3.4.2.	Potencial químico	58
3.4.3.	Balances de masa y energía en sistemas abiertos	59
3.4.4.	Ecuación de estado	62
3.4.5.	Termodinámica de disoluciones	65
3.5.	Transferencia de calor	67
3.5.1.	Conducción	67

3.5.2.	Convección	68
3.5.3.	Radiación	69
3.5.4.	Caso práctico: intercambiador de calor	69
3.6.	Termodinámica de cambios de fase	71
3.6.1.	Conservación de la energía en un cambio de fase	74
3.7.	Casos prácticos de cambios de fase I: condensación y ebullición	76
3.7.1.	Condensación	76
3.7.2.	Ebullición	80
3.8.	Casos prácticos de cambios de fase II: absorción y desorción	90
3.9.	Termodinámica de reacciones químicas	92
3.10.	Resumen	97
4.	Modelado y simulación de una planta de generación de hidrógeno	99
4.1.	Introducción	99
4.2.	Descripción del sistema	102
4.3.	Modelado dinámico	104
4.3.1.	Modelo del campo de heliostatos	105
4.3.2.	Modelo de la planta de procesamiento	107
4.4.	Simulación dinámica	113
4.4.1.	Calibración	113
4.4.2.	Validación	115
4.5.	Resumen	120
4.6.	Contribuciones científicas relacionadas	121
5.	Modelado y simulación de una bomba de calor de doble efecto	123
5.1.	Introducción	123
5.2.	Descripción de la planta	134
5.2.1.	Descripción interna de la bomba de calor	140
5.3.	Modelado dinámico	142
5.3.1.	Nivel 1	142
5.3.2.	Nivel 2	171
5.3.3.	Nivel 3	175
5.4.	Simulación dinámica	176
5.4.1.	Calibración	178
5.4.2.	Validación	185
5.5.	Resumen	189
5.6.	Contribuciones científicas relacionadas	190
6.	Modelado y simulación de una planta de destilación multiefecto	193
6.1.	Introducción	193

6.2. Descripción de la planta	195
6.2.1. Descripción interna de las celdas	200
6.3. Modelado dinámico	201
6.3.1. Nivel 1	202
6.3.2. Nivel 2	204
6.3.3. Nivel 3	207
6.4. Simulación dinámica	209
6.4.1. Calibración	211
6.4.2. Validación	212
6.5. Resumen	214
6.6. Contribuciones científicas relacionadas	215
7. Conclusiones y futuras líneas de investigación	217
7.1. Conclusiones	217
7.2. Futuras líneas de investigación	220
A. Propiedades termodinámicas para modelado dinámico	227
A.1. Introducción	227
A.2. Propiedades termodinámicas del agua	228
A.3. Propiedades termodinámicas del agua de mar	230
A.4. Propiedades termodinámicas del bromuro de litio	232
A.5. Modelica.Media	236
B. Trabajos de instrumentación de la bomba de calor de doble efecto	237
B.1. Introducción	237
B.2. Instalación de la instrumentación	237
B.3. Consideraciones sobre los datos experimentales	241
Bibliografía	243

Lista de figuras

1.1. Captadores solares más comunes (Romero-Alvarez y Zarza, 2007)	5
1.2. Estructura de la tesis	9
2.1. Circuito de ejemplo: partición	19
2.2. Circuito de ejemplo: lazo algebraico	22
2.3. Circuito de ejemplo: singularidad estructural	25
2.4. Aplicación del algoritmo de Tarjan al sistema de la Fig. 2.1	29
2.5. Tearing	32
2.6. Aplicación del algoritmo de tearing al sistema de la Fig. 2.2	33
2.7. Diagrama de estructura del lazo algebraico	34
2.8. Aplicación del algoritmo de Pantelides al sistema de la Fig. 2.3	40
2.9. Aplicación del algoritmo de Pantelides al sistema de la Fig. 2.3 (conti- nuación)	42
2.10. Los tres lazos de simulación (Cellier y Kofman, 2006)	43
3.1. Disolución real (Aguilar, 2001).	67
3.2. Diagrama p-T de las fases del agua (Kreith, 2000)	73
3.3. Condensación sobre tubos horizontales	77
3.4. Curva de Nukiyama (Çengel y Ghajar, 2011)	82
3.5. Principales patrones de flujo bifásico en tuberías horizontales (Romero- Alvarez y Zarza, 2007)	86
3.6. Modos idealizados de drenaje: (a) por gotas (b) por columna (c) por cortina (Mitrovic, 1986)	87
4.1. Cinco caminos termoquímicos para la producción de hidrógeno solar (Steinfeld, 2005)	100
4.2. Detalle de las instalaciones de la planta piloto Hydrosol II	103
4.3. Diagrama de flujos de la planta piloto Hydrosol II	104
4.4. Esquema de modelado	105
4.5. Esquema del modelo del campo de heliostatos	106
4.6. Esquema del modelo de la planta de procesamiento (diseño térmico) . .	107

4.7. Esquema del modelo de la planta de procesamiento (diseño químico) . . .	110
4.8. Esquema del modelo de la planta de procesamiento (diseño inverso) . . .	112
4.9. Entradas al modelo para su validación	116
4.10. Validación de la potencia solar concentrada y el comportamiento térmico	117
4.11. Simulación del comportamiento químico	118
4.12. Validación del comportamiento inverso	119
4.13. Comparación de las frecuencias de corte del filtro	120
5.1. Esquema genérico de una bomba de calor	124
5.2. Ejemplos de tecnologías de bombas de calor (Herold et al., 1996)	125
5.3. Bomba de calor de agua-bromuro de litio de un solo efecto (Herold et al., 1996)	126
5.4. Bomba de calor de agua-bromuro de litio de doble efecto (Herold et al., 1996)	128
5.5. Curva del equilibrio sólido-líquido para la disolución agua-bromuro de litio en función de la temperatura y la fracción molar (Pátek y Klomfar, 2006b)	130
5.6. Diagrama de flujos del sistema experimental de desalinización solar AQUASOL	134
5.7. DEAHp en la Plataforma Solar de Almería	136
5.8. Diagrama de flujos de la DEAHp	137
5.9. Ciclo termodinámico de la DEAHp	139
5.10. Balance energético de la DEAHp	139
5.11. Sección transversal de la DEAHp	140
5.12. Modelos de nivel 1	143
5.13. Modelos intermedios del evaporador de película descendente (diseño detallado)	154
5.14. Modelos de nivel 2	172
5.15. Encapsulación de los modelos de nivel 2 (I)	173
5.16. Encapsulación de los modelos de nivel 2 (II)	174
5.17. Composición final del modelo de la DEAHp	176
5.18. Entradas y salidas del modelo, calibración (I)	180
5.19. Entradas y salidas del modelo, calibración (II)	181
5.20. Entradas y salidas del modelo, calibración (III)	182
5.21. Entradas y salidas del modelo, validación (I)	186
5.22. Entradas y salidas del modelo, validación (II)	187
5.23. Entradas y salidas del modelo, validación (III)	188
6.1. Planta MED en la Plataforma Solar de Almería	196
6.2. Diagrama de flujos de la planta MED del sistema AQUASOL	198
6.3. Vista de las secciones transversales de las celdas	200

6.4. Modelos de nivel 1	203
6.5. Modelos de nivel 2	205
6.6. Encapsulación de los modelos de nivel 2	206
6.7. Composición final del modelo de la planta MED	208
6.8. Entradas y salidas del modelo, validación (I)	213
6.9. Entradas y salidas del modelo, validación (II)	214
A.1. Regiones y ecuaciones de IAPWS-IF97(IAPWS, 1997)	229
A.2. Análisis de la función inversa $T(h,w)$ para el agua de mar	232
B.1. Sistema de supervisión, control y adquisición de datos	238
B.2. Instalación de los caudalímetros (I)	239
B.3. Instalación de los caudalímetros (II)	240
B.4. Fracciones másicas medidas el 26-05-2014	242

Lista de tablas

2.1.	Aplicación del algoritmo de partición	20
2.2.	Aplicación del algoritmo de partición: lazo algebraico	22
2.3.	Resolución del lazo	23
2.4.	Aplicación del algoritmo de partición: lazo algebraico (continuación)	23
2.5.	Aplicación del algoritmo de partición: singularidad estructural	25
2.6.	Aplicación del algoritmo de partición: singularidad estructural (continuación)	26
2.7.	Enumeración de las ecuaciones de la Fig. 2.1	28
3.1.	Valores de C_R y n_R para varias combinaciones de sólido-líquido (Incropera et al., 2012)	84
4.1.	Parámetros del modelo	115
5.1.	Propiedades de los fluidos de trabajo en máquinas de absorción (Herold et al., 1996)	125
5.2.	Detalles de los haces tubulares de la DEAHP	141
5.3.	Parámetros del modelo (Asignados)	184
5.4.	Parámetros del modelo (Calibrados)	185
6.1.	Especificaciones de diseño de la planta MED instalada en la Plataforma Solar de Almería (Palenzuela et al., 2013a)	199
6.2.	Parámetros del modelo	211
6.3.	Incertidumbre en la medida y error medio de simulación absoluto y porcentual para el día de validación	215
A.1.	Coefficientes de la entalpía específica para el agua de mar (Sharqawy et al., 2010)	231
A.2.	Comparación de propiedades termodinámicas del bromuro de litio	233
A.3.	Coefficientes de la entalpía específica para el bromuro de litio (Kaita, 2001)	235
A.4.	Coefficientes de la presión de vapor para el bromuro de litio (Kaita, 2001)	235

Lista de acrónimos

AD.....	<i>Adsorption desalination</i>
BDF.....	<i>Backward differentiation formula</i>
COP.....	<i>Coefficient of performance</i>
CPCs.....	<i>Concentradores parabólicos complejos</i>
CV.....	<i>Control volume</i>
DAEs.....	<i>Differential-algebraic equations</i>
DASSL.....	<i>Differential/algebraic system solver</i>
DEAHP.....	<i>Double effect absorption heat pump</i>
EES.....	<i>Engineering Equation Solver</i>
FMI.....	<i>Functional mock-up interface</i>
IAPWS.....	<i>International Association for the Properties of Water and Steam</i>
MED.....	<i>Multi-effect distillation</i>
M&S.....	<i>Modelado y simulación</i>
MSF.....	<i>Multi-stage flash distillation</i>
MSL.....	<i>Modelica Standard Library</i>
RO.....	<i>Reverse osmosis</i>
TBT.....	<i>Top brine temperature</i>

Nomenclatura

Letras latinas

Símbolo	Descripción	Unidades (SI)	Capítulo
A	Matriz de coeficientes	-	2
<i>A</i>	Elemento de la matriz de coeficientes	-	2
<i>A</i>	Afinidad química	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$	3
<i>A_s</i>	Área o superficie	m^2	3-6
a	Vector de aristas	-	2
<i>a</i>	Arista	-	2
B	Matriz de incidencia	-	2
<i>B</i>	Elemento de la matriz de incidencia	-	2
<i>B</i>	Elemento químico	-	3
b	Vector de términos independientes / booleanos	-	2/4
<i>b</i>	Términos independientes / booleanos	-	2/4
<i>C</i>	Capacidad eléctrica	F	2
<i>C_d</i>	Coficiente de descarga	adimensional	3
<i>C_p</i>	Capacidad calorífica isobárica	$\text{J} \cdot \text{K}^{-1}$	3
<i>C_v</i>	Capacidad calorífica isócara	$\text{J} \cdot \text{K}^{-1}$	3
<i>C_w</i>	Concentración másica	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	3
<i>C_x</i>	Concentración molar	$\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$	3
<i>COP</i>	Coficiente de rendimiento	adimensional	5
<i>c_p</i>	Calor específico isobárico	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$	3-6,A
<i>cross</i>	Parámetro de cruce	-	5
<i>D</i>	Coficiente de difusión	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	3,A
<i>D_i</i>	Diámetro interior	m	5,6
<i>D_o</i>	Diámetro exterior	m	5,6
<i>E</i>	Energía	J	3
<i>e</i>	Ecuación	-	2
<i>eps</i>	Epsilon	-	5
<i>F</i>	Función de Helmholtz	J	3
<i>F₁₂</i>	Factor de forma	adimensional	3,4
<i>F_A</i>	Coficiente de área mojada aparente	adimensional	3,5

Símbolo	Descripción	Unidades (SI)	Capítulo
F_V	Coefficiente de volumen mojado aparente	adimensional	5
G	Grafo	-	2
G	Función de Gibbs	J	3
g	Función de Gibbs específica	$J \cdot kg^{-1}$	3,A
g	Aceleración gravitacional	$m \cdot s^{-2}$	3
H	Entalpía	J	3,5
h	Entalpía específica	$J \cdot kg^{-1}$	3-6,A
I	Irradiancia solar directa	$W \cdot m^{-2}$	4
i	Intensidad eléctrica	A	2
L	Inductancia / Calor latente de vaporización	$H / J \cdot kg^{-1}$	2/3,5
L^+	Calor latente de vaporización modificado	$J \cdot kg^{-1}$	3,5
l	Longitud	m	3,5,6
l_c	Longitud característica	m	3
M	Peso atómico	$kg \cdot mol^{-1}$	2
m	Masa	kg	3-6
mix	Parámetro de extracción	-	6
N	Número	-	3-6
Nu	Número de Nusselt	adimensional	3,5
n	Número de moles	mol	3,4
K	Constante másica de los gases ideales	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	5
k	Conductividad térmica	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	3,5,A
k_p	Constante cinética referida a presiones	-	3
k_C	Constante cinética referida a concentraciones	-	3
k_n	Constante cinética referida a número de moles	-	3
k_{arr}	Constante cinética de Arrhenius	-	3,4
P	Potencia	W	3,4
Pr	Número de Prandl	adimensional	3,5
p	Presión	Pa	3-6,A
Q	Calor	J	3-6
q	Calor por unidad de superficie	$J \cdot m^2$	3
R	Resistencia / Constante de los gases ideales	$\Omega / J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$	2/3
Ra	Número de Rayleigh	adimensional	3,5
Re	Número de Reynolds	adimensional	3,5
r	Radio	m	3,5
S	Entropía	$J \cdot K^{-1}$	3
Sh	Número de Sherwood	adimensional	3
s	Entropía específica	$J \cdot K^{-1} \cdot kg^{-1}$	3,A
T	Temperatura	K	3-6,A

Símbolo	Descripción	Unidades (SI)	Capítulo
t	Tiempo	s	2-3
U_0	Potencial eléctrico (fuente)	v	2
U	Energía interna	J	3,4
u	Variable de entrada	-	2
u	Potencial eléctrico / Energía interna específica	v / J · kg ⁻¹	2,3
V	Volumen	m ³	3-6
\mathbf{v}	Vector de vértices	-	2
v	Vértice	-	2
v	Volumen específico	m ³ · kg ⁻¹	3
W	Trabajo	J	3
w	Fracción másica	adimensional	3-6,A
\mathbf{x}	Vector de incógnitas / Vector espacial	- / m	2/4
x	Variable incógnita / estado	-	2
x, y, z	Coordenadas espaciales	m	3
x	Fracción molar	adimensional	3
y	Variable de salida	-	2
y	Apertura de válvula	adimensional	3,4
Z	Velocidad de reacción	mol · s ⁻¹	3,4
Z_C	Velocidad de reacción referida a concentración	mol · s ⁻¹ · m ⁻³	3
z	Variable incógnita auxiliar	-	2
z	Elevación	m	3

Letras griegas

Símbolo	Descripción	Unidades (SI)	Capítulo
Γ	Flujo másico por unidad de longitud	kg · s ⁻¹ · m ⁻¹	3,5
Λ	Atenuación atmosférica	adimensional	3,4
α	Coficiente de transferencia de calor	W · m ⁻² · K ⁻¹	3-6
α_{dif}	Coficiente de transferencia de masa	W · m ⁻² · K ⁻¹	3
β	Coficiente de expansión térmica	K · m ⁻¹	3
γ	Coficiente de dilatación adiatérmica	adimensional	3,4
δ	Espesor	m	3,5
ε	Emisividad	adimensional	3
η	Viscosidad dinámica	kg · m ⁻¹ · s ⁻¹	3,5,A
η_{he}	Factor auxiliar intercambiador de calor	adimensional	5
κ	Coficiente de pérdidas ópticas	adimensional	4
θ	Coordenada angular	Rad	3,4
θ_{he}	Factor auxiliar intercambiador de calor	adimensional	3,5
μ	Potencial químico	J · mol ⁻¹	3
ν	Coficiente estequiométrico	adimensional	3

Símbolo	Descripción	Unidades (SI)	Capítulo
ξ	Grado de avance	mol	3
ρ	Densidad	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	3,5,6,A
σ	Tensión superficial	$\text{N} \cdot \text{m}^{-1}$	3,A
σ_{sb}	Constante de Stefan-Boltzmann	$\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$	3
τ	Tensión tangencial	Pa	3
v	Velocidad	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	3

Superíndices

Símbolo	Descripción
χ^*	Magnitud específica molar
χ^\diamond	Magnitud molar parcial
χ°	Magnitud de referencia
χ^P	Magnitud del elemento puro
χ^M	Magnitud de exceso o mezcla
χ^{eq}	Constante cinética de equilibrio

Subíndices

Símbolo	Descripción
1,2,3,...	Referencias
a,b,c,...	Referencias
A	Elemento A
AB	Elemento A en B
B	Elemento B
a	Acimutal
ac	Activación
ad	Adiabático
av	Media
bot	En la parte inferior del tubo
col	Columna
con	Condensación
conv	Convectivo
C	Condensador
dir	Directa
dif	Difusivo
e	Elevación
eq	Equivalente
ev	Evaporación / ebullición
f	Película
g, gas	Gas
gen	Generación

Símbolo	Descripción
h	Helioestado
hr	Helioestado-receptor
he	Intercambiador de calor
i	Incidencia
in	Entrada
inner	Entrante
inv	Inversa
L	Inductor
l	Líquido
lim	Capa límite
mea	Medida
new	Nuevo
nom	Nominal
o	Orificio
out	Salida
outer	Saliente
par	Paralela
pt	Cambio de fase
R	Resistencia
r	Receptor
rad	Radiativo
reac	Reactor
reg	Regeneración
rev	Reversible
row	Fila
sat	Saturación
sim	Simulada
sl	Saturación del líquido
sol	Soluto
sv	Saturación del vapor
sun	Sol
T	Total
t	Tubo
tank	Depósito
top	En la parte superior del tubo
onset	Límite
v	Vapor
w	Pared
wet	Mojado
θ	Ángulo
∞	Alejado de la capa límite

Operadores y funciones matemáticas

Símbolo	Descripción
$\dot{\chi}$	Primera derivada temporal de χ
$\ddot{\chi}$	Segunda derivada temporal de χ
$d\chi$	Diferencial de χ
$\Delta\chi$	Incremento de χ
$\delta\chi$	Diferencial inexacta de χ
$\partial\chi$	Diferencial parcial de χ
$f(\chi)$	Función de χ
$\mathcal{F}(\chi)$	Función cero de χ
$\mathcal{J}(\chi)$	Matriz jacobiana de χ
$ \chi $	Norma / Determinante de χ
$\int d\chi$	Integral de χ
$\oint d\chi$	Integral cíclica de χ
Σ	Sumatorio
e^{χ}	Exponencial de χ
\lim	Límite
$\ln(\chi)$	Logaritmo neperiano de χ
$\log(\chi)$	Logaritmo en base 10 de χ
$\text{máx}(\chi)$	Función máximo de χ
$\text{mín}(\chi)$	Función mínimo de χ

Coficientes empíricos

Símbolo	Descripción	Ecuación	Unidades (SI)
$A_1 - D_4$	Coficientes entálpicos de Kaita para el bromuro de litio	A.4	-
$A_{01} - A_{23}$	Coficientes térmicos de Kaita para el bromuro de litio	A.5	-
$a_1 - a_4$	Coficientes entálpicos de Sharqawy para el agua pura	A.2	-
a_w, b_w	Constantes de Van der Waals	3.55	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
$b_1 - b_{10}$	Coficientes entálpicos de Sharqawy para el agua de mar	A.1	-
C_R, n_R	Constantes experimentales de Rohsenow	3.128	adimensional
c_1, c_2, c_3	Constantes experimentales de Sernas	3.131	adimensional
k_0, k_1, k_2	Coficientes béricos de McNeely para el bromuro de litio	A.6	-

Capítulo 1

Presentación

*When you're absolute beginners,
it's a panoramic view
from her majesty Mount Zion
and the kingdom is for you.¹*

M. Ward
(Letra de M. Ward)

1.1. Motivaciones

Estamos rodeados de energía. Es una propiedad común de todos los sistemas físicos. Cualquier mínimo cambio en ellos puede ser explicado como una transformación de esta propiedad. La conservación de la energía es algo que hemos observado desde siempre, y no nos extraña que sea una consecuencia de la forma en la que vemos el universo². Esta conservación es de una dimensión universal. Sin embargo, la irreversibilidad de algunas transformaciones de energía hace que localmente esta pueda ser percibida como un bien intermedio. Ciertas formas de energía útiles, tras un proceso de cambio del estado físico de un sistema, se transforman en otras que ya no son útiles para repetir el proceso.

Existe una vinculación entre vida y energía. La supervivencia de cualquier organismo implica un gasto energético. Transformamos ciertas formas de energía en otras, y lo hacemos, de una forma continua e irreversible. Tenemos tan interiorizado este proceso, que el ser humano ha sido capaz de exteriorizarlo para contribuir a su bienestar y a su desarrollo de manera directa. El consumo de energía hace funcionar al mundo tal y como lo conocemos.

Hasta ahora, el nivel de desarrollo de una sociedad se ha medido en función de la

¹trad.: Cuando sois totalmente principiantes, es una vista panorámica desde el majestuoso Monte Sión y el reino es para vosotros.

²El teorema de Noether, que liga las simetrías de la naturaleza con leyes de conservación, explica la conservación de la energía como una consecuencia directa de que las ecuaciones de evolución de los sistemas físicos son independientes respecto a una translación en el tiempo.

cantidad de energía per cápita que ha sido capaz de consumir. Se consume más que nunca, y las previsiones son que este consumo vaya en aumento. De acuerdo con el informe de la Agencia Internacional de la Energía (IEA, 2014), la demanda de energía aumentará en un 37 % entre 2014 y 2040.

Pero, ¿de dónde procede toda esta energía? Desde que dimos nuestros primeros pasos en la Tierra, el ser humano ha buscado incansablemente fuentes de energía para asegurar su propia existencia. Las fuentes de energía son recursos naturales, y en algunos casos, irremplazables. Una de las mayores revoluciones de la historia fue la introducción masiva de los combustibles fósiles como fuente energética en el mercado. El grado de desarrollo que la sociedad ha dado en los últimos dos siglos no puede entenderse sin la quema de estos combustibles. Actualmente, acaparan entre el 76 y 87 % del mercado energético (REN21, 2010; British Petroleum, 2014). Su accesibilidad, compacidad, facilidad de uso bajo demanda y sobre todo su precio son algunos de los motivos por los que siguen siendo los reyes indiscutibles del mercado.

Dejando de lado el conflicto político-social que plantean los combustibles fósiles sobre la distribución de la riqueza en el mundo, el hecho es que existen dos problemas actualmente irresolubles relacionados con ellos. El primero, es que la quema de estos combustibles está alterando el entorno en el que vivimos, quizá de una forma irreversible. La emisión masiva de gases de efecto invernadero al ambiente como residuos de esta quema, está cambiando la composición de la atmósfera. Estos gases necesarios para la vida, y presentes en la Tierra desde siempre, son emitidos y reabsorbidos por los organismos vivos que la pueblan. Sin embargo, desde la irrupción de esta fuente de energía, la capacidad de reabsorción de estos gases se ha visto desbordada y su acumulación en la atmósfera está provocando un rápido calentamiento de la Tierra. Ya en 1990 el Grupo Intergubernamental de Expertos sobre el Cambio Climático (IPCC, 1990), estimaba que era necesaria una reducción entre el 60 y 80 % de las emisiones de CO₂. Después de numerosos congresos internacionales, los países mas industrializados tomaron conciencia del problema, y se estableció un marco legal para limitar las emisiones de gases a niveles similares a los del año 1990 para el 2010 (UNFCCC, 1998)³. Los objetivos estratégicos de la Unión Europea para el año 2020 referentes a este problema⁴ son: reducir las emisiones de gases de efecto invernadero un 20 % respecto a los niveles de 1990, incrementar el porcentaje de las fuentes de energía renovables en el consumo final de energía hasta un 20 % y mejorar la eficiencia energética un 20 % (European Commission, 2013).

El segundo problema de los combustibles fósiles es que son un bien escaso. Son fuentes de energía procedentes de recursos naturales limitados. Dado que no podemos generar nuevos, al consumirlos estamos más cerca de agotarlos. Si cada vez demandamos más, y cada vez hay menos, parece una mera cuestión de tiempo llegar a un colapso. Sin embargo, los últimos cambios energéticos en la historia no se han producido por la extinción de la anterior fuente energética primaria, sino más bien, porque su extracción

³Conocido como Protocolo de Kyoto.

⁴Conocidos como objetivo 20/20/20.

era cada vez más costosa hasta llegar al punto en el que el precio de la energía favorecía a una nueva fuente. Pasó primero con la madera y el carbón, y más tarde con el carbón y el petróleo.

Ahora, el petróleo se agota. Si bien es cierto que aún no se sabe a ciencia cierta cuándo se va a tocar techo⁵, sí que se espera que sea inminentemente⁶ o incluso que esto ya haya sucedido⁷. La mejora de la eficiencia energética permitirá alargar el tiempo de vida de los recursos, pero no impedirá en ningún caso que las reservas sigan disminuyendo. La búsqueda de nuevas fuentes de energía que sean capaces de remplazar a las actuales es un objetivo prioritario para la humanidad.

Si hemos aprendido algo del pasado en esta constante búsqueda, la palabra clave para volver a ella ha de ser “sostenibilidad”. Debemos encontrar la forma de satisfacer nuestras necesidades energéticas sin sacrificar la capacidad de las futuras generaciones para que satisfagan las suyas propias. Y además, tenemos que hacerlo sin que nuestro impacto en la Tierra suponga un peligro para nuestra propia supervivencia.

Las fuentes de energía renovables son una prometedora alternativa. Reúnen la cualidad de ser virtualmente inagotables, bien sea por la inmensa cantidad de energía que contienen, o por su capacidad para regenerarse. El origen de la energía en este tipo de fuentes es muy diverso, y pueden clasificarse en limpias y contaminantes. En el primer grupo se incluyen aquellas cuyo impacto ambiental es mínimo, e.g. eólica, solar, hidráulica, geotérmica, etc. El segundo grupo, de origen orgánico⁸, emiten gases de efecto invernadero.

Las energías renovables no son nuevas para nosotros. Han sido un pilar importante en el que se ha basado nuestro desarrollo desde tiempos remotos. ¿Qué hubiera sido de nosotros si no hubiéramos podido desplazarnos rápidamente aprovechando la fuerza del viento (navegación a vela), o aprovechar la fuerza del agua para realizar tareas que nosotros no podíamos hacer (molinos de agua) o incluso haber aprovechado el calor del sol en nuestras construcciones y hacerlas más habitables (eficiencia energética de construcciones)? El reto que ahora se nos plantea es cómo reconvertir este conocimiento adquirido para que se pueda aprovechar en los procesos que hoy en día guían nuestra economía.

Con esta tesis, ni mucho menos se pretende plantear una solución al problema energético al que debemos enfrentarnos, pero sí, al menos hacer una pequeña contribución en ella. La apuesta por la energía solar térmica en la tesis es clara: es una de las posibles alternativas a los combustibles fósiles. Sus ventajas son muchas (e.g. almacenamiento térmico, buena conexión con procesos térmicos,...), pero lo son también sus desventajas (e.g. variabilidad de la fuente, precio,...) las cuales no deben ser despreciadas. Es precisamente tarea de los investigadores conseguir sacar partido de las primeras y tratar

⁵Se dice que una fuente energética “toca techo” cuando aproximadamente la mitad de las reservas recuperables estimadas del mundo han sido explotadas.

⁶Campbell y Laherrère (1998) y MacKenzie (1998) estimaron que sería entre el 2010 y el 2020.

⁷Según la Agencia Internacional de la Energía esto ocurrió en 2006 (IEA, 2010).

⁸Fundamentalmente aquí se incluye la biomasa.

de mitigar las segundas para lograr hacerla una fuente de energía competitiva. Aún hay mucho trabajo por delante para que pase de ser “una posibilidad” a “una realidad”.

Aquí, no se trata el modo en el que la energía es capturada (a continuación se hará una breve introducción de esto), sino la forma en la que ésta energía puede ser aprovechada. Si bien es cierto que la energía eléctrica por su facilidad de conversión es la más demandada por la sociedad, la mayoría de los procesos industriales también requieren de energía térmica. De acuerdo al informe de la Agencia Internacional de la Energía, el 30% de la energía del mundo es consumida por la industria (IEA, 2006), y de esta, entre el 45 y 65% es directamente aplicada en procesos térmicos en la preparación y tratamiento de bienes de consumo (Fernández-García et al., 2010).

Los tipos de procesos térmicos a los que pueden ser acopladas las plantas de energía solar térmica son muy diversos, de los cuales, en este documento se van a tomar como ejemplo tres: la generación de hidrógeno con ciclos termoquímicos de ruptura del agua, la obtención de calor con una bomba de calor y la desalinización por destilación multi-efecto. A pesar de las evidentes diferencias entre ellos, los principios y las leyes físicas que los rigen son comunes. El estudio de las transformaciones que sufre la energía calorífica en las reacciones químicas y en los cambios de fase se llama termoquímica. Y es precisamente en el estudio de los procesos termoquímicos en los que se basa esta tesis.

Para este estudio, se hace uso del modelado y la simulación como una herramienta capaz de resolver problemas. El creciente interés que suscita en la comunidad científica esta técnica está provocando su rápido desarrollo y su expansión a nuevas disciplinas. Las contribuciones que en este documento de tesis se van a exponer pretenden ser un avance en el desarrollo y perfeccionamiento de esta técnica aplicada a los procesos termoquímicos en las instalaciones termosolares.

1.1.1. Energía solar térmica

El Sol, la estrella que se encuentra en el centro de nuestro sistema planetario, es la principal fuente energética de la Tierra a pesar de la distancia que los separa. Es un enorme reactor de fusión y podría considerarse como un cuerpo negro emitiendo continuamente radiación a 5777 K, de la cual, la Tierra intercepta una potencia aproximada de $1,7 \cdot 10^{14}$ kW. Pero no toda esta radiación llega a la superficie terrestre, una parte es reflejada y otra parte se pierde en procesos de absorción y difusión que se producen en la atmósfera.

La irradiancia es la magnitud que se usa para describir la potencia incidente por unidad de superficie para todo tipo de radiación. La irradiancia solar que se mide en la superficie de la tierra tiene tres componentes: una directa, procedente del ángulo sólido centrado en el disco solar y que tiene una trayectoria bien definida; otra difusa, procedente de la interacción de la radiación solar con las sustancias presentes en la atmósfera y que no tiene una trayectoria definida; y una reflejada, consecuencia de la reflexión de la radiación solar sobre la superficie de la tierra y que tampoco tiene una trayectoria definida. De estas tres, solo la irradiancia solar directa puede ser concentrada.

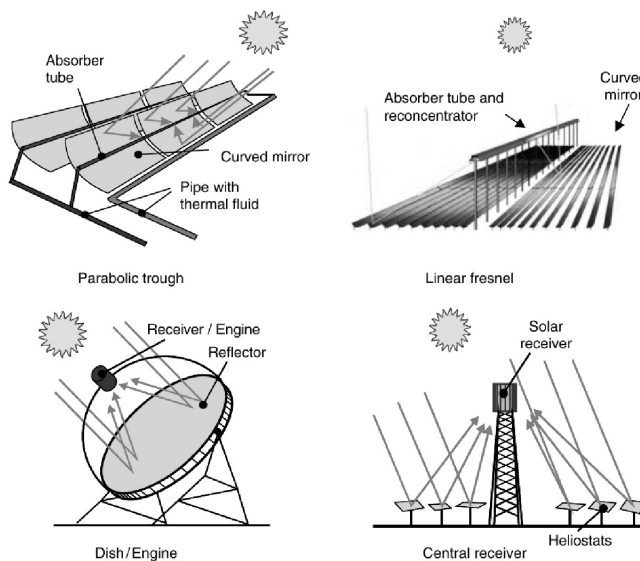


Figura 1.1: Captadores solares más comunes (Romero-Alvarez y Zarza, 2007)

En los días soleados, la irradiancia solar ligeramente supera 1 kW/m^2 , que es una cantidad insuficiente para hacer viable la mayoría de los procesos industriales. De acuerdo con el segundo principio de la termodinámica, a mayor temperatura mayor eficiencia de la máquina térmica. Si se concentra la irradiancia, el aporte de calor sobre la máquina aumenta consiguiendo esta mayor temperatura y por tanto mayor eficiencia. La razón de concentración se define como la relación entre el área neta de captación del elemento concentrador (llamado captador) y el área neta de captación del elemento receptor. El límite teórico que tiene esta razón es el que le impone el propio Sol, que al no ser una fuente puntual de radiación desde la superficie de la tierra subtende un ángulo sólido de $32'$ que establece un valor máximo teórico de 46200 para concentradores tridimensionales y 215 para concentradores bidimensionales (Romero-Alvarez y Zarza, 2007). Evidentemente, los concentradores ópticos disponibles se quedan a varios órdenes de magnitud de esta razón como se verá más adelante.

En las plantas termosolares, los requisitos de tamaño y económicos hacen que generalmente los captadores sean de tipo reflexivo. Salvo algunas excepciones, e.g. lentes, la gran mayoría se basa en la ley de Snell; según la cual el ángulo que forma el rayo reflejado con la normal a la superficie es igual al de incidencia, situándose los tres en el mismo plano. Los espejos de los que están compuestos los captadores suelen alcanzar el 95% de reflectividad y tienen sistemas de seguimiento del sol para aprovechar al máximo la irradiancia. La parábola es la geometría más común en estos sistemas, ya que los rayos paralelos incidentes se concentran en el foco de esta donde se coloca un receptor. Dependiendo de la geometría del captador, el receptor será puntual o lineal.

Los captadores más comunes son (v. Fig. 1.1): los captadores cilindroparabólicos y

los captadores Fresnel lineales, que concentran la radiación en una línea, y los sistemas de receptor central y los discos paraboloideos, que lo hacen en un punto.

Los captadores cilindroparabólicos son espejos con forma cilindro-parabólica y seguimiento solar en un solo eje, que reflejan la radiación solar directa incidente a lo largo de su línea focal en la que se sitúa un tubo receptor. Por el tubo receptor, que suele ser metálico recubierto por una pintura cerámica absorbadora, y a su vez, recubierto por una cubierta de cristal para minimizar pérdidas, circula un fluido que incrementa su temperatura al absorber la radiación concentrada. Este tipo de captadores suelen tener valores de razón de concentración entre 30 - 80. Son apropiados para trabajar con temperaturas intermedias, 150 - 400 °C (Fernández-García et al., 2010).

Los captadores Fresnel lineal consisten en un gran número de segmentos de espejos cilindroparabólicos dispuestos en el mismo plano horizontal. El tubo absorbador tiene una posición fija situada encima de los espejos, que son los que individualmente hacen un seguimiento del sol en un solo eje. Los valores de razón de concentración son parecidos a los de los captadores cilindroparabólicos.

En los sistemas de receptor central, un gran campo de heliostatos, espejos paraboloideos con seguimiento solar en dos ejes, concentran la radiación incidente en un receptor central situado en lo alto de una torre. Los valores de razón de concentración típicos que se alcanzan con esta tecnología oscilan entre 200 y 1000. Son apropiados para ciclos termodinámicos avanzados de alta temperatura.

Los discos paraboloideos son sistemas modulares, pequeños y autónomos que concentran la radiación en el foco de un espejo paraboloide. El receptor suele ser un motor Stirling o una mini-turbina Brayton. Los valores de razón de concentración para estos sistemas oscila entre 1000 y 4000.

Para procesos de menor temperatura, existen otro tipos de captadores que no precisan de un sistema de seguimiento solar ahorrando por tanto costes en el sistema. Uno que destaca es el captador cilindroparabólico compuesto, un captador lineal que con dos espejos parabólicos es capaz de redirigir la radiación que atraviesa la apertura al absorbador, como si de un embudo se tratase. Este sistema alcanza el máximo de concentración permitido por el segundo principio de la termodinámica (Romero-Alvarez y Zarza, 2007).

1.2. Objetivos

El objetivo general de este documento de tesis es hacer una contribución original al modelado dinámico de los distintos procesos termoquímicos que se dan en las plantas termosolares. Se establecerá una metodología para el modelado dinámico de estos procesos atendiendo a las necesidades de precisión y rapidez que se demanden por parte de las aplicaciones. Ésta, se probará en dos fenómenos de naturaleza muy diferente: la termodinámica de reacciones químicas (reducción y oxidación) y la termodinámica de cambios de fase, ya sea monocompuesto (evaporación y condensación) o multicompuesto (absorción y desorción). Estos procesos se dan en la producción de hidrógeno, en

la recuperación del calor por medio de una bomba de calor y la desalinización de agua de mar. Como resultado de la Tesis, se obtendrán los modelos dinámicos de una planta de generación de hidrógeno solar de dos pasos, una bomba de calor de doble efecto y una planta desalinizadora de destilación multiefecto. Para lograr este objetivo general, las siguientes subtareas han de ser completadas:

1. Revisar los conceptos básicos de modelado y simulación dinámica para sacar la mayor ventaja posible de ellos en los modelos.
2. Estudiar y analizar los procesos termoquímicos que se dan en las plantas y darles un contexto físico, para poder, con una metodología de modelado de primeros principios, cumplir las necesidades de precisión y velocidad de los modelos.
3. Diseñar los modelos con una filosofía de modelado modular, jerárquico y orientado a objetos.
4. Implementar los modelos en un entorno que permita la simulación de los mismos de una forma eficiente.
5. Generar una batería de experimentos para poder comprobar la validez de los modelos en el rango de operación. Acondicionar las plantas en el caso de que fuese necesario.
6. Calibrar y validar los modelos con los datos experimentales obtenidos.

1.3. Estructura de la tesis

Esta tesis está organizada en varios capítulos. En la siguiente lista se presenta una pequeña descripción de cada uno. Además, al final de cada uno de los capítulos (exceptuando el primero y el último) se ha incluido un pequeño resumen de los mismos y una lista de las principales contribuciones científicas derivadas de cada capítulo que se han publicado.

- **Cap. 1: Presentación.** En este capítulo se explican las motivaciones que han dado lugar a esta tesis doctoral, se presentan los objetivos y la estructura de la misma. A continuación, se enumera cada una de las contribuciones científicas derivadas de la tesis junto con los proyectos de investigación que las han financiado.
- **Cap. 2: Modelado y simulación de sistemas dinámicos.** En este capítulo se introduce el modelado y la simulación de sistemas dinámicos. Se revisan algunos conceptos básicos primero de modelado, como la modularidad, la jerarquización, la orientación a objetos y la causalidad computacional; y luego de simulación, como la partición, los lazos algebraicos y las singularidades, y se presentan algoritmos para su resolución. Se presenta el lenguaje de modelado Modelica con el que se ha desarrollado la tesis explicando brevemente sus características, su sintaxis, sus librerías, el entorno Dymola, el FMI y la depuración de errores.

- **Cap. 3: Introducción a la termodinámica química.** En este capítulo se pretenden mostrar las claves para entender los desarrollos de los modelos de la tesis. Se revisan los conceptos básicos y la terminología de la termodinámica química: principios de la termodinámica, potenciales termodinámicos, ecuaciones de estado, balances de masa y energía y mecanismos de transferencia de calor. Se introduce la termodinámica de cambios de fase y se detallan los casos prácticos de condensación y evaporación, y de absorción y desorción. El capítulo finaliza con una introducción a la termodinámica de reacciones químicas.
- **Cap. 4: Modelado y simulación de una planta de generación de hidrógeno.** En este capítulo, de carácter práctico y enfocado a reacciones químicas, se aplican los conceptos antes expuestos y se modela y simula una planta de generación de hidrógeno con energía solar. Se introduce la generación de hidrógeno solar y se hace una breve revisión de los últimos avances en modelado de plantas de generación de hidrógeno con esta tecnología. Se describe en detalle la instalación experimental real en la que se basa el capítulo. Se aplica una metodología modular, jerárquica y orientada a objetos al desarrollo del modelo, que se divide en un modelo del campo solar y otro de la planta de procesamiento, que a su vez se divide en fuente, reactor, reacción y sumidero. Se presentan tres diseños del modelo atendiendo a la funcionalidad: uno térmico, otro químico y otro inverso. El capítulo finaliza con los trabajos de simulación en los que se calibran y validan los modelos con datos reales de la planta.
- **Cap. 5: Modelado y simulación de una bomba de calor de doble efecto.** En este capítulo, también de carácter práctico pero esta vez orientado a cambios de fase, se explican los trabajos de modelado y simulación de una bomba de calor de doble efecto. Se introduce el concepto de bomba de calor por absorción y se realiza una breve revisión de los últimos avances de modelado dinámico de bombas de calor. Se describe la instalación experimental real que sirve de referencia al modelo. Tomando como base una metodología orientada a objetos, se implementa un modelo a partir de tres niveles de abstracción que encapsulan los procesos de transferencia de masa y calor. El capítulo finaliza con los trabajos de simulación, calibración y validación del modelo.
- **Cap. 6: Modelado y simulación de una planta de destilación multiefecto.** En este capítulo, el último de carácter práctico y también enfocado en cambios de fase, se explican los trabajos de modelado y simulación de una planta de desalinización por destilación multiefecto. Se presenta el proceso de la destilación multiefecto y se hace una breve revisión del estado actual del modelado de este tipo de procesos. Se describe la instalación experimental real usada como referencia para el modelo. El modelo es desarrollado con una metodología de modelado orientada a objetos. Se describen los tres niveles de abstracción empleados, de los cuales el menor es heredado del capítulo anterior. Se implementa un modelo funcional de la planta a partir de estos niveles. Finalmente, se presentan los

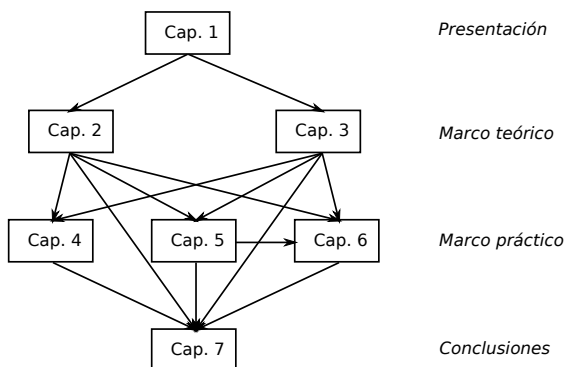


Figura 1.2: Estructura de la tesis

trabajos de simulación, calibración y validación, de este modelo con datos reales obtenidos de la planta.

- **Cap. 7: Conclusiones y futuras líneas de investigación.** En el último capítulo se exponen las conclusiones y se proponen futuras líneas de investigación.

En la Fig. 1.2 se representa la estructura de la tesis y la relación existente entre los capítulos. Se pueden observar cuatro niveles (de arriba a abajo): presentación, marco teórico, marco práctico y conclusiones. En el primero, formado por el capítulo 1 se presenta la problemática tratada en esta tesis. El segundo engloba el trasfondo teórico de la tesis y está formado por los capítulos 2 y 3, donde se exponen aisladamente la herramienta empleada (modelado y simulación) y la disciplina científica (termodinámica química). El siguiente nivel formado por los capítulos 4, 5 y 6 constituye la parte práctica de la tesis. El capítulo 4 se centra más en las reacciones químicas y los capítulos 5 y 6 en los cambios de fase, de ahí la relación entre ambos capítulos. El último nivel, formado por el capítulo 7, son las conclusiones del trabajo.

1.4. Contribuciones científicas derivadas

Durante el desarrollo de esta tesis, numerosas contribuciones científicas han sido publicadas (7) o presentadas (12) directamente relacionadas con los temas que aquí se tratan. Se organizan en artículos en revistas científicas, aportaciones a congresos, seminarios y coloquios doctorales de las más recientes a más antiguas. A continuación, se incluyen los proyectos de investigación financiados en los que se ha participado y que gracias a ellos se ha podido desarrollar la tesis. Para finalizar, se añaden los detalles de la estancia de investigación en una institución extranjera.

Revistas científicas:

1. **A. de la Calle**, J. Bonilla, L. Roca & P. Palenzuela. “Dynamic modeling and simulation of a solar-assisted multi-effect distillation plant”. *Desalination*, 357, 65-76, 2015. DOI: [10.1016/j.desal.2014.11.008](https://doi.org/10.1016/j.desal.2014.11.008)
2. K. Touati, **A. de la Calle**, F. Tadeo, L. Roca, T. Schiestel, & D. Alarcón-Padilla. “Energy recovery using salinity differences in a multi-effect distillation system”. *Desalination and Water Treatment*, 1-8, 2014. DOI: [10.1080/19443994.2014.940648](https://doi.org/10.1080/19443994.2014.940648)
3. **A. de la Calle**, J. Bonilla, L. Roca & P. Palenzuela. “Dynamic modeling and performance of the first cell of a multi-effect distillation plant”. *Applied Thermal Engineering*, 70, 410-420, 2014. DOI: [10.1016/j.applthermaleng.2014.05.035](https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2014.05.035)
4. L. Roca, R. Díaz-Franco, **A. de la Calle**, J. Bonilla & A. Vidal. “A control based on a Knapsack problem for solar hydrogen production”. *Optimal Control, Applications and Methods - Optimal Control of Solar Energy Systems* (special issue), First published online, Mar 2014. DOI: [10.1002/oca.2118](https://doi.org/10.1002/oca.2118)
5. P. Palenzuela, L. Roca, G. Zaragoza, D. Alarcón-Padilla, L. García & **A. de la Calle**. “Operational improvements to increase the efficiency of an absorption heat pump connected to a Multi-Effect Distillation unit”. *Applied Thermal Engineering*, 63(1), 84-96, 2014. DOI: [10.1016/j.applthermaleng.2013.10.050](https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2013.10.050)
6. L. Roca, **A. de la Calle** & L. J. Yebra. “Heliostat-field gain-scheduling control applied to a two-step solar hydrogen production plant”. *Applied Energy*, 103, 298-305, 2013. DOI: [10.1016/j.apenergy.2012.09.047](https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2012.09.047)
7. **A. de la Calle**, L. Roca, L. J. Yebra & S. Dormido. “Modeling of a two-step solar hydrogen production plant”. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(14), 10549 - 10556, 2012. DOI: [10.1016/j.ijhydene.2012.04.056](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.04.056)

Aportaciones en congresos:

1. K. Touati, **A. de la Calle**, F. Tadeo, L. Roca, T. Schiestel & D. Alarcón-Padilla. “Energy recovery using salinity gradients in multi-effect distillation systems”. Presentación oral en *Conference on desalination for the environment clean water and energy*. Limassol, Chipre. (2014).
2. L. Roca, R. Díaz-Franco, **A. de la Calle**, J. Bonilla, L. J. Yebra & A. Vidal. “A combinatorial optimization problem to control a solar reactor”. Presentación oral en *SolarPACES Conference 2013*. Las Vegas, Estados Unidos. (2013). Publicado en *Energy Procedia*, Volume 49, 2014, (pp. 2037-2046). DOI: [10.1016/j.egypro.2014.03.216](https://doi.org/10.1016/j.egypro.2014.03.216)

3. **A. de la Calle**, F. E. Cellier, L. Yebra & S. Dormido. “Improvements in BondLib, the Modelica Bond Graph Library”. Presentación oral en *8th EUROSIM Congress on Modelling and Simulation* (pp. 282 - 287). Cardiff, Reino Unido. (2013). DOI: [10.1109/EUROSIM.2013.79](https://doi.org/10.1109/EUROSIM.2013.79)
4. **A. de la Calle**, L. Yebra & S. Dormido. “Dynamic Modeling and Simulation Study of Falling Film Evaporation and Condensation”. Presentación oral en *8th EUROSIM Congress on Modelling and Simulation* (pp. 427 - 432). Cardiff, Reino Unido. (2013). DOI: [10.1109/EUROSIM.2013.58](https://doi.org/10.1109/EUROSIM.2013.58)
5. J. Bonilla, J. D. Álvarez, L. Roca, **A. de la Calle**, L. J. Yebra & F. Rodríguez. “Intercambio de Modelos entre Herramientas de Simulación con Functional Mock-up Interface (FMI)”. Poster en *XXXIV Jornadas de Automática* (pp. 1-7). Tarrasa, España. (2013). *Distinción al mejor trabajo en modelado y simulación*.
6. **A. de la Calle**, L. J. Yebra & S. Dormido. “Modeling of a falling film evaporator”. Poster en *9th International Modelica Conference* (pp. 941-948). Munich, Alemania. (2012). DOI: [10.3384/ecp12076941](https://doi.org/10.3384/ecp12076941)
7. L. Roca, L. J. Yebra, M. Berenguel & **A. de la Calle**. “Dynamic modeling and simulation of a multi-effect distillation plant”. Poster en *9th International Modelica Conference* (pp. 883-888). Munich, Alemania. (2012). DOI: [10.3384/ecp12076883](https://doi.org/10.3384/ecp12076883)
8. **A. de la Calle**, L. Roca, L. J. Yebra, A. Vidal & S. Dormido. “Modelling Thermochemical Hydrogen Generation in a Solar Plant”. Poster en *7th Vienna International Conference on Mathematical Modelling (MATHMOD)* (pp. 1260-1264). Viena, Austria. (2012). DOI: [10.3182/20120215-3-AT-3016.00223](https://doi.org/10.3182/20120215-3-AT-3016.00223)
9. **A. de la Calle**, L. Roca, L. J. Yebra & A. Vidal. “A simulator tool to test control algorithms in a hydrogen solar plant”. Poster en *SolarPACES Conference 2011*. Granada, España. (2011).
10. **A. de la Calle**, L. Roca, J. Bonilla & L. J. Yebra. “Modelado y simulación de un evaporador de tubos sumergidos”. Poster en *XXXII Jornadas de Automática*. Sevilla, España. (2011).

Seminarios:

1. Modelado dinámico de una bomba de calor de doble efecto. En el *V ciclo de Jóvenes Investigadores*. CIEMAT, Madrid. 15/11/2013

Coloquios doctorales:

1. Two-step redox hydrogen production plant simulator tool. Presentación oral en *8th SOLLAB Doctoral Colloquium on Solar Concentrating Technologies*. Almería, España. (2012)

Colaboraciones en proyectos de investigación:

1. Innovative Configuration of a Fully Renewable Hybrid CSP Plant ([HYSOL](#)).
 - Referencia: FP7-ENERGY-2012-1.CP
 - Organismo de financiación: Comisión Europea. El VII Programa Marco de Investigación y Desarrollo (FP7).
 - Duración: Del 01/05/2013 al 30/04/2016
2. Predictive CONTROL techniques for efficient management of renewable Energy micro-grids ([POWER](#)).
 - Referencia: DPI2010-21589-C05-02
 - Organismo de financiación: Ministerio Español de Ciencia e Innovación (Programa nacional).
 - Duración: Del 01/01/2011 al 31/12/2013 (Prorrogado hasta el 31/12/2014)
3. Hibridación de Tecnologías Renovables en una Planta de Generación de Energía ([HIBIOSOLEO](#)).
 - Referencia: IPT-440000-2010-004
 - Organismo de financiación: Ministerio Español de Ciencia e Innovación (INNPACTO 2010).
 - Duración: Del 01/01/2011 al 30/06/2013
4. Scale Up of Thermochemical HYDROgen Production in a SOLar Monolithic Reactor: a 3rd Generation Design Study ([Hydrosol 3D](#)).
 - Referencia: FCH-JU-2008-1
 - Organismo de financiación: Comisión Europea. El VII Programa Marco de Investigación y Desarrollo (FP7).
 - Duración: Del 01/01/2010 al 31/12/2012

Estancias de investigación

1. Escuela Politécnica Federal de Zúrich ([ETH](#)).
Departamento de Informática.
 - Localidad: Zúrich, Suiza
 - Supervisor: François E. Cellier
 - Tema: *Object-oriented modeling and simulation of complex physical systems.*
 - Duración: Del 09/09/2012 al 10/12/2012

Capítulo 2

Modelado y simulación de sistemas dinámicos

*People are crazy and times are strange,
I'm locked in tight, I'm out of range,
I used to care, but things have changed.*¹

Bob Dylan
(Letra de Bob Dylan)

2.1. Introducción

Hoy en día, es muy habitual oír decir que el uso de los ordenadores ha revolucionado la ciencia y la ingeniería (Fritzson, 2004). Su uso ha permitido desarrollar los más complejos diseños de ingeniería y comprender sistemas físicos que de otra forma no hubiese sido posible. Una de las causas de esta revolución ha sido la introducción del M&S (*Modelado y simulación*) como una herramienta capaz de resolver problemas.

El M&S son dos procesos diferentes, ambos se necesitan el uno al otro, y están tan interrelacionados que en muchas ocasiones resulta complicado diferenciar dónde empieza uno y dónde termina el otro. Si se define el proceso de modelado como aquel que consiste en la extracción del conocimiento que tenemos de un sistema físico, organizarlo y representarlo de una forma precisa. El producto resultante de este proceso es lo que se llama modelo. Se define entonces, el proceso de la simulación como aquel que consiste en la realización de experimentos en el modelo para hacer predicciones del comportamiento del sistema real bajo esos mismos experimentos (Cellier y Kofman, 2006).

Una de las vías más habituales, y a veces la única, para obtener conocimientos de un sistema es el llamado método empírico. Este consiste en someter al sistema a ex-

¹trad. La gente está loca y los tiempos son extraños. Estoy resguardado, fuera de todo alcance. Solía importarme, pero las cosas están cambiando.

perimentos y observar la respuesta. Pero no siempre es fácil realizar un experimento sobre el sistema. Ya sea porque no se dispone del sistema físico para hacerlo, o bien es peligroso, excesivamente costoso, o, demasiado rápido o lento para poder ser estudiado. Puede que aislar el sistema resulte imposible, o que estimular el sistema provoque efectos secundarios no deseados. Para todos estos casos, la simulación del experimento puede ser muy útil. Pero también, esta técnica puede ser usada para verificar nuestro conocimiento del sistema, para justificar hipótesis que de otra forma no es posible comprobar o para diseñar prototipos con los que poder experimentar sin necesidad de que existan.

Poco a poco, esta técnica se ha ido extendiendo por todas las disciplinas de la física e ingeniería, gracias en parte a la proliferación de entornos de simulación cada vez más sofisticados. Los algoritmos de manipulación simbólica cada vez más complejos que usan estos entornos hacen que el mayor esfuerzo del usuario se centre en el llamado modelado matemático, esto es, en el conjunto de relaciones matemáticas que representan al sistema. La abstracción que el usuario obtiene del proceso de simulación puede llegar a ser tan grande que a veces se llega a tratar el proceso como una caja negra. Esto hace que su aplicabilidad y su facilidad de uso sea una de sus principales ventajas, pero a su vez, una sus principales debilidades (Cellier, 1991).

Desafortunadamente, a veces el resultado que se obtiene de la simulación no concuerda con lo esperado de ella, y suele ocurrir más a menudo de lo que se piensa. Uno de los errores más frecuente es desconocer como el entorno manipula simbólicamente el modelo matemático. El entorno de simulación suele indicar mediante mensajes de error al usuario cuales son los problemas que encuentra para poder hacer la manipulación, pero salvo que se tenga un conocimiento avanzado del entorno, en muchas ocasiones estos mensajes son indescifrables. Por tanto, para la tediosa tarea de depuración de errores, se hace imprescindible tener un conocimiento del entorno de simulación. Otro error muy frecuente es embelesarse del modelo que uno mismo ha desarrollado. El modelo no es el mundo real, es solo una representación del mismo bajo unas condiciones muy limitadas. Solo los datos experimentales nos dan resultados incorruptos por nuestras hipótesis, y por tanto, si no se obtienen los resultados esperados en las simulaciones se deben revisar las hipótesis en las que se ha cimentado el modelo y no tratar que el mundo real se adapte al modelo.

También es cierto que los datos experimentales no siempre reflejan el fenómeno que se quiere capturar. La obtención de estos es un arte en sí mismo, la forma en la que se realiza el experimento a veces condiciona el mismo y compromete las medidas. Pero, incluso despreciando el hecho de que la mera obtención de la medida provoque una alteración del sistema², los aparatos que se usan para tomarlos introducen error en las medidas. El origen de los errores de medición es muy diverso, pero pueden distinguirse los siguientes tipos: sistemáticos, que se repiten de manera conocida, o aleatorios, que se producen de una manera no regular. El error sistemático a priori puede ser corregido, e.g. una calibración del aparato. El aleatorio, si bien no es posible corregirlo, frecuentemente

²El principio de incertidumbre de Heisenberg explica precisamente esto.

es posible establecer su distribución de probabilidad y estimar el efecto probable del mismo.

El M&S también son un arte. Ya sea por la tercera acepción de la palabra que nos da la RAE (2015) “*Conjunto de preceptos y reglas necesarios para hacer bien algo*” o por la cuarta “*Maña, astucia*”. Cualquiera que haya trabajado y profundizado un poco en el tema lo sabe. Las simulaciones raramente son entendibles, y menos a la primera. E igual que pasa en el laboratorio con los experimentos, se requieren muchas simulaciones para poder extraer conclusiones. El proceso por el cual se consiguen obtener conclusiones, que raramente se comenta, es una laboriosa tarea de depuración del modelo, ya sea de forma parcial o completa, que sin duda requiere de maña y paciencia. A veces, la parte más complicada del trabajo es saber poner fin a esta tarea.

La experiencia y los conocimientos en M&S hacen reducir el esfuerzo empleado. A continuación se van a exponer unos conceptos básicos acerca del M&S de sistemas dinámicos.

2.2. Conceptos básicos acerca del modelado de sistemas dinámicos

2.2.1. Modelado modular y jerárquico de sistemas dinámicos

“*Divide et impera*”, la famosa frase, que aunque de origen dudoso, históricamente se ha atribuido al personaje romano Julio César define una técnica usada para resolver problemas. En algunos problemas para obtener un mejor resultado, o para obtenerlo con menor esfuerzo, se hace necesario o ventajoso, en primer lugar, romper o dividir lo que se opone a la solución. Esta técnica, que puede ser usada en todos los ámbitos, es perfectamente extrapolable al modelado.

Cuando uno se enfrenta a un modelo de un sistema complejo, resulta conveniente hacerlo de forma modular. Esto consiste en dividir el sistema en la medida que este permita hacerlo y modelar las partes resultantes separadamente como submodelos. Estructurar el modelo de una forma modular facilita su diseño y su realización, ya que en principio es más fácil hacer y validar pequeños submodelos que grandes. Además, permite repartir la carga de trabajo entre distintos especialistas, agilizando por tanto el desarrollo del modelo. Facilita su reutilización en otros modelos, y cabe esperar que el coste de depuración y actualización sea menor al estar más localizadas las partes del sistema (Urquía, 2000).

Las fases básicas de la técnica de modelado modular son (Steward, 1981):

1. Definición de la estructura del sistema. Identificación de sus distintas partes.
2. Definición de la interacción entre las distintas partes.
3. Definición del comportamiento interno de cada parte independientemente de las demás.

Si el sistema que se quiere modelar es tan grande que el número de subsistemas que se han conseguido identificar resulta complicado de manejar, puede que se piense que quizá no fuera tan buena idea hacer un modelado modular. Es por eso por lo que el modelado además de modular, debe ser jerárquico, es decir progresando de menor a mayor detalle de descripción. Así pues, el modelo es dividido en submodelos, y estos a su vez en sub-submodelos y así sucesivamente hasta que hallemos el nivel de descripción que se desea modelar. Se distinguen ahora dos tipos de modelos, los modelos primitivos o atómicos que son aquellos que no están compuestos por otros submodelos y los modelos compuestos o moleculares que sí (Urquía, 2000).

Sin perder las ventajas adquiridas por el modelado modular, el modelado jerárquico facilita el diseño y la comprensión. La organización de la información en distintos niveles de profundidad, oculta en cada nivel la información de los detalles superior e inferior sin que esto tenga por qué limitar el acceso a ellos.

2.2.2. Modelado orientado a objetos de sistemas dinámicos

La programación orientada a objetos es un paradigma de la informática. Se basa en un conjunto de elementos (objetos) que interactúan entre ellos. Los objetos están compuestos por:

- Atributos: Son los datos o informaciones del mismo.
- Métodos: Son las operaciones que pueden realizarse sobre él.
- Identificador: Es la propiedad que lo diferencia del resto.

Al tener identificador, un objeto puede ser diferenciado respecto de otros objetos, ya sean de la misma clase o de otra, y poder por tanto tener valores bien diferenciados de sus atributos. A su vez, los objetos disponen de mecanismos de interacción con otros objetos o con ellos mismos, llamados métodos, que permiten actualizar el valor de sus atributos. El objeto es tratado como una unidad indivisible en el que no pueden ser separados atributos y métodos. Este concepto difiere totalmente con otro paradigma de la informática, la programación estructurada, en la que lo que se busca es el procesamiento de unos datos de entrada para obtener otros de salida, y por tanto, datos y procedimientos son tratados de forma independiente. Una clase en programación orientada a objetos es una descripción de un grupo de objetos con propiedades similares.

Aplicar la programación orientada a objetos al modelado supone encapsular datos, estructuras y comportamientos en un modelo del mismo modo que se encapsulan atributos y métodos en un objeto. Abstracción, ocultación de la información y modularidad son tres conceptos que relacionan íntimamente el modelado orientado a objetos y el modelado modular y jerárquico. La abstracción permite usar cada parte del modelo sin conocer sus detalles internos, la ocultación de la información permite el acceso solo a determinadas variables para la comunicación entre modelos y la modularidad permite tratar cada una de las partes del modelo de forma independiente (Urquía, 2000). Una

técnica muy común para lograr la abstracción y ocultación de la información es diferenciar en un modelo entre interfaz e implementación (también llamada descripción interna). Así se logra separar la comunicación del modelo con su entorno (interfaz) y la estructura y comportamiento (implementación).

En el modelado orientado a objetos, un modelo es una clase particularizada para un caso concreto. La instancia ocurre cuando se simula. Otros conceptos importantes, y que son claves en la reutilización del código, son los de parametrización, herencia y polimorfismo. La parametrización permite la adaptación del modelo a diferentes aplicaciones mediante el cambio de alguna de sus propiedades. La herencia es un mecanismo de compartición entre clases que permite la especialización. El polimorfismo permite que varios modelos puedan ser usados en el mismo contexto o intercambiados sin necesidad de alterar el resto del sistema (Urquía, 2000).

2.2.3. Modularidad y causalidad computacional

La causalidad es una relación entre un primer evento (la causa) y un segundo evento (el efecto), en la cual, el segundo evento se entiende como una consecuencia del primero. En un modelo, las causas son sus entradas y los efectos son sus salidas y las relaciones entre ambos vienen dados por relaciones matemáticas que calculan sus incógnitas. La decisión de qué relación matemática es usada para calcular qué incógnita es lo que se llama asignación de la causalidad computacional (también llamada partición).

La causalidad computacional es el principal obstáculo para la modularidad por ser una propiedad del sistema completo, y por tanto, no poder decidirse localmente en un subsistema sin considerar el resto de partes, sus conexiones y las condiciones de contorno del sistema (Cellier, 1991). La solución a este problema consiste en no incluir información acerca de la causalidad computacional en la descripción matemática del modelo (Elmqvist, 1978). Los entornos de M&S de lenguajes de modelado acausal, como por ejemplo Dymola (Dassault Systemes, 2014) para Modelica (Modelica Association, 2014), asignan automáticamente la causalidad computacional del modelo completo a partir de las relaciones matemáticas de las partes, del modo de conectarlas y de las condiciones de contorno. Esto, dicho sea de paso, aparte de conseguir un modelado modular, libera al usuario de la tediosa tarea de establecer explícitamente la causalidad computacional (Urquía, 2000).

Los lenguajes de modelado acausal son lenguajes declarativos, donde las relaciones matemáticas que contienen los modelos no especifican exactamente cómo encontrar la solución, en contraposición, con los lenguajes imperativos donde relaciones matemáticas son asignaciones. Los entornos de M&S que manejan estos lenguajes además de tener algoritmos para asignar la causalidad computacional disponen de herramientas para que el cálculo de la variable asignada sea posible. Estas herramientas pueden ser desde algoritmos para despejar la variable a integradores numéricos.

2.3. Conceptos básicos acerca de la simulación de sistemas dinámicos

2.3.1. Transformación de modelos matemáticos para su resolución: solución del problema de la asignación de la causalidad computacional

Cuando un sistema es modelado, se formula un conjunto de ecuaciones algebraicas y de DAEs (*Differential-algebraic equations*)³ implícitas. Tras la asignación de la causalidad computacional, este conjunto pasa a ser formulado explícitamente. Si eliminamos las ecuaciones algebraicas, es posible, representar las DAEs mediante un espacio de estados. La mayoría de los algoritmos de integración son capaces de resolver DAEs en esta representación (Cellier y Elmqvist, 1993).

El proceso de asignación de la causalidad computacional consiste, salvo algunos casos específicos que serán comentados en secciones posteriores, en una ordenación horizontal y vertical de las ecuaciones que componen el modelo. Esta ordenación puede ser automatizada siguiendo una serie de reglas, que se conocen como algoritmo de partición.

Mediante el sistema eléctrico de la Fig. 2.1, se va a mostrar cómo se hace la reordenación aplicando dicho algoritmo. Antes de empezar se deben extraer del sistema un conjunto de ecuaciones no singulares, es decir, una ecuación para cada variable del sistema. El circuito de la figura tiene 10 variables, por tanto se necesitarán 10 ecuaciones.

Las ecuaciones de los 5 componentes del circuito son:

$$U_0 = f(t), \quad (2.1)$$

$$u_1 = R_1 \cdot i_1, \quad (2.2)$$

$$u_2 = R_2 \cdot i_2, \quad (2.3)$$

$$i_C = C \cdot du_C/dt, \quad (2.4)$$

$$u_L = L \cdot di_L/dt. \quad (2.5)$$

Se necesitan otras 5 ecuaciones no redundantes. Estas se obtienen con las Leyes de Kirchhoff. La ley de los nodos da dos ecuaciones:

$$i_0 = i_1 + i_L, \quad (2.6)$$

$$i_1 = i_2 + i_C. \quad (2.7)$$

La ley de las mallas da las tres que faltan:

$$U_0 = u_1 + u_C, \quad (2.8)$$

$$u_C = u_2, \quad (2.9)$$

$$u_L = u_1 + u_2. \quad (2.10)$$

³Ecuaciones diferenciales algebraicas.

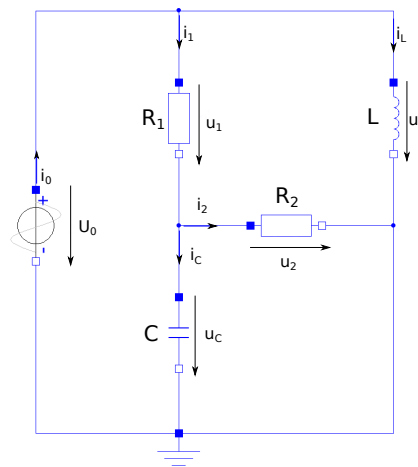


Figura 2.1: Circuito de ejemplo: partición

El proceso de la ordenación mediante el algoritmo de partición puede seguirse en la Tab. 2.1 (de izquierda a derecha y de arriba a abajo), donde las variables conocidas están marcadas en azul y las variables que deben ser resueltas por esa ecuación están marcadas en rojo. Hay que recordar que el objetivo final del problema es integrar un sistema DAEs, por tanto, se debe encontrar la forma de representarlo en un espacio de estados. Las constantes y los parámetros, marcados en verde, son variables conocidas, ya que sus valores no cambian durante la simulación. También, se consideran variables conocidas (marcadas en azul) las entradas globales al modelo, ya que son especificadas en cada instante de la simulación, y la variable de tiempo. Las variables de estado que en principio serán aquellas que aparecen en forma diferencial, son asumidas como conocidas (y marcadas en azul).

Con el sistema de ecuaciones ya preparado se aplican recursivamente dos sencillas reglas hasta que cada ecuación tenga una variable que sea resuelta por ella:

- Las ecuaciones que contienen solo una variable desconocida deben ser resueltas por ella. Las variables resueltas pasan a ser conocidas en todo el sistema.
- Las variables que solo aparecen en una ecuación deben ser resueltas con esa ecuación, el resto de variables de la ecuación pasan a ser conocidas. Las variables resueltas pasan a ser conocidas en todo el sistema.

Una vez resuelta la ordenación horizontal, las ecuaciones se convierten en asignaciones. La ordenación vertical se hace de tal modo que ninguna variable sea utilizada antes de ser calculada, a excepción de las variables de estado.

Ahora, para la conversión a una representación de espacio de estados, se hace una sustitución en cada variable derivada hasta lograr definirla de forma que solo dependa

Tabla 2.1: Aplicación del algoritmo de partición

$U_0 = f(t)$	$i_0 = i_1 + i_L$	$U_0 = f(t)$	$i_0 = i_1 + i_L$
$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = i_2 + i_C$	$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = i_2 + i_C$
$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_C$	$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_C$
$i_C = C \cdot du_C/dt$	$u_C = u_2$	$i_C = C \cdot du_C/dt$	$u_C = u_2$
$u_L = L \cdot di_L/dt$	$u_L = u_1 + u_2$	$u_L = L \cdot di_L/dt$	$u_L = u_1 + u_2$
$U_0 = f(t)$	$i_0 = i_1 + i_L$	$U_0 = f(t)$	$i_0 = i_1 + i_L$
$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = i_2 + i_C$	$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = i_2 + i_C$
$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_C$	$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_C$
$i_C = C \cdot du_C/dt$	$u_C = u_2$	$i_C = C \cdot du_C/dt$	$u_C = u_2$
$u_L = L \cdot di_L/dt$	$u_L = u_1 + u_2$	$u_L = L \cdot di_L/dt$	$u_L = u_1 + u_2$
$U_0 = f(t)$	$i_0 = i_1 + i_L$	$U_0 = f(t)$	$i_0 = i_1 + i_L$
$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = i_2 + i_C$	$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = i_2 + i_C$
$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_C$	$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_C$
$i_C = C \cdot du_C/dt$	$u_C = u_2$	$i_C = C \cdot du_C/dt$	$u_C = u_2$
$u_L = L \cdot di_L/dt$	$u_L = u_1 + u_2$	$u_L = L \cdot di_L/dt$	$u_L = u_1 + u_2$
$U_0 = f(t)$	$i_0 = i_1 + i_L$	$U_0 = f(t)$	$i_2 = u_2/R_2$
$i_1 = u_1/R_1$	$i_C = i_1 - i_2$	$u_1 = U_0 - u_C$	$i_C = i_1 - i_2$
$i_2 = u_2/R_2$	$u_1 = U_0 - u_C$	$i_1 = u_1/R_1$	$u_L = u_1 + u_2$
$du_C/dt = i_C/C$	$u_2 = u_C$	$i_0 = i_1 + i_L$	$du_C/dt = i_C/C$
$di_L/dt = u_L/L$	$u_L = u_1 + u_2$	$u_2 = u_C$	$di_L/dt = u_L/L$

de variables de estado y/o entradas.

$$\begin{aligned}
 du_C/dt &= i_C/C \\
 &= (i_1 - i_2)/C \\
 &= i_1/C - i_2/C \\
 &= u_1/(R_1 \cdot C) - u_2/(R_2 \cdot C) \\
 &= (U_0 - u_C)/(R_1 \cdot C) - u_C/(R_2 \cdot C),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 di_L/dt &= u_L/L \\
 &= (u_1 + u_2)/L \\
 &= u_1/L + u_2/L \\
 &= (U_0 - u_C)/L + u_C/L \\
 &= U_0/L.
 \end{aligned}$$

Si se definen los estados como x , las entradas como u y las salidas como y :

$$\begin{aligned}
 x_a &= u_C, \\
 x_b &= i_L, \\
 u &= U_0, \\
 y &= u_C.
 \end{aligned}$$

La representación en un espacio de estados queda entonces como sigue:

$$\begin{aligned}\dot{x}_a &= -\left(\frac{1}{R_1 \cdot C} + \frac{1}{R_2 \cdot C}\right) + \frac{1}{R_1 \cdot C} \cdot u, \\ \dot{x}_b &= \frac{1}{L} \cdot u, \\ y &= x_a.\end{aligned}$$

2.3.2. Lazos algebraicos

El ejemplo de la sección anterior, §2.3.1, está escogido cuidadosamente para no encontrar ningún problema al aplicar el algoritmo de partición. Pero este, no funciona correctamente para todos los casos. ¿Qué pasa si se modifica ligeramente el ejemplo anterior?

El circuito de la Fig. 2.2 viene definido por las siguientes ecuaciones.

- Ecuaciones de los componentes:

$$U_0 = f(t), \quad (2.11)$$

$$u_1 = R_1 \cdot i_1, \quad (2.12)$$

$$u_2 = R_2 \cdot i_2, \quad (2.13)$$

$$u_3 = R_3 \cdot i_3, \quad (2.14)$$

$$u_L = L \cdot di_L/dt. \quad (2.15)$$

- Ecuaciones de los nodos:

$$i_0 = i_1 + i_L, \quad (2.16)$$

$$i_1 = i_2 + i_3. \quad (2.17)$$

- Ecuaciones de las mallas:

$$U_0 = u_1 + u_3, \quad (2.18)$$

$$u_3 = u_2, \quad (2.19)$$

$$u_L = u_1 + u_2. \quad (2.20)$$

Al aplicar el algoritmo de partición como se muestra la Tab. 2.2 se llega a un punto donde, de las seis ecuaciones que continúan siendo acausales, i.e. las ecuaciones que no contienen ninguna variable de color rojo, cada una tiene al menos dos incógnitas y además, cada una de esas incógnitas se encuentran en al menos dos ecuaciones acausales. Esta situación indica la existencia de un lazo algebraico.

Este tipo de problema no es ni mucho menos irresoluble. Un caso sencillo como este, se puede resolver eligiendo una variable y dándola por conocida, e.g. la variable

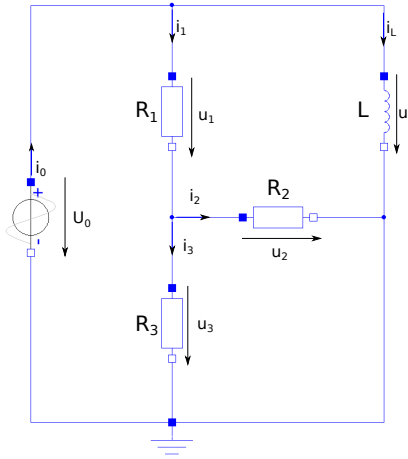


Figura 2.2: Circuito de ejemplo: lazo algebraico

Tabla 2.2: Aplicación del algoritmo de partición: lazo algebraico

$U_0 = f(t)$	$i_0 = i_1 + i_L$	$U_0 = f(t)$	$i_0 = i_1 + i_L$
$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = i_2 + i_3$	$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = i_2 + i_3$
$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_3$	$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_3$
$u_3 = R_3 \cdot i_3$	$u_3 = u_2$	$u_3 = R_3 \cdot i_3$	$u_3 = u_2$
$u_L = L \cdot di_L/dt$	$u_L = u_1 + u_2$	$u_L = L \cdot di_L/dt$	$u_L = u_1 + u_2$

i_1 . Si se sigue aplicando el algoritmo de partición a este bloque de ecuaciones como muestra la Tab. 2.3, se llega hasta una solución. Entonces, para hallar la ecuación que rompe el lazo, se debe definir la variable que se daba por conocida, i.e. i_1 , de forma que solo dependa de variables de estado y/o entradas.

$$\begin{aligned}
 i_1 &= i_2 + i_3 \\
 &= u_2/R_2 + u_3/R_3 \\
 &= u_3/R_2 + u_3/R_3 \\
 &= ((R_2 + R_3)/(R_2 \cdot R_3)) \cdot u_3 \\
 &= ((R_2 + R_3)/(R_2 \cdot R_3)) \cdot (U_0 - u_1) \\
 &= ((R_2 + R_3)/(R_2 \cdot R_3)) \cdot (U_0 - R_1 \cdot i_1),
 \end{aligned}$$

$$i_1 = \frac{R_2 + R_3}{R_1 R_2 + R_1 R_3 + R_2 R_3} \cdot U_0 = \frac{1}{R_{eq}} \cdot U_0.$$

Tabla 2.3: Resolución del lazo

$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = i_2 + i_3$	$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = i_2 + i_3$
$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_3$	$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_3$
$u_3 = R_3 \cdot i_3$	$u_3 = u_2$	$u_3 = R_3 \cdot i_3$	$u_3 = u_2$
$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = i_2 + i_3$	$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = i_2 + i_3$
$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_3$	$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_3$
$u_3 = R_3 \cdot i_3$	$u_3 = u_2$	$u_3 = R_3 \cdot i_3$	$u_3 = u_2$
$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = i_2 + i_3$	$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = i_2 + i_3$
$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_3$	$i_2 = u_2/R_2$	$u_3 = U_0 - u_1$
$u_3 = R_3 \cdot i_3$	$u_3 = u_2$	$i_3 = u_3/R_3$	$u_2 = u_3$

Ya con el lazo resuelto, se sustituye la ecuación de i_1 por la nueva ecuación y se continúa con el algoritmo de partición como antes. Este proceso, se muestra en la Tab. 2.4.

Tabla 2.4: Aplicación del algoritmo de partición: lazo algebraico (continuación)

$U_0 = f(t)$	$i_0 = i_1 + i_L$	$U_0 = f(t)$	$i_0 = i_1 + i_L$
$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = U_0/R_{eq}$	$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = U_0/R_{eq}$
$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_3$	$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_3$
$u_3 = R_3 \cdot i_3$	$u_3 = u_2$	$u_3 = R_3 \cdot i_3$	$u_3 = u_2$
$u_L = L \cdot di_L/dt$	$u_L = u_1 + u_2$	$u_L = L \cdot di_L/dt$	$u_L = u_1 + u_2$
$U_0 = f(t)$	$i_0 = i_1 + i_L$	$U_0 = f(t)$	$i_0 = i_1 + i_L$
$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = U_0/R_{eq}$	$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = U_0/R_{eq}$
$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_3$	$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_3$
$u_3 = R_3 \cdot i_3$	$u_3 = u_2$	$u_3 = R_3 \cdot i_3$	$u_3 = u_2$
$u_L = L \cdot di_L/dt$	$u_L = u_1 + u_2$	$u_L = L \cdot di_L/dt$	$u_L = u_1 + u_2$
$U_0 = f(t)$	$i_0 = i_1 + i_L$	$U_0 = f(t)$	$u_2 = u_3$
$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = U_0/R_{eq}$	$i_1 = U_0/R_{eq}$	$i_2 = u_2/R_2$
$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_3$	$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$u_L = u_1 + u_2$
$u_3 = R_3 \cdot i_3$	$u_3 = u_2$	$u_3 = U_0 - u_1$	$i_0 = i_1 + i_L$
$u_L = L \cdot di_L/dt$	$u_L = u_1 + u_2$	$i_3 = u_3/R_3$	$di_L/dt = u_L/L$

Los lenguajes de simulación no permiten relaciones algebraicas recíprocas entre varias variables. Como se ha visto en el ejemplo, el algoritmo de partición es incapaz de determinar la secuencia apropiada de ejecución de las declaraciones del modelo. El problema es más sencillo de ver con solo dos ecuaciones en el sistema de ecuaciones:

$$x_b = f_a(x_a), \quad (2.21)$$

$$x_a = f_b(x_b). \quad (2.22)$$

Para calcular x_b con la primera ecuación se debe conocer antes la variable x_a , pero para calcular x_a con la segunda ecuación se debe conocer antes la variable x_b . Por tanto, ninguna de las dos variables puede ser resuelta la una sin la otra.

La existencia de lazos algebraicos entre las variables del modelo en ocasiones puede significar un mal modelado o una mala elección de variables. Sin embargo, los lazos creados por interconexiones entre diferentes modelos son muy frecuentes e inevitables como se ha podido ver en el ejemplo (Cellier y Elmqvist, 1993).

Todas las incógnitas que están involucradas en el lazo algebraico del ejemplo aparecen de forma lineal. Por eso ha sido posible resolverlo de modo simbólico. Como se verá más adelante en las §2.3.7 y 2.3.8, el mecanismo de resolución puede ser automatizado. Si el número de ecuaciones del lazo es muy grande, es posible que su resolución simbólica conlleve mucho gasto computacional y resulte más eficiente resolverlo de forma numérica.

2.3.3. Singularidades

Se dice que tenemos una singularidad cuando el número de ecuaciones difiere del número de incógnitas. Si el modelo tiene más ecuaciones que incógnitas diremos que el sistema está sobredeterminado y alguna de sus ecuaciones es redundante por lo que conviene identificarla y suprimirla del modelo. Si el sistema tiene menos ecuaciones que incógnitas diremos entonces que el sistema está infradeterminado, y es conveniente distinguir entre las variables que pueden resolverse de las que no. Cuando el modelo tiene solo unas pocas ecuaciones esta identificación, ya sea para el problema sobredeterminado o infradeterminado, es trivial, pero en la medida en la que el número de ecuaciones e incógnitas crece esta identificación se complica. La modularidad y la jerarquización tampoco ayudan a esta identificación. Cuando tenemos un modelo con un número considerable de ecuaciones y de incógnitas, el error por una singularidad puede que quede oculto bajo capas de modelo y sea una ardua tarea el encontrarlo. Existen directrices que si se siguen a la hora de desarrollar el modelo pueden ayudar al entorno de simulación a identificar dónde se encuentra el problema, como se verá más adelante (Olsson et al., 2008).

También se dice que hay una singularidad, en este caso singularidad estructural, si al aplicar el algoritmo de partición a un modelo que tiene el mismo número de ecuaciones e incógnitas se llega a un punto en el que no se dispone de ninguna ecuación para calcular una incógnita, y en el cual, una ecuación es redundante, i.e. no ha sido utilizada y todas sus variables son ya conocidas.

El circuito de la Fig. 2.3 muestra esta situación. El sistema se define por las siguientes ecuaciones.

- Ecuaciones de los componentes:

$$U_0 = f(t), \quad (2.23)$$

$$u_1 = R_1 \cdot i_1, \quad (2.24)$$

$$u_2 = R_2 \cdot i_2, \quad (2.25)$$

$$u_L = L \cdot di_L/dt, \quad (2.26)$$

$$i_C = C \cdot du_C/dt. \quad (2.27)$$

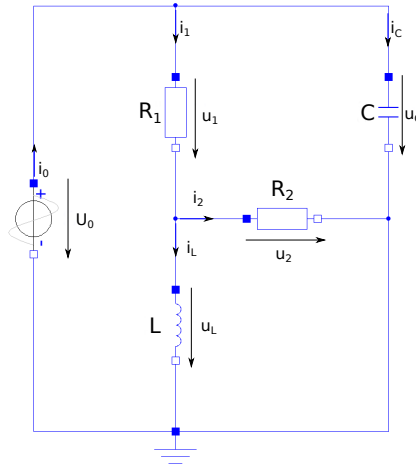


Figura 2.3: Circuito de ejemplo: singularidad estructural

- Ecuaciones de los nodos:

$$i_0 = i_1 + i_C, \tag{2.28}$$

$$i_1 = i_2 + i_L. \tag{2.29}$$

- Ecuaciones de las mallas:

$$U_0 = u_1 + u_L, \tag{2.30}$$

$$u_L = u_2, \tag{2.31}$$

$$u_C = u_1 + u_2. \tag{2.32}$$

Al aplicar el algoritmo de partición como muestra la Tab. 2.5, rápidamente se observa que la variable i_C se queda sin ninguna ecuación que la resuelva.

Tabla 2.5: Aplicación del algoritmo de partición: singularidad estructural

$U_0 = f(t)$	$i_0 = i_1 + i_C$	$U_0 = f(t)$	$i_0 = i_1 + \boxed{i_C}$
$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = i_2 + i_L$	$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = i_2 + i_L$
$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_L$	$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_L$
$u_L = L \cdot di_L/dt$	$u_L = u_2$	$u_L = L \cdot di_L/dt$	$u_L = u_2$
$i_C = C \cdot du_C/dt$	$u_C = u_1 + u_2$	$\boxed{i_C} = C \cdot du_C/dt$	$u_C = u_1 + u_2$

Esta situación puede deberse a un error en el modelo o a que el sistema tiene más variables de estado que grados de libertad. Aunque en §2.3.1 se dijo que las variables de estado serían aquellas que aparecían en su forma diferencial, esto no siempre puede aplicarse. Una opción, aunque ya se verá en la §2.3.9 que no es la más conveniente, sería no considerar u_C como variable de estado. Si se elimina como variable de estado y se sigue aplicando el algoritmo de partición como se muestra en la Tab. 2.6 se observa

de nuevo que se llega a un lazo algebraico, que podría resolverse como ya se explicó en §2.3.2.

Tabla 2.6: Aplicación del algoritmo de partición: singularidad estructural (continuación)

$U_0 = f(t)$	$i_0 = i_1 + i_C$	$U_0 = f(t)$	$i_0 = i_1 + i_C$
$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = i_2 + i_L$	$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$i_1 = i_2 + i_L$
$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_L$	$u_2 = R_2 \cdot i_2$	$U_0 = u_1 + u_L$
$u_L = L \cdot di_L/dt$	$u_L = u_2$	$u_L = L \cdot di_L/dt$	$u_L = u_2$
$i_C = C \cdot du_C/dt$	$u_C = u_1 + u_2$	$i_C = C \cdot du_C/dt$	$u_C = u_1 + u_2$

En el modelado modular y jerárquico es muy habitual caer en singularidades estructurales ya que la conexión de submodelos no singulares no asegura que el modelo resultante sea no singular. La conexión de submodelos puede provocar una reducción del grado de libertad del sistema. Un caso típico de ello es la conexión en paralelo de dos elementos que acumulan energía, e.g. dos condensadores. Esto no significa que el modelo sea irresoluble, las singularidades estructurales por una mala elección de variables de estado pueden ser resueltas por algoritmos específicos para ello como se verá en la §2.3.9.

2.3.4. Índice del problema

“Sea el sistema algebraico diferencial, $f(t, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = 0$. Se define como índice el número mínimo de veces que debe ser diferenciado todo o parte de él con respecto al tiempo, t , para obtener $\dot{\mathbf{x}}$ como una función continua de \mathbf{x} y de t .” (Brenan et al., 1995)

El concepto de índice del problema nos da lugar a una clasificación de problemas de la asignación de la causalidad computacional de un modelo.

- Índice cero: Son problemas que pueden ser resueltos de manera única.
- Índice uno: Son problemas donde un conjunto de ecuaciones tiene al menos dos variables no asignadas y cada una de ellas aparece en al menos dos ecuaciones, esto es, tiene un lazo algebraico.
- Índice superior: (Mayor que uno) Son problemas donde no existe ninguna solución que permita mantener todas las variables que aparecen en forma diferencial como variables de estado, esto es, singulares estructuralmente.

2.3.5. Solución de sistemas de ecuaciones no lineales: el método de Newton

Hasta ahora, todos los sistemas que han sido tratados son sistemas lineales. Pero en el mundo de la física existen numerosos fenómenos que no siguen comportamientos

lineales. Una ecuación tan sencilla como la Eq. 2.33 entraña numerosos problemas.

$$x_a - (x_b)^2 = 0. \quad (2.33)$$

Si se causaliza la ecuación anterior se tiene:

$$x_a = (x_b)^2, \quad (2.34)$$

$$x_b = \pm\sqrt{x_a}. \quad (2.35)$$

En el caso de que se quiera calcular x_a no hay problema, pero si se quiere calcular x_b , ¿qué signo debe escoger la herramienta? Matemáticamente, cualquiera de los dos sería el correcto, pero en la física (clásica) las soluciones son únicas. El principal problema de los sistemas no lineales es que la mayoría de ellos no proporcionan una solución única.

Un método habitual para causalizar ecuaciones es el llamado método de Newton. Este, es simplemente un algoritmo eficiente para encontrar aproximaciones de las raíces de una función real. Consiste en linealizar la función por la recta tangente a un valor supuesto de la raíz. La abscisa en el origen de dicha recta será, según el método, una mejor aproximación de la raíz que el valor anterior. Se realizarán sucesivas iteraciones siguiendo un criterio de convergencia.

Para la resolución de sistemas de ecuaciones no lineales, estos deben expresarse de la forma $\mathcal{F}(\mathbf{x}) = 0$, donde \mathbf{x} representa las variables que se quieren calcular. Dado un valor inicial cercano a la solución, \mathbf{x}_0 , se itera la expresión dada por la Eq. 2.36 hasta que $(\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i)$ sea menor que una cierta tolerancia o se exceda un cierto número de iteraciones i .

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i - \Delta\mathbf{x}_i. \quad (2.36)$$

El incremento $\Delta\mathbf{x}_i$ se calcula mediante la siguiente expresión:

$$\Delta\mathbf{x}_i = \mathcal{J}(\mathbf{x}_i)^{-1} \cdot \mathcal{F}(\mathbf{x}_i), \quad (2.37)$$

donde \mathcal{J} es la matriz jacobiana definida así:

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = \frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}. \quad (2.38)$$

Cuando el sistema de ecuaciones tiene un lazo algebraico y en este está involucrada una ecuación no lineal, el problema es el mismo que hay al resolver una ecuación no lineal. Esto es, la mayoría de las ocasiones no se obtienen soluciones únicas. Por eso, aunque en algunos casos sencillos estos lazos algebraicos puedan resolverse de forma simbólica, el manipulador simbólico no sabe cuál de las soluciones debe ser usada para evaluar la variable. Los métodos numéricos tampoco son una solución infalible, ya que dependiendo del algoritmo empleado, el valor inicial de la variable y del modo en que se haya formulado el problema, el método convergerá a una de las soluciones o divergirá

(Cellier, 1991). Es por eso por lo que en muchas ocasiones la resolución del sistema en el instante inicial resulta crítica.

Al iniciar una simulación se debe conocer el valor de los estados (o de sus derivadas) y de las entradas, y se deben calcular los valores iniciales de las incógnitas algebraicas y de las derivadas de los estados (o de los estados si se conocían las derivadas). Es fundamental que se proporcionen unos valores iniciales lo más próximos a la solución, para que, en el caso de que haya lazos algebraicos, el algoritmo converja lo más rápido posible a la solución apropiada. Una vez resuelto el instante inicial, se toma esta solución como valor inicial para la próxima iteración en el siguiente instante de simulación.

Si la inicialización resulta problemática, un método que puede dar buenos resultados es simular la evolución desde un estado conocido hasta el estado inicial del problema de interés, donde se deja que el sistema alcance el estado estacionario. Desde esa solución como estado inicial, se realiza después la simulación deseada (Urquía, 2000).

2.3.6. Solución eficiente del problema de la causalidad computacional: el algoritmo de Tarjan

El algoritmo de Tarjan (Tarjan, 1972) es una técnica gráfica para simultáneamente ordenar el sistema de ecuaciones horizontal y verticalmente. Está basado en el digrafo de estructura.

El digrafo de estructura contiene la información de la estructura del sistema en dos columnas. En la primera se enumeran las ecuaciones que conforma el sistema y en la segunda se enumeran las incógnitas. Una línea que une ambas columnas indica que esa incógnita aparece en esa ecuación.

Para el ejemplo de del sistema de la Fig. 2.1, las ecuaciones se han enumerado según muestra la Tab. 2.7. Las entradas, la variable de tiempo y las variables de estado son consideradas como variables conocidas y por tanto no son incógnitas (coloreadas en azul). Los parámetros y las constantes tampoco son incógnitas (coloreadas en verde). De acuerdo a esto, el digrafo de estructura es el que muestra la Fig. 2.4a.

Tabla 2.7: Enumeración de las ecuaciones de la Fig. 2.1

$e1 :$	$U_0=f(t)$	$e6 :$	$i_0=i_1 + i_L$
$e2 :$	$u_1=R_1 \cdot i_1$	$e7 :$	$i_1=i_2 + i_C$
$e3 :$	$u_2=R_2 \cdot i_2$	$e8 :$	$U_0=u_1 + u_C$
$e4 :$	$i_C=C \cdot du_C/dt$	$e9 :$	$u_C=u_2$
$e5 :$	$u_L=L \cdot di_L/dt$	$e10 :$	$u_L=u_1 + u_2$

El algoritmo consiste en un procedimiento por el cual es coloreado. Al igual que con el algoritmo de partición, sólo se tienen dos reglas que se aplican recursivamente hasta hallar la solución final:

- Toda ecuación con solo una línea negra es coloreada en rojo. La variable indicada

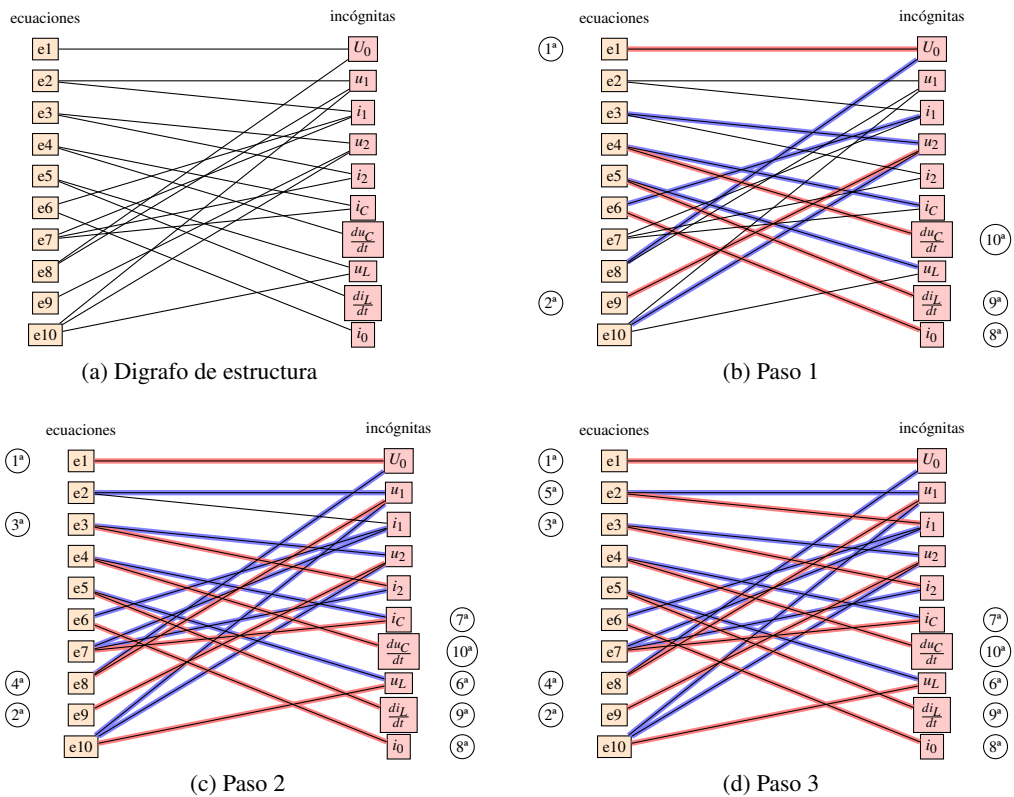


Figura 2.4: Aplicación del algoritmo de Tarjan al sistema de la Fig. 2.1

por esa línea va a ser resuelta por esa ecuación y todas la líneas que emanan de esa variable son coloreadas en azul. La ecuación de la que emana la línea roja es reenumerada en orden creciente empezando por 1.

- Toda variable con solo una línea negra es coloreada en rojo. La variable va a ser resuelta con esa ecuación y todas las líneas que emanan de esa ecuación son coloreadas en azul. La ecuación de la que emana la línea roja es reenumerada en orden decreciente empezando por n , el número de ecuaciones.

Si se aplica el algoritmo al ejemplo como muestra la Fig. 2.4, rápidamente se llega a una solución final. En esta, se indica qué variable es resuelta por qué ecuación, y cuál es su orden. En este caso, la solución quedaría así:

$$\begin{aligned}
U_0 &= f(t), \\
u_2 &= u_C, \\
i_2 &= \frac{u_2}{R_2}, \\
u_1 &= U_0 - u_C, \\
i_1 &= \frac{u_1}{R_1}, \\
u_L &= u_1 + u_2, \\
i_C &= i_1 - i_2, \\
i_0 &= i_1 + i_L, \\
\frac{di_L}{dt} &= \frac{u_L}{L}, \\
\frac{du_C}{dt} &= \frac{i_C}{C}.
\end{aligned}$$

El proceso de sustitución hasta obtener el sistema en una forma que los algoritmos de integración numérica puedan manejar se hace igual que se mostró en la §2.3.1.

Otra manera de representar un grafo es de forma matricial. La matriz de incidencia es una representación de las relaciones binarias en los grafos. Se define así: “Dado un grafo simple $G(\mathbf{v}, \mathbf{a})$ con $n = |\mathbf{v}|$ vértices $\{v_1, \dots, v_n\}$ y $m = |\mathbf{a}|$ aristas $\{a_1, \dots, a_m\}$, su matriz de incidencia es la matriz de orden $n \times m$, $\mathbf{B}(G) = (B_{ij})$, donde $B_{ij} = 1$ si v_i es incidente con a_j y $B_{ij} = 0$ en caso contrario.”

Esta matriz proporciona la misma información que obtenemos del digrafo de estructura. En ella, cada fila representa una ecuación del sistema y cada columna una incógnita. Por tanto, el elemento $\langle i, j \rangle$ de la matriz concierne a la ecuación $\#i$ y a la incógnita $\#j$. Dado que el sistema debe tener el mismo número de ecuaciones que de incógnitas, la matriz es cuadrada.

La matriz de incidencia del ejemplo es:

$$\mathbf{B} = \begin{matrix} & U_0 & u_1 & i_1 & u_2 & i_2 & i_C & \frac{du_C}{dt} & u_L & \frac{di_L}{dt} & i_0 \\ \begin{matrix} e1: \\ e2: \\ e3: \\ e4: \\ e5: \\ e6: \\ e7: \\ e8: \\ e9: \\ e10: \end{matrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix}.$$

Cuando el sistema de ecuaciones está completamente ordenado, la matriz de incidencia

es una matriz triangular inferior.

$$\mathbf{B} = \begin{matrix} & U_0 & u_2 & i_2 & u_1 & i_1 & u_L & i_C & i_0 & \frac{di_L}{dt} & \frac{du_C}{dt} \\ e1: & \left(\begin{array}{cccccccccc} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \end{matrix}.$$

Este algoritmo detecta los lazos algebraicos de mínimas dimensiones, y puede ser usado para escoger la variable que resuelva el lazo algebraico como se verá en la siguiente sección.

2.3.7. Solución eficiente de sistemas de ecuaciones: el algoritmo de tearing

El algoritmo de tearing (desgarre) es un método para resolver sistemas de ecuaciones algebraicamente acopladas, i.e. con lazos algebraicos. Originalmente fue introducido por Kron (1962), pero Elmqvist y Otter (1994) demostraron que este método era particularmente útil para el modelado orientado a objetos.

La idea es muy sencilla. Consideremos otra vez el sistema que se mostró en la §2.3.2 con las Eq. 2.21 y 2.22:

$$\begin{aligned} x_b &= f_a(x_a), \\ x_a &= f_b(x_b). \end{aligned}$$

Estas dos ecuaciones forman un lazo algebraico ya que una variable no puede ser calculada sin la otra. El lazo puede ser roto por tearing, si como se muestra en la Fig. 2.5, se secciona uno de los enlaces que da lugar a una nueva dependencia. Esta dependencia sugiere ser resuelta mediante un algoritmo de sucesivas sustituciones como una iteración por punto fijo, aunque también puede ser resuelta simbólicamente si las relaciones entre las variables lo permiten. La nueva ecuación a resolver sería:

$$x_a - f_b(f_a(x_a)) = 0.$$

En este ejemplo las causalidades ya estaban asignadas, pero ¿qué pasa si las ecuaciones son acausales? El procedimiento es el mismo, solo qué antes debemos decidir qué ecuación resuelve que incógnita. El ejemplo de la Fig. 2.2 presentaba un lazo al-

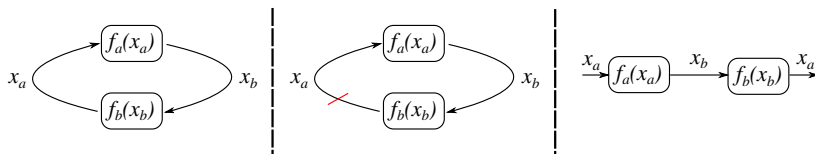


Figura 2.5: Tearing

gebraico. Si se enumeran las ecuaciones como se muestra a continuación, el digrafo de estructura es el representado en la Fig. 2.6a.

$e1 : U_0 = f(t)$	$e6 : i_0 = i_1 + i_L$
$e2 : u_1 = R_1 \cdot i_1$	$e7 : i_1 = i_2 + i_C$
$e3 : u_2 = R_2 \cdot i_2$	$e8 : U_0 = u_1 + u_3$
$e4 : u_3 = R_3 \cdot i_3$	$e9 : u_3 = u_2$
$e5 : u_L = L \cdot di_L/dt$	$e10 : u_L = u_1 + u_2$

Al aplicar el algoritmo de Tarjan tal como se enseña en la Fig. 2.6, rápidamente se llega a un punto muerto (v. Fig. 2.6c). Las ecuaciones que no han sido usadas forman un lazo algebraico como se vio en §2.3.2. En la Fig. 2.7a se puede ver como es la estructura de este lazo. El lazo puede ser roto por cualquiera de las incógnitas involucradas en él, pero una mala elección provocará tener que resolver otro lazo algebraico más. La variable que rompe el lazo se llama variable de tearing. La mejor elección siempre es aquella que asegure el mínimo de variables de tearing requeridas para resolver el lazo. En la §2.3.2, se escogió i_3 para resolverlo y la estructura quedó como se muestra la Fig. 2.7b (en amarillo la variable de tearing).

Existe un procedimiento heurístico para garantizar el menor número de variables de tearing a la hora de resolver un lazo (Cellier y Kofman, 2006).

- Usando el digrafo de estructura, hay que determinar las ecuaciones con el mayor número de líneas negras.
- Para cada una de esas ecuaciones, seguir las líneas negras hasta las incógnitas y determinar cuál de ellas tiene el mayor número de líneas negras que emanan de ella.
- Para cada una de esas incógnitas, determinar cuántas ecuaciones se harían causales si esa variable es asumida como conocida.
- Elegir entre esas incógnitas aquella que haga causales el mayor número de ecuaciones como la próxima variable de tearing

En el caso del ejemplo, $e7$ es la única ecuación con tres líneas negras, por tanto será usada como ecuación residual. Esas tres líneas negras dan a las incógnitas i_1 , i_2 e i_3 . Cada una de ellas tiene dos líneas negras, y si son asumidas como conocidas cada

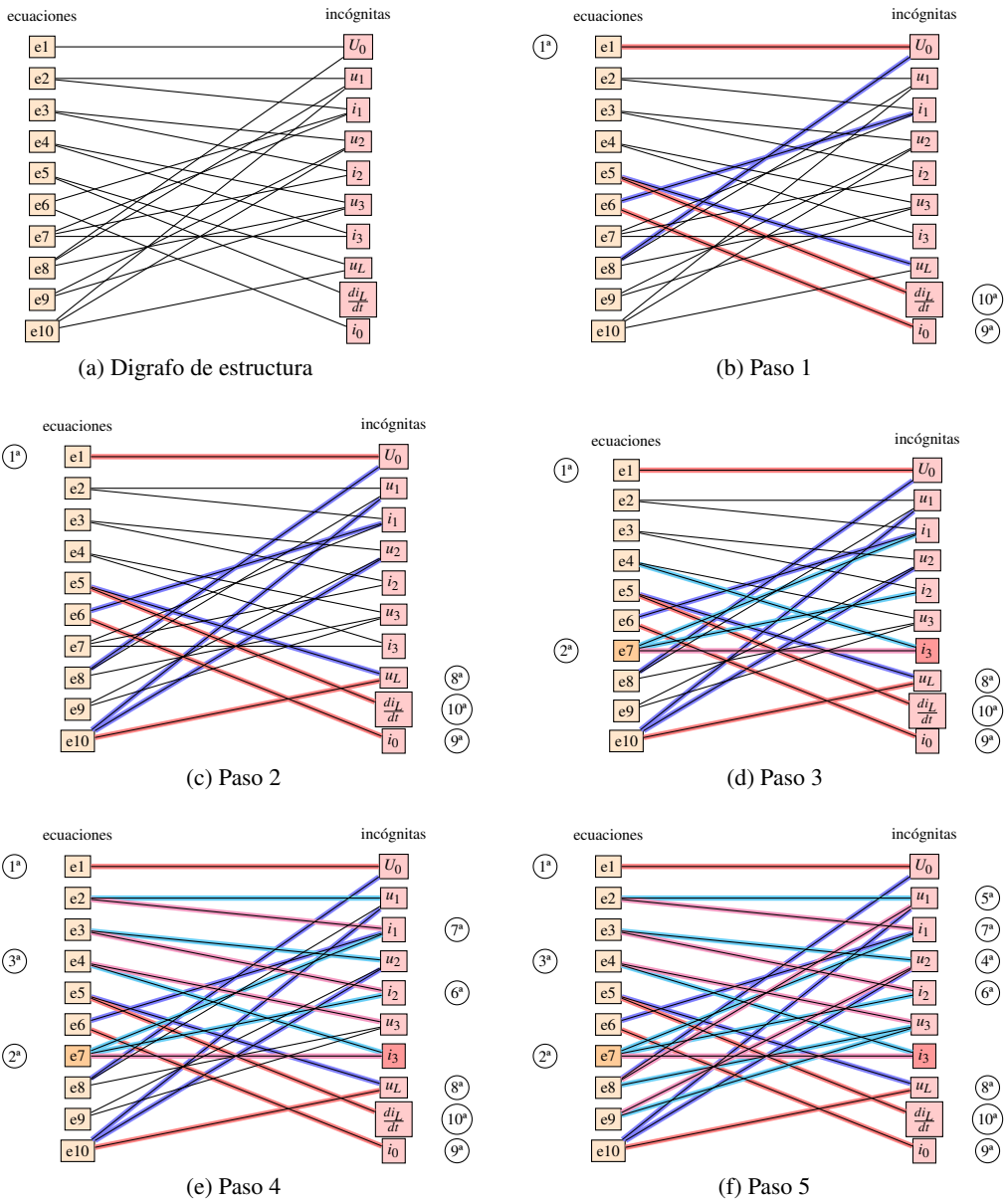


Figura 2.6: Aplicación del algoritmo de tearing al sistema de la Fig. 2.2

una de ellas resuelve el lazo. Por tanto, cualquiera de estas tres valdrá como variable de tearing.

Una vez escogida la variable de tearing, i_3 se puede continuar aplicando el algoritmo de Tarjan como puede verse en la Fig. 2.6d. Ahora, para distinguir el lazo algebraico las ecuaciones que se causalizan serán marcadas por líneas magenta (antes indicadas con

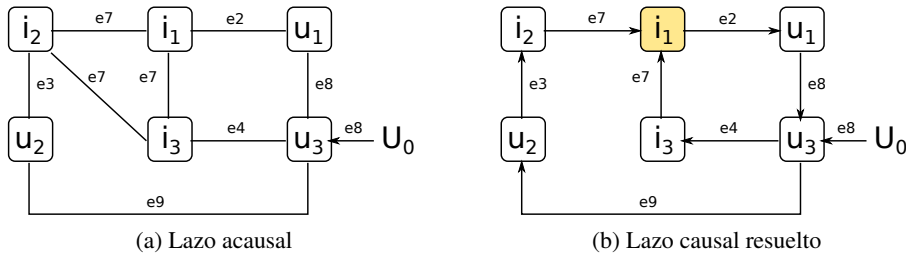


Figura 2.7: Diagrama de estructura del lazo algebraico

rojo) y las incógnitas que pasan a ser conocidas serán marcadas en cian (antes en azul). La matriz de incidencia queda de esta forma:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix}
 U_0 & i_3 & u_3 & u_2 & u_1 & i_2 & i_1 & u_L & i_0 & \frac{di_L}{dt} \\
 e1: & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 e7: & - & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\
 e4: & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 e9: & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 e8: & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 e3: & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
 e2: & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
 e10: & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
 e5: & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\
 e4: & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1
 \end{pmatrix}$$

La ecuación $e7$, rompe la forma triangular inferior de la matriz. La resolución de la variable i_3 por tearing simbólicamente mediante sustitución o numéricamente mediante el método de Newton va a permitir la resolución completa del sistema.

Para sistemas lineales, la obtención de la expresión algebraica de las variables de tearing se hace mediante la aplicación de la Regla de Cramer. Si se representa el sistema de ecuaciones matricialmente de la siguiente forma:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}, \tag{2.39}$$

donde \mathbf{A} es la matriz de coeficientes del sistema, \mathbf{x} el vector columna de las incógnitas y \mathbf{b} el vector columna de los términos independientes. La solución al sistema vendrá dada por:

$$x_j = \frac{|\mathbf{A}_j|}{|\mathbf{A}|}, \tag{2.40}$$

donde \mathbf{A}_j es la matriz resultante de reemplazar la j -ésima columna de \mathbf{A} por el vector

columna **b**.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ -R_3 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/R_2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/R_1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i_3 \\ u_3 \\ u_2 \\ u_1 \\ i_2 \\ i_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ U_0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.41)$$

$$i_3 = \frac{\begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ U_0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/R_2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/R_1 & 0 & 1 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ -R_3 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/R_2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/R_1 & 0 & 1 \end{vmatrix}} = \frac{R_2}{R_1 R_2 + R_1 R_3 + R_2 R_3} \cdot U_0. \quad (2.42)$$

Si se sustituye la ecuación $e7$ del sistema por esta nueva ecuación, se obtiene una matriz de incidencia triangular inferior. Aunque la Regla de Cramer es de una complejidad polinomial, el esfuerzo computacional crece con la cuarta potencia del tamaño del sistema de ecuaciones del lazo. Por esta razón, la determinación de una expresión algebraica para la variable de tearing de forma simbólica es solo útil para lazos pequeños. En el caso de lazos con un gran número de ecuaciones, la determinación del valor de la variable de tearing debe hacerse de forma numérica.

El cálculo numérico suele hacerse mediante el método de Newton, de una forma similar a la explicada en la §2.3.5. Cuando el conjunto de ecuaciones del lazo es lineal, el cálculo numérico de la variable de tearing es muy eficiente ya que el método de Newton converge en un solo paso (Cellier y Kofman, 2006).

Para su resolución numérica se parte del sistema ordenado mediante el algoritmo de Tarjan. Ya la misma estructura del lazo sugiere la iteración de la variable de tearing (i_3) usando la función de residuos ($e7$) para ello.

$$\begin{aligned} u_3 &= i_3 \cdot R_3, \\ u_2 &= u_3, \\ u_1 &= U_0 - u_3, \\ i_2 &= u_2/R_2, \\ i_1 &= u_1/R_1, \\ i_{3_{new}} &= i_1 - i_2. \end{aligned}$$

Al comienzo de la iteración se le debe dar un valor inicial a i_3 , la estimación del valor de esta variable en cada iteración vendrá dada por $i_{3_{new}}$. La iteración se repetirá hasta que la función cero alcance su valor.

$$\mathcal{F} = i_3 - i_{3_{new}}. \quad (2.43)$$

Como \mathcal{F} es escalar, la matriz jacobiana también lo será.

$$\mathcal{J} = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial i_3}. \quad (2.44)$$

Una forma conveniente de calcular la matriz jacobiana \mathcal{J} es por medio de la diferenciación algebraica (Cellier y Kofman, 2006):

$$\begin{aligned} du_3 &= R_3, \\ du_2 &= du_3, \\ du_1 &= -du_3, \\ di_2 &= du_2/R_2, \\ di_1 &= du_1/R_1, \\ di_{3_{new}} &= di_1 - di_2, \end{aligned}$$

$$\mathcal{J} = di_{3_{new}} - 1,$$

donde la próxima versión de i_3 puede calcularse así:

$$i_{3_{new}} = i_3 - \mathcal{J} / \mathcal{F}. \quad (2.45)$$

2.3.8. Solución eficiente de sistemas de ecuaciones: el algoritmo de relajación

Otra forma de resolver simbólicamente los lazos algebraicos es por medio del llamado algoritmo de relajación. Al contrario que pasaba con el algoritmo de tearing que es un algoritmo general para todo tipo de estructuras, este solo vale para sistemas de ecuaciones lineales.

La relajación es una implementación simbólica del algoritmo de eliminación gaussiana sin pivote (Otter et al., 1996). Para ello, se debe partir de una matriz de coeficientes del sistema sin ceros en la diagonal y con el menor número de elementos en el triángulo superior. Se suele usar el mismo método que se explicó para causalizar el lazo en el algoritmo de tearing §2.3.7 y se deja la ecuación de residuos en último lugar. La forma matricial del sistema de ecuaciones del lazo del ejemplo de la sección anterior queda:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -R_3 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & R_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_3 \\ u_2 \\ u_1 \\ i_2 \\ i_1 \\ i_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ U_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.46)$$

El método de eliminación gaussiana consiste en ir reduciendo el tamaño de la matriz mediante al aplicación de las siguientes ecuaciones:

$$A_{ij}^{(n+1)} = A_{ij}^{(n)} - A_{ik}^{(n)} \cdot A_{kk}^{(n)-1} \cdot A_{kj}^{(n)}, \quad (2.47)$$

$$b_i^{(n+1)} = b_i^{(n)} - A_{ik}^{(n)} \cdot A_{kk}^{(n)-1} \cdot b_k^{(n)}. \quad (2.48)$$

Después de cada iteración, la matriz pierde una fila y una columna y para compensarlas se introducen variables auxiliares (z). En la relajación, el elemento k siempre es 1 (primera fila, primera columna) y los elementos $i - 1$ y $j - 1$ de la iteración $n + 1$ corresponden con los i y j de la matriz n menos el producto del elemento i de la primera columna y el elemento j de la primera fila dividido entre el primer elemento de la matriz. Si en la primera columna algún elemento es igual a cero, los elementos de las filas que correspondan con él no cambian. De igual forma, si algún elemento de la primera fila es igual a cero, entonces los elementos de las columnas a las que correspondan tampoco cambian.

Si se aplica este algoritmo a la matriz del ejemplo, en la primera iteración se obtiene:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & z_a \\ 0 & 1 & 0 & 0 & z_b \\ -1 & 0 & R_2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_2 \\ u_1 \\ i_2 \\ i_1 \\ i_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ U_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.49)$$

donde $z_a = R_3$ y $z_b = -R_3$.

En la segunda iteración:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & z_b \\ 0 & R_2 & 0 & z_c \\ -1 & 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ i_2 \\ i_1 \\ i_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.50)$$

donde $z_c = z_a$.

En la tercera iteración:

$$\begin{pmatrix} R_2 & 0 & z_c \\ 0 & R_1 & z_d \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i_2 \\ i_1 \\ i_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_e \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.51)$$

donde $z_d = z_b$ y $z_e = U_0$.

En la cuarta iteración:

$$\begin{pmatrix} R_1 & z_d \\ -1 & z_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i_1 \\ i_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ z_g \end{pmatrix}, \quad (2.52)$$

donde $z_f = 1 - z_c/R_2$ y $z_g = -z_e/R_2$.

Y en la última iteración:

$$(z_h)(i_3) = (z_g), \quad (2.53)$$

donde $z_h = z_f + z_d/R_1$.

Ahora, ya se puede resolver fácilmente la incógnita i_3 :

$$i_3 = \frac{z_g}{z_h}. \quad (2.54)$$

Reemplazando secuencialmente las incógnitas, el nuevo sistema a resolver queda ordenado:

$$z_a = R_3, \quad (2.55)$$

$$z_b = -R_3, \quad (2.56)$$

$$z_c = z_a, \quad (2.57)$$

$$z_d = z_b, \quad (2.58)$$

$$z_e = U_0, \quad (2.59)$$

$$z_f = 1 - \frac{z_c}{R_2}, \quad (2.60)$$

$$z_g = -\frac{z_e}{R_2}, \quad (2.61)$$

$$z_h = z_f + \frac{z_d}{R_1}, \quad (2.62)$$

$$i_3 = \frac{z_g}{z_h}, \quad (2.63)$$

$$i_2 = \frac{z_e - z_c \cdot i_3}{R_2}, \quad (2.64)$$

$$u_1 = U_0 - z_b \cdot i_3, \quad (2.65)$$

$$u_2 = -z_a \cdot i_3, \quad (2.66)$$

$$u_3 = R_3 \cdot i_3. \quad (2.67)$$

Este algoritmo suele ofrecer soluciones muy elegantes para los lazos algebraicos lineales. Se aprovecha de la naturaleza dispersa que generalmente tiene la matriz de coeficientes del sistema, pero al igual que pasaba con el algoritmo de tearing, no debe ser usado para lazos con un gran número de ecuaciones ya que su carga computacional crece con el tamaño de la matriz. El algoritmo de tearing junto con la iteración numérica de Newton suele ser el método preferido para la resolución de lazos algebraicos.

2.3.9. Eliminación de singularidades estructurales: el algoritmo de Pantelides

Como se vio en §2.3.3 la singularidades estructurales son muy habituales en el modelado orientado a objetos. El problema consiste en que hay más variables de estado que

grados de libertad en el sistema. Las soluciones pasan por añadir más grados de libertad o reducir las variables de estado.

Si se recurre a reducir las variables de estado entonces, probablemente, la solución al sistema va tener que pasar por derivar numéricamente una variable, y con el resultado de esta, calcular la variable que será integrada. La forma irregular del error que produce la derivación numérica complica la determinación del paso de integración, por ello debe evitarse.

Se puede ampliar el grado de libertad del sistema sustituyendo la ecuación redundante, también llamada ecuación de restricción (la que relaciona las supuestas variables de estado) por la derivada de la misma. En una ligadura, ($x = y$) cabe esperar que si ambos lados de la igualdad inicialmente valen lo mismo y varían de la misma forma, valgan lo mismo en cualquier instante ($\frac{dx}{dt} = \frac{dy}{dt}$). El problema está en que si se integran separadamente $\frac{dx}{dt}$ e $\frac{dy}{dt}$ para calcular x e y , los errores numéricos de la integración pueden hacer que la igualdad no se cumpla estrictamente. Y esta situación puede llegar a ser relevante o no dependiendo del caso.

El algoritmo de Pantelides (Pantelides, 1988) permite eliminar las singularidades estructurales de una forma sistemática y evitando los problemas anteriormente expuestos. El algoritmo consiste en que una vez hallada la ecuación de restricción, se añade su derivada a la lista de ecuaciones y una de las variables de estado se relaja, es decir, deja de ser una variable de estado para formar parte de las incógnitas. Se deben añadir tantas ecuaciones como incógnitas nuevas (variables derivadas) se produzcan al derivar la ecuación de restricción. Estas nuevas ecuaciones vendrán de las derivadas de otras ecuaciones donde aparezca la nueva variable derivada. Ninguna de estas nuevas derivadas será integrada, salvo las variables de estado, y se calcularán de forma algebraica.

El ejemplo mostrado en la §2.3.3 presentaba una singularidad estructural. Para aplicar el algoritmo de Pantelides, primero se tiene que encontrar la ecuación de restricción del sistema. Enumerando las ecuaciones como se muestra a continuación, el digrafo de estructura es el de la Fig. 2.8a.

$$\begin{array}{l|l}
 e1 : & U_0 = f(t) \\
 e2 : & u_1 = R_1 \cdot i_1 \\
 e3 : & u_2 = R_2 \cdot i_2 \\
 e4 : & u_L = L \cdot di_L/dt \\
 e5 : & i_C = C \cdot du_C/dt \\
 \hline
 e6 : & i_0 = i_1 + i_C \\
 e7 : & i_1 = i_2 + i_L \\
 e8 : & U_0 = u_1 + u_L \\
 e9 : & u_L = u_2 \\
 e10 : & u_C = u_1 + u_2
 \end{array}$$

Aplicando el algoritmo del Tarjan al digrafo de estructura, se encuentra la singularidad estructural del sistema (v. Fig. 2.8b). La incógnita i_C se ha quedado sin ecuación que la resuelva. Pero el algoritmo de Pantelides necesita conocer la ecuación de restricción, para ello, se debe resolver el lazo algebraico. Si se resuelve por tearing, la variable de tearing es u_1 y la ecuación residual $e2$ (v. Fig. 2.8c). La ecuación de restricción encontrada es la $e9$, ya que ninguna línea roja o magenta emana de ella, tal como se muestra en la Fig. 2.8d.

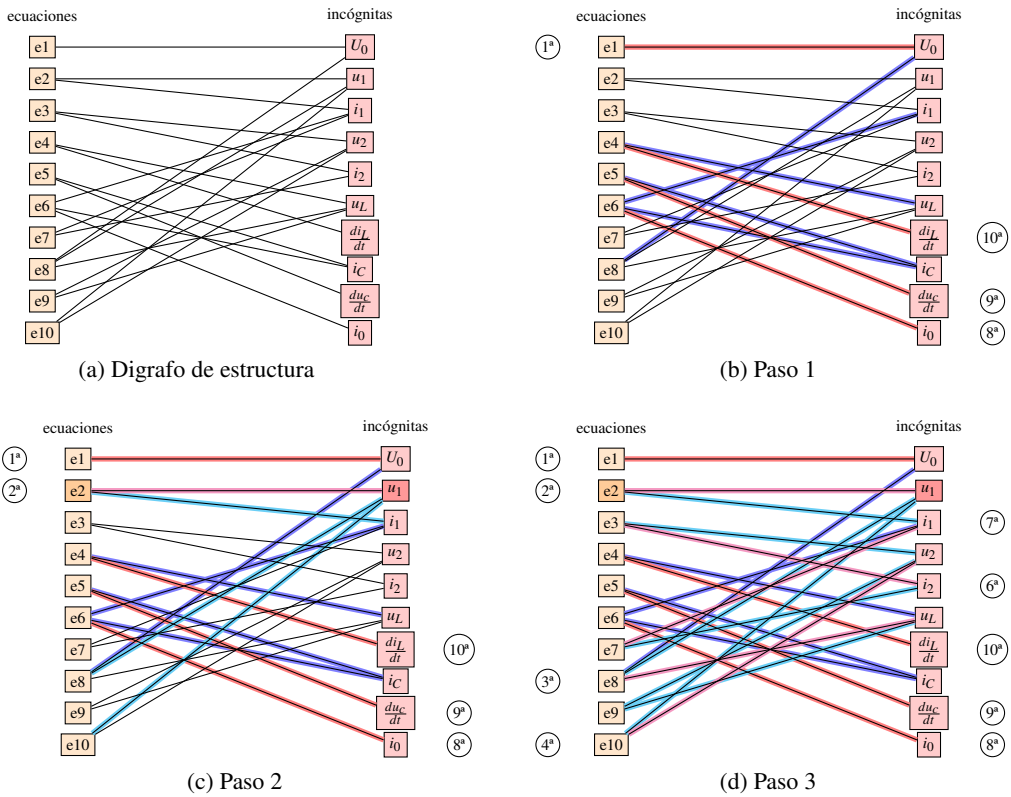


Figura 2.8: Aplicación del algoritmo de Pantelides al sistema de la Fig. 2.3

Las ecuaciones han quedado causalizadas de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 U_0 &= f(t), \\
 u_1 &= R_1 \cdot i_1, \\
 u_L &= U_0 - u_1, \\
 u_2 &= u_C - u_1, \\
 0 &= u_L - u_2, \\
 i_2 &= \frac{u_2}{R_2}, \\
 i_1 &= i_2 + i_L, \\
 i_0 &= i_1 + i_C, \\
 \frac{du_C}{dt} &= \frac{i_C}{C}, \\
 \frac{di_L}{dt} &= \frac{u_L}{L}.
 \end{aligned}$$

Esta causalización es muy útil para la serie de derivaciones que se tiene que hacer.

La primera ecuación que se deriva es la de restricción:

$$0 = du_L - du_2, \quad (2.68)$$

donde du_L y du_2 son dos nuevas pseudo-derivadas que se han introducido. Se deben definir con las ecuaciones que calculan u_L y u_2 .

$$du_L = dU_0 - du_1, \quad (2.69)$$

$$du_2 = du_C - du_1. \quad (2.70)$$

Al ser u_C la primera variable de estado que se encuentra en la derivación, se elige como la variable de estado que relaja. Por tanto, u_C formará parte de las incógnitas. Con la última derivación se han introducido otras dos nuevas pseudo-derivadas que hay que definir.

$$dU_0 = \frac{df(t)}{dt}, \quad (2.71)$$

$$du_1 = R_1 \cdot di_1. \quad (2.72)$$

Nuevamente, la pseudo-derivada di_1 debe definirse.

$$di_1 = di_2 + \frac{di_L}{dt}. \quad (2.73)$$

Al ser i_L variable de estado, su derivada ha de ser la real. La pseudo-derivada de di_2 aún no ha sido definida y, por tanto, debe definirse.

$$di_2 = \frac{du_2}{R_2}. \quad (2.74)$$

Cuando todas las pseudo-derivadas están definidas, se añaden al conjunto de ecuaciones que se va a resolver. En total hacen 17 ecuaciones y 17 incógnitas.

$e1 :$	$U_0 = f(t)$	$e9 :$	$du_C = \frac{ic}{C}$
$e2 :$	$u_1 = R_1 \cdot i_1$	$e10 :$	$\frac{di_L}{dt} = \frac{u_L}{L}$
$e3 :$	$u_L = U_0 - u_1$	$e11 :$	$0 = du_L - du_2$
$e4 :$	$u_2 = u_C - u_1$	$e12 :$	$du_L = dU_0 - du_1$
$e5 :$	$0 = u_L - u_2$	$e13 :$	$du_2 = du_C - du_1$
$e6 :$	$i_2 = \frac{u_2}{R_2}$	$e14 :$	$dU_0 = \frac{df(t)}{dt}$
$e7 :$	$i_1 = i_2 + i_L$	$e15 :$	$du_1 = R_1 \cdot di_1$
$e8 :$	$i_0 = i_1 + i_C$	$e16 :$	$di_1 = di_2 + \frac{di_L}{dt}$
		$e17 :$	$di_2 = \frac{du_2}{R_2}$

Se aplica el algoritmo de Tarjan al nuevo sistema como se muestra en la Fig. 2.9. La reducción de índice suele acabar en un lazo algebraico que se puede resolver con los algoritmos ya explicados. Si se usa tearing, la ecuación residual debe ser $e16$ y

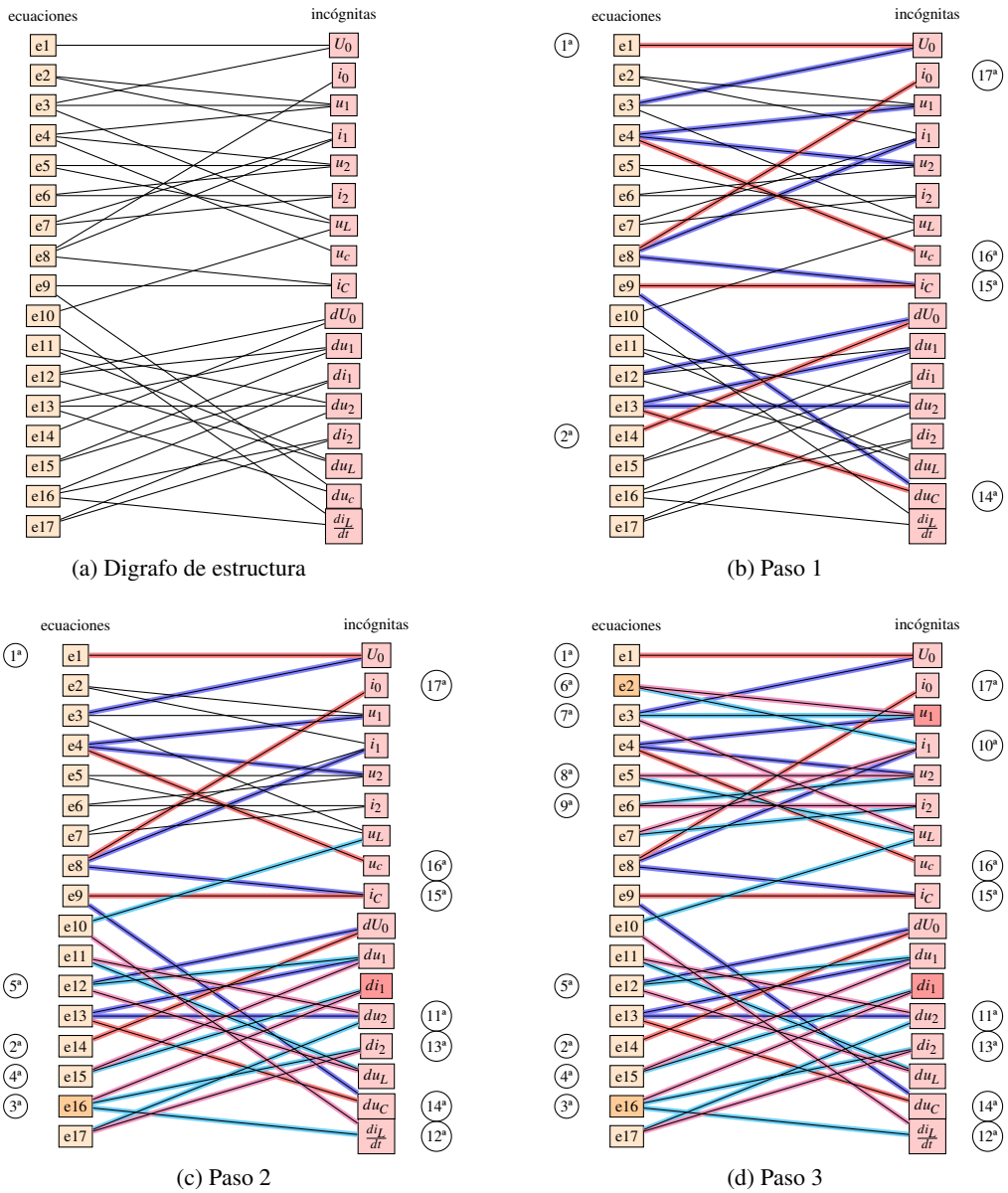


Figura 2.9: Aplicación del algoritmo de Pantelides al sistema de la Fig. 2.3 (continuación)

su variable the tearing di_1 . Con la anterior elección se han causalizado 7 ecuaciones de las 11 ecuaciones que faltaban. De nuevo, hay que resolver otro lazo algebraico, pero en este, cualquier ecuación residual y cualquier variable de tearing lo resuelven completamente. Si se elige $e2$ como ecuación residual y u_1 como variable de tearing

el sistema queda totalmente resuelto como se muestra en la Fig. 2.9d. El sistema ha quedado resuelto completamente con solo una variable de estado, i_L , y dos variables de tearing, la pseudo-derivada di_1 y u_1 .

2.3.10. Integración numérica: DASSL

La integración numérica es la siguiente etapa en la simulación de sistemas dinámicos. La Fig. 2.10 muestra los lazos necesarios para realizar la simulación en entornos de simulación como Dymola. Cuando se consigue una completa causalización del sistema y se expresa en una representación en forma de espacio de estados, un primer lazo usa el método de Newton para resolver los lazos algebraicos que no han podido ser resueltos de forma simbólica. Un segundo lazo, que emplea también el método de Newton, es usado para integrar las variables de estado con un algoritmo de integración numérica de paso y orden fijo. Un tercer lazo usa el error en la integración para controlar el tamaño del paso ya que si tras un cierto número de iteraciones el algoritmo no ha convergido, se reduce el tamaño del paso o se incrementa el orden del integrador.

DASSL (*Differential/algebraic system solver*) es uno de los integradores numéricos para simulación más exitosos del mercado. Fue desarrollado por [Petzold \(1983\)](#) para Sandia National Laboratories. Es un código multi-paso de orden y paso variable que usa un mecanismo de refuerzo del orden durante la inicialización. Este implementa fórmulas de diferenciación regresiva, en inglés BDF (*Backward differentiation formula*), de órdenes del 1 al 5. En cada paso de integración, el método de Newton es usado para resolver los sistemas algebraicos no lineales.

DASPK ([Brown et al., 1994](#)), perteneciente a la familia de integradores de DASSL

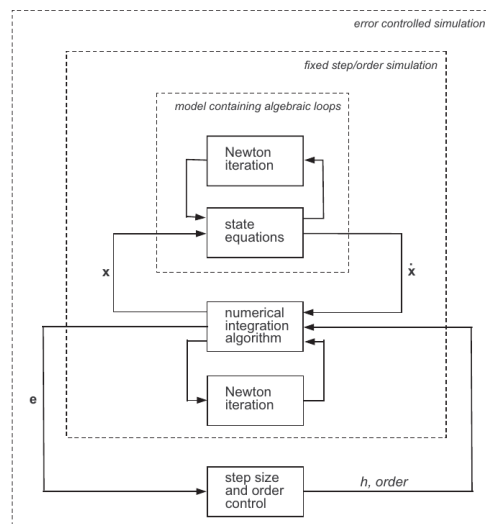


Figura 2.10: Los tres lazos de simulación ([Cellier y Kofman, 2006](#))

fue diseñado para resolver DAEs de gran tamaño. Es uno de los integradores numéricos incluido en las últimas versiones de Dymola, aunque la herramienta lo denomine DASSL, y es el que viene por defecto. La elección de este integrador se debe a que al igual que DASSL es capaz de manejar sistemas rígidos, es decir, sistemas donde las constantes de tiempo de algunas variables difiere en órdenes de magnitud de otras. Aunque la mayoría de los sistemas complejos son de tipo rígido, los usuarios de los modelos pueden desconocerlo. La ventaja de los integradores para sistemas rígidos es que resuelven también sistemas no rígidos cosa que no suele ocurrir en el otro sentido, aunque evidentemente, lo hacen con menor eficiencia. Otro de los motivos de la elección de DASPK como integrador es porque su código es muy robusto, y aunque existen integradores más eficientes en el tratamiento de problemas altamente no lineales (como lo son la mayoría de los sistemas en la ingeniería), la integración numérica consume solo aproximadamente el 5 % del código total. El otro 95 % se ocupa del control del tamaño del paso y el orden, problemas en la inicialización, problemas de lectura de entradas y otros problemas como el manejo de discontinuidades (Cellier y Kofman, 2006).

Aunque el algoritmo es capaz de resolver DAEs de índice 1, entornos de simulación como Dymola lo transforman en una representación de espacio de estados de índice 0, tal y como se ha explicado a lo largo de la presente sección, §2.3. Esto, se debe a que para el usuario es mucho más sencillo presentar un conjunto de condiciones iniciales consistente en este formato, facilitando por tanto, la inicialización de la simulación.

2.4. El lenguaje Modelica

Modelica es un lenguaje de modelado orientado a objetos y basado en ecuaciones. Fue desarrollado en 1996, y desde entonces es mantenido por la organización sin ánimo de lucro Modelica Association, compuesta por múltiples organizaciones y miembros individuales de Europa, Estados Unidos y Canadá. Está disponible gratuitamente, y pretende ser un formato estándar para el intercambio de modelos entre usuarios y herramientas.

Es un lenguaje diseñado para el modelado de sistemas físicos heterogéneos, complejos y de gran tamaño. Permite describir los sistemas multi-dominio de forma acausal mediante sistemas de DAEs. Haciendo uso del editor gráfico que algunos entornos de simulación tienen integrado es posible usar metodologías gráficas para el modelado. Esto permite construir modelos usando diagramas de composición con iconos que representan modelos de componentes que pueden recoger los parámetros mediante ventanas y donde las líneas de conexión representan los flujos de datos entre ellos.

Modelica está diseñado para facilitar las transformaciones simbólicas de los modelos. Como ya se ha visto en §2.3, estas transformaciones son necesarias ya que muchos sistemas son modelos de índice superior. La gramática y semántica del lenguaje quedan determinadas por las especificaciones de Modelica (Modelica Association, 2014). Estas no describen la metodología de simulación, sin embargo, si definen un conjunto de ecuaciones que los resultados de la simulación deben satisfacer. Para realizar las

simulaciones es necesario un entorno de simulación (v. §2.4.4).

2.4.1. Características principales

Las cuatro características más importantes son (Fritzson, 2004):

- Modelica es un lenguaje declarativo basado en ecuaciones. Al permitir un modelado acausal, las clases de Modelica pueden adaptarse a la dirección del flujo de datos.
- Modelica tiene una capacidad de modelado multi-dominio, esto es, modelos de sistemas físicos de diferentes dominios, e.g. eléctrico, mecánico, termodinámico, hidráulico, etc. pueden describirse y conectarse.
- Modelica es un lenguaje orientado a objetos con un concepto de clase general que unifica clases, plantillas y subtipos generales en una sola instrucción. Esto permite la reutilización y la herencia de modelos.
- Modelica tiene un potente componente *model*, con instrucciones para crear y conectar componentes que lo hace ideal para la descripción jerárquica de modelos físicos complejos.

2.4.2. Fundamentos del lenguaje

La representación textual del modelo del circuito de la Fig. 2.1 en el lenguaje Modelica (obviando las anotaciones gráficas) sería el siguiente:

```

model Circuito1
  package EL=Modelica.Electrical.Analog.Basic;
  EL.Ground ground;
  EL.Resistor R1(R=1000);
  EL.Resistor R2(R=500);
  EL.Capacitor C(C=1e-3);
  EL.Inductor L(L=1000);
  EL.SineVoltage U0(
    V=220,
    phase=0,
    freqHz=50);
equation
  connect(U0.p, L.p);
  connect(R1.p, L.p);
  connect(R2.n, L.n);
  connect(C.p, R1.n);
  connect(R2.p, R1.n);
  connect(C.n, ground.p);
  connect(ground.p, L.n);
  connect(ground.p, U0.n);
end Circuito1;

```

Listing 2.1: Código de Modelica para el circuito de la Fig. 2.1

Este, es un modelo compuesto que especifica la topología del sistema a modelar en términos de componentes y conexiones entre componentes. La primera instrucción, “`package EL=Modelica.Electrical.Analog.Basic;`”, permite abreviar la ruta de

una librería de componentes eléctricos básicos con la palabra “EL”. La instrucción “`EL.Resistor R1(R=1000);`” declara un componente “R1” de la clase “`Modelica.Electrical.Analog.Basic.Resistor`” e introduce el valor de la resistencia, “R”, a “1000” ohmios.

Para un modelado físico, Modelica puede manejar tipos declarados, como por ejemplo:

```
type ElectricCurrent = Real (final quantity="ElectricCurrent", final unit="A");
type Capacitance = Real (final quantity="Capacitance", final unit="F", min=0);
```

Listing 2.2: Declaración de tipos en Modelica

Donde “`Real`” es un tipo base predefinido, al cual se le añaden atributos como nombre de la cantidad, unidad de medida o valores nominal, máximo, mínimo o inicial. La MSL (*Modelica Standard Library*) tiene cerca de 450 tipos declarados.

Las conexiones especifican las interacciones entre componentes, y estas se representan gráficamente por líneas entre conectores. Un conector debe contener todas las variables que describen la interacción. En el caso de componentes serían voltaje y corriente:

```
connector Pin "Pin of an electric component"
  Modelica.SIunits.Voltage v "Potential at the pin";
  flow Modelica.SIunits.Current i "Current flowing into the pin";
end Pin;
```

Listing 2.3: Conector eléctrico

Una conexión, como por ejemplo “`connect(U0.p, L.p)`”, une dos pins formando un único nodo. Esto implica dos ecuaciones: “ $U0.p.v=L.p.v$ ” y “ $U0.p.i+L.p.i=0$ ”, que corresponden a las leyes de Kirchoff: en un nodo todos los voltajes son el mismo y su suma de corrientes es cero. El prefijo “`flow`” indica precisamente que esa variable se considera un flujo, y en un nodo la suma de los flujos es cero (Otter y Elmqvist, 2001).

Otra importante característica para la reutilización de código es poder definir modelos parciales que luego podrán ser heredados por otros modelos. Por ejemplo, en el caso del dominio eléctrico, muchos de los componentes tienen dos conectores por eso resulta muy útil definir una interfaz que tenga los dos conectores, “p” y “n”, y dos variables, “v” e “i”, que calculen la caída de voltaje entre ambos conectores y la corriente que lo atraviesa.

```
partial model OnePort
  "Component with two electrical pins p and n and current i from p to n"
  Modelica.SIunits.Voltage v "Voltage drop between the two pins (= p.v - n.v)";
  Modelica.SIunits.Current i "Current flowing from pin p to pin n";
  PositivePin p "Positive pin (potential p.v > n.v for positive voltage drop v)"
  NegativePin n "Negative pin";
equation
  v = p.v - n.v;
  0 = p.i + n.i;
  i = p.i;
end OnePort;
```

Listing 2.4: Modelo parcial

En la sección “[equation](#)” se describen las relaciones que existen entre las variables. La palabra “[partial](#)” indica que el modelo es incompleto y no puede ser instanciado. Para ser usado, en este caso se debe añadir la ecuación constituyente. En el caso del condensador esto se haría de la siguiente forma:

```

model Capacitor "Ideal linear electrical capacitor"
  extends Interfaces.OnePort;
  parameter Capacitance C(start=1) "Capacitance";
equation
  i = C*der(v);
end Capacitor;

```

Listing 2.5: Modelo parcial

El modelo hereda de la clase “[OnePort](#)” y además se le añade un parámetro para definir la ecuación del componente. La derivada con respecto al tiempo de una variable se indica mediante el operador “[der\(\)](#)” y esa, en principio, será una variable de estado del sistema.

Estos son los elementos básicos del lenguaje, aunque evidentemente, existen muchos más. Estructuras de repetición, algoritmos, funciones, matrices, bloques o manipuladores de eventos son algunos de los muchos elementos que se pueden manejar en Modelica. Para más información, se pueden consultar las especificaciones del lenguaje ([Modelica Association, 2014](#)).

2.4.3. Modelica Standard Library

La librería más importante de Modelica es la MSL, desarrollada y mantenida junto con el lenguaje Modelica por la Modelica Association. La última versión disponible es la 3.2.1 build 2. Su uso es libre y el código es abierto. Provee constantes, tipos, conectores, interfaces y modelos para diferentes dominios de la ingeniería. Las principales sublibrerías son:

- *Blocks & ComplexBlocks*. Modelado con bloques continuos y discretos de entrada salida.
- *StateGraph*. Modelado con máquinas jerárquicas de estado.
- *Electrical*. Electrónica analógica, digital y máquinas eléctricas.
- *Magnetic*. Modelado magnético basado en tubos de flujo.
- *Mechanics*. Modelado de sistemas mecánicos rotacionales y traslacionales unidimensionales. Modelado de sistemas multicuerpo tridimensionales.
- *Fluid*. Modelado de fluidos compresibles e incompresibles y monocompuesto o multicompuestos unidimensionales.
- *Media*. Modelos para propiedades físicas de fluidos.

- *Thermal*. Para el modelado de transferencia de calor.
- *Math & ComplexMath*. Funciones y operadores para matemática escalar y vectorial.
- *Constants*. Constantes matemáticas y físicas.
- *Icons*. Iconos para componentes, modelos y paquetes.
- *SIunits*. Tipos definidos para las unidades del SI y de otros sistemas y conversores de unidades.
- *Utilities*. Funciones para manejo de ficheros, línea de comandos, cadenas de caracteres.

Aunque la MSL no pretende estandarizar los dominios físicos con la metodología de modelado que se lleve a cabo en cada una de las sublibrerías, si se modela algún sistema que incluya alguno de esos dominios es conveniente que ambos conecten perfectamente. Por eso, en la medida de lo posible, usar conectores de la MSL en librerías propias es una técnica muy útil ya que permite usar compontes de esta.

Además, junto a la MSL existen numerosas librerías gratuitas y comerciales, una lista de ellas bastante completa puede encontrarse en <https://www.modelica.org/libraries>.

2.4.4. Entornos de simulación: Dymola

Como ya se ha comentado a lo largo de la §2.4, el lenguaje de modelado Modelica es una descripción textual para definir completamente un modelo o para recopilar modelos en una librería. Por ello un entorno de simulación se hace necesario para poder realizar las simulaciones. Además, algunos de los entornos de simulación de Modelica también son editores tanto textuales como gráficos del lenguaje. Se puede encontrar información acerca de ellos en <https://www.modelica.org/tools>.

Dymola, quizás sea entre los entornos de M&S para Modelica el más popular. La primera versión fue desarrollada por [Elmqvist \(1978\)](#) para su tesis doctoral y estaba basado en el lenguaje Dymola, un lenguaje precursor de Modelica.

La última versión de Dymola soporta Modelica 3.3. El entorno posee todo lo mencionado anteriormente, un editor textual, un editor gráfico, un potente manipulador simbólico de ecuaciones y permite usar DASSL como integrador numérico. Además, provee de un bloque de Simulink llamado *DymolaBlock* para poder importar cualquier modelo de Modelica en Simulink, y por tanto poder ser usado en el entorno Matlab. Este bloque es muy útil ya que permite usar los modelos para sistemas de control avanzado desarrollados en Matlab o para calibrar los modelos con algunos de los de los algoritmos de optimización que posee este entorno.

Al ser Dymola una herramienta comercial, su código es cerrado y la forma de manipular simbólicamente las ecuaciones no puede saberse con certeza. Sin embargo, lo más probable es que emplee como base los algoritmos expuestos en la sección §2.3.

2.4.5. FMI

Modelica no es ni mucho menos el único lenguaje de modelado que existe, ni su uso, es tan extendido como otros, e.g. Matlab. Muchas veces, cuando se desarrolla un modelo con una herramienta determinada esta no ofrece todas las posibilidades que uno quiere, o dos modeladores que usan herramientas diferentes desean conectar sus modelos. Existen algunas herramientas propietarias que facilitan mecanismos propietarios para el intercambio de modelos, e.g. el *DymolaBlock* descrito en la sección anterior, pero su uso es bastante limitado ya que no pueden ser adoptados por otras herramientas que no sean las que considere el propietario.

Por ello en 2010, bajo el marco del proyecto Information Technology for European Advancement (ITEA-2) Modelisar (Modelisar, 2014), se empezó a desarrollar el FMI (*Functional mock-up interface*), un estándar independiente de herramientas de M&S y del lenguaje de modelado para el intercambio y co-simulación de modelos dinámicos. Las especificaciones del estándar FMI están siendo desarrolladas en estrecha colaboración entre fabricantes de herramientas y centros de investigación.

El FMI puede ser usado para (Bonilla et al., 2013a):

- *Intercambio de modelos.* El objetivo es que una herramienta de modelado pueda generar código C de un modelo dinámico que pueda ser utilizado por otra herramienta. Los modelos son descritos por ecuaciones diferenciales, algebraicas y discretas con eventos de tiempo, estado o paso de integración. El código generado es distribuido en un único archivo comprimido en formato zip, llamado Functional Mock-up Unit (FMU).
- *Co-simulación.* El objetivo es proporcionar una interfaz estándar para acoplar dos o más herramientas de modelado y simulación. Los modelos son simulados independientemente y la información entre herramientas es intercambiada de forma síncrona.

La adopción del FMI por parte de las herramientas de M&S sigue incrementándose día a día. Actualmente, ya está disponible la especificación de FMI 2.0 (Modelisar, 2014). Sin embargo, todavía existen una serie de limitaciones pero ya es posible el intercambio de modelos mediante herramientas que implementan el lenguaje de modelado Modelica y otras herramientas como Matlab/Simulink (Bonilla et al., 2013a).

2.4.6. Depuración de errores: incrementar la calidad del modelado

A pesar de las numerosas ventajas que se han expuesto sobre el modelado modular y jerárquico, también existen desventajas. Una que resulta muy engorrosa es la depuración de errores. Cuando se desarrolla un modelo de un sistema físico complejo con una cantidad enorme de componentes, niveles y conexiones, un simple fallo, como pueda ser una mala conexión o una singularidad en un elemento (que en el peor de los casos queda enterrado en el nivel inferior del modelo) puede costar al modelador horas y horas

para depurar el código si la única ayuda que se recibe por parte del entorno de M&S es un mensaje de error del tipo “*El problema es estructuralmente singular: Tiene 1103 incógnitas escalares y 1102 ecuaciones escalares...*”.

El problema es que Modelica es un lenguaje acausal y en contraste con los lenguajes causales donde el uso de bloques de entrada/salida hace sencillo verificar localmente si todas las entradas están conectadas, esta verificación no es posible. El análisis estructural solo puede hacerse globalmente una vez que el modelo ha sido causalizado. [Olsson et al. \(2008\)](#) han desarrollado una metodología para facilitar el diagnóstico en Modelica 3.0 o posterior. Esta consiste en imponer una serie de restricciones cuando el modelo está en fase de desarrollo. La principal restricción (en los casos habituales) es que “*todas las clases no parciales de modelos o bloques deben estar localmente balanceadas.*”, i.e. el número de ecuaciones en el modelo de nivel superior = el número de incógnitas - el número de entradas - el número de variables tipo flujo. Como consecuencia de esto, para cada variable de tipo flujo en un conector debe existir un número idéntico de variables no causales y no flujo (también llamadas variables de esfuerzo).

La gran mayoría de los conectores de la MSL tienen en cuenta esta restricción. Cabe destacar por la importancia en esta tesis el conector de Modelica.Fluid. Este tiene como variable de flujo el flujo másico y como variable de esfuerzo la presión. Además tiene una serie de variables tipo *stream* que son variables causales especiales, e.g. entalpía específica o fracción másica. Están diseñadas para que el valor de salida de esas variables sea el valor medio ponderado de las entradas donde el flujo másico hace de peso. Por ello este tipo de variables debe tener un valor asignado en cada lado del conector. Para más información acerca de este tipo de variable se puede consultar ([Franke et al., 2009](#)).

Uno de los trabajos relacionados con esta tesis consistió en incrementar la calidad del modelado en la librería de Bond Graphs de Modelica, BondLib, imponiendo estas restricciones en todos los componentes para hacer más sencilla la interpretación de los mensajes de error a los usuarios ([de la Calle et al., 2013a](#)).

2.5. Herramientas de modelado y simulación utilizadas en esta tesis

Para la realización de esta tesis doctoral se ha utilizado fundamentalmente Dymola, pero también como apoyo se han empleado otras herramientas como Matlab/Simulink y EES (*Engineering Equation Solver*).

- *Dymola*. La herramienta para desarrollar y simular los modelos en el lenguaje Modelica de esta tesis ha sido Dymola. A lo largo de la tesis se han utilizado diferentes versiones de Dymola desde la 6.0b, para los primeros modelos desarrollados, a la última versión de Dymola, la 2015, para los últimos. El integrador numérico ha sido DASSL y la tolerancia ha sido elegida dependiendo del modelo en cuestión variando desde el valor por defecto 10^{-4} hasta 10^{-8} .
- *Matlab/Simulink*. Hasta la aparición de la Optimization Library de Modelica, la

calibración de modelos en Dymola estaba bastante limitada. La calibración de los primeros modelos de esta tesis doctoral se realizaron con la Global Optimization Toolbox de Matlab haciendo uso del *DymolaBlock*. La manipulación simbólica de la mayoría de las funciones de propiedades termodinámicas expuestas en el Apéndice A también se realizó en Matlab. Así mismo, Matlab ha sido usado en esta tesis para presentación gráfica de los resultados de simulación. La versión de Matlab usada fue la R2010a (7.10.0.499).

- *EES*. La herramienta de modelado y simulación EES posee una extensa librería de propiedades termodinámicas de numerosos fluidos. En esta tesis ha sido usada para comprobar la librería de propiedades termodinámicas (v. Apéndice A).

2.6. Resumen

Este capítulo es un introducción a un tema tan complejo como lo es el modelado y simulación de sistemas dinámicos. Comienza con una breve introducción donde se explica la importancia de esta técnica en el ámbito científico y de la ingeniería. Continúa con una explicación de algunos conceptos básicos de modelado como son los de modularidad y jerarquización, orientación a objetos y causalidad computacional. Se han expuestos algunos conceptos claves de simulación como la partición, los lazos algebraicos y las singularidades, presentando además soluciones actuales a estos problemas. El lenguaje de modelado Modelica se introduce en la siguiente sección, explicando brevemente sus características, su sintaxis, MSL y FMI, para terminar con una técnica para incrementar la calidad de modelado. Finalmente se exponen las herramientas de M&S que han sido usadas en la tesis.

2.7. Contribuciones científicas relacionadas

Las contribuciones científicas de esta tesis doctoral relacionadas con el capítulo son enumeradas y brevemente comentadas en la siguiente lista.

1. J. BONILLA, J. D. ÁLVAREZ, L. ROCA, A. DE LA CALLE, L. J. YEBRA & F. RODRÍGUEZ. “Intercambio de Modelos entre Herramientas de Simulación con Functional Mock-up Interface (FMI)”. Poster en *XXXIV Jornadas de Automática* (pp. 1-7). Tarrasa, España. (2013). *Distinción al mejor trabajo en modelado y simulación*.

En este trabajo se investiga el intercambio de modelos entre herramientas con FMI. Se implementó dicho intercambio entre Dymola y Matlab con dos ejemplos.

2. A. DE LA CALLE, F. E. CELLIER, L. YEBRA & S. DORMIDO. “Improvements in BondLib, the Modelica Bond Graph Library”. Presentación oral en *8th EUROSIM Congress on Modelling and Simulation* (pp. 282 - 287). Cardiff, Reino Unido. (2013). DOI: [10.1109/EUROSIM.2013.79](https://doi.org/10.1109/EUROSIM.2013.79)

En este trabajo se presenta la nueva versión de BondLib, una de las librerías más extensas de Modelica y con la que se pueden desarrollar modelos basados en Bond Graphs. Las mejoras introducidas en la nueva librería están orientadas a facilitar la depuración de errores de los modelos.

Capítulo 3

Introducción a la termodinámica química

*Now, want and able are two different things.
One is desire, and the other is the means.
Like I wanna hold you, and see you, and feel
you in my dreams.
But that's not possible, something simply will
not let me.*¹

Jack White
(Letra de Jack White)

3.1. Introducción

La termodinámica es una disciplina de la ciencia que está basada en unos principios que se enuncian axiomáticamente. Estos, resumen y generalizan las observaciones recogidas de la naturaleza. Pueden expresarse matemáticamente mediante relaciones sencillas, a partir de las cuales, se deducen las leyes que gobiernan los fenómenos caloríficos, objeto principal de esta ciencia. Aunque no pueden demostrarse matemáticamente nunca se han encontrado en la naturaleza situaciones que las contradigan.

En su versión clásica, la termodinámica es la rama de la Física que estudia a nivel macroscópico los fenómenos relacionados con el calor y la temperatura, limitándose al estudio de los estados de equilibrio y a las transformaciones que pueden tratarse como una serie continua de estados de equilibrio. Abarca todos los fenómenos inherentes a las transformaciones energéticas y a sus efectos sobre los estados de la materia. Los sistemas que estudia son determinados por propiedades físicas en función de variables que son observables y medibles, pero que son consecuencia de una estructura atómica

¹trad. Ahora, querer y poder son dos cosas diferentes. Una es deseo y otra es el medio. Como yo quiero agarrarte, y verte, y sentirte en mis sueños. Pero esto no es posible, algo simplemente no me lo permite.

y molecular que obvia. Al no realizar hipótesis sobre la naturaleza microscópica de los sistemas, tiene una aplicabilidad muy general, pero que evidentemente tiene unas limitaciones que derivan de esta. Un ejemplo de ello es que es capaz de predecir el cambio de energía de un sistema cuando sufre un determinado proceso pero es incapaz de establecer un valor de la energía en los estados inicial y final.

La termodinámica química confina el concepto de termodinámica al estudio de la interrelación entre calor y trabajo en reacciones químicas o cambios de estado siempre bajo el marco de los principios. El estudio que se lleva a cabo en esta tesis doctoral precisamente se enmarca en esta categoría ya que los procesos que se van a tratar son cambios de fase, disoluciones o reacciones químicas. Este capítulo no pretende ser un curso de termodinámica química, solo dar las claves para entender los desarrollos realizados en la tesis. Algunas referencias útiles para profundizar en los conceptos aquí tratados son: Aguilar (2001), Rodríguez et al. (2000), Incropera et al. (2012), Çengel y Ghajar (2011), Thome (2004) y Collier y Thome (1994).

3.2. Definiciones fundamentales

Antes de pasar a materia, es importante entender el sentido preciso de algunos de los términos que son usados en este capítulo.

Se denomina *sistema* a una porción de espacio y a su contenido que será el objeto del estudio. Este se encuentra delimitado por una superficie llamada *pared*, que siendo real o imaginaria, lo separa del resto del universo o *medio* y debe ser lo suficientemente grande como para que se puedan definir unas propiedades macroscópicas en él. La naturaleza de la pared da lugar a una clasificación de sistemas en aislados, cerrados o abiertos. Un sistema es *aislado* si no puede intercambiar ni materia ni energía al medio, es *cerrado* si puede intercambiar energía pero no materia y *abierto* si puede intercambiar ambas.

Los sistemas también pueden clasificarse según su naturaleza en *homogéneos* y *heterogéneos*. En los primeros, sus propiedades físicas o químicas son siempre idénticas en cualquier punto del sistema. En los segundos, los sistemas están formados por subsistemas homogéneos de propiedades físicas distintas.

Los sistemas son descritos a través de los valores que poseen determinadas propiedades macroscópicas llamadas *variables* termodinámicas, y en general, pueden ser medidas. No todas ellas son independientes y solo con unas pocas se puede especificar completamente el sistema, el resto pueden ser calculadas con estas pocas que son llamadas *variables de estado*. En termodinámica, aunque las variables solo puedan entenderse desde un punto de vista macroscópico, es común su uso en forma diferencial. Esta no trata nunca cambios infinitesimales, pero sí, cambios muy pequeños lo suficientemente grandes para que los átomos o moléculas que lo definen formen un sistema.

Las variables termodinámicas pueden clasificarse entre variables *extensivas* e *intensivas*. Se denomina *variable extensiva* a aquella cuyo valor depende de las dimensiones del sistema y con frecuencia son proporcionales a la cantidad de sustancia considerada, e.g. masa, volumen, número de moles, etc. Las que son independientes de la cantidad de

materia son llamadas *variables intensivas*, e.g. presión, temperatura, potencial químico, etc. En ocasiones conviene usar las variables extensivas por unidad de masa o número de moles denominadas *variables específicas*. Las variables específicas son consideradas propiedades intensivas. Para cada variable intensiva existe siempre una *variable adjunta* extensiva cuya multiplicación es un flujo de energía.

El *estado* de un sistema está definido cuando todas sus variables termodinámicas tienen valores fijos. Toda función que puede expresarse con ayuda de las variables de estado se denomina *función de estado*. Quedan incluidas en el grupo de funciones de estado aquellas variables termodinámicas que no son variables de estado. La variación experimentada por una función de estado que conecta dos estados específicos es independiente del proceso y queda perfectamente definida por los estados inicial y final. La diferencial de una función de estado es una diferencial exacta. No son funciones de estado aquellas magnitudes que no cumplen esto, como el calor y el trabajo.

El *equilibrio* es aquel estado al cual tiende espontáneamente el sistema, e implica que sus variables termodinámicas tomen un valor constante durante un periodo de tiempo. El *equilibrio termodinámico* impone que se dé simultáneamente un *equilibrio térmico, mecánico y químico*. Esta definición exige que el sistema sea homogéneo. Se dice que un sistema heterogéneo está en equilibrio, si en cada una de sus fases las variables son constantes independientemente de la diferencia entre fases. Cuando un sistema homogéneo está en equilibrio termodinámico, entre sus variables de estado existe una relación que es su *ecuación de estado*.

La termodinámica clásica solo estudia relaciones entre las variables que describen sistemas en equilibrio, por tanto, es una ciencia estática ya que en ella el tiempo no interviene como variable. Los procesos tratados son habitualmente transiciones que van de un estado de equilibrio inicial a otro final y donde las transformaciones que generalmente son *reversibles*, se pueden tratar como una sucesión de estados de equilibrio entre ambos estados.

3.3. Principios de la termodinámica

3.3.1. Principio cero

El principio cero de la termodinámica puede enunciarse del siguiente modo (Aguilar, 2001):

1. “Dos sistemas aislados, A y B, puestos en contacto prolongado, a través de una pared diatérmica, alcanzan el equilibrio térmico.”
2. “Si A y B separadamente están en equilibrio con otro sistema, C, están también en equilibrio térmico entre sí (propiedad transitiva).”

Este principio permite definir la temperatura como aquella propiedad común a todos estos sistemas.

3.3.2. Primer principio

El *trabajo* se define como el producto escalar de una fuerza por la distancia a lo largo de la cual actúa. El *trabajo externo* es la energía que se transfiere entre sistema y medio cuando entre ambos se ejerce una fuerza. Se denomina *trabajo interno* al realizado por una parte del sistema sobre otra, este tipo de trabajo no es objeto de la termodinámica.

En el caso más simple, el trabajo realizado por un sistema consiste en el desplazamiento de su pared contra una presión exterior uniforme. Si se considera positivo el trabajo realizado por el sistema, este viene dado por la siguiente expresión:

$$W = \int_1^2 \delta W = \int_1^2 p dV, \quad (3.1)$$

donde la transformación se efectúa de un modo reversible y la presión en el exterior y en el interior son iguales (equilibrio mecánico).

La transformación entre los dos estados extremos, 1 y 2, depende del camino recorrido para llegar a ellos. La expresión δW indica que es una diferencial inexacta porque el trabajo es una forma de energía que aparece en el proceso y no una magnitud contenida en el sistema.

El primer principio se enuncia así (Aguilar, 2001):

“El trabajo total es el mismo en todos los procesos adiabáticos que corresponden a los mismos estados inicial y final del sistema.”

Este enunciado define una nueva propiedad de los sistemas termodinámicos: la energía interna, U . Su diferencia entre los estados inicial y final es igual al trabajo realizado por un sistema a lo largo de cualquier proceso adiabático:

$$-W_{ad} = U_2 - U_1. \quad (3.2)$$

Los procesos reales normalmente no son adiabáticos. Si la pared del sistema es diatérmica, el calor, Q , es una medida de la cuantía de la adiabaticidad de la transformación y es motivada por una diferencia de temperaturas entre el sistema y sus alrededores. De acuerdo con el principio de conservación de la energía, si un proceso realiza un trabajo no adiabático:

$$W - W_{ad} = Q. \quad (3.3)$$

Esta expresión permite medir el calor desde un punto de vista operacional. Si se sustituye el trabajo adiabático por el obtenido en la Eq. 3.2 se obtiene la expresión más corriente del primer principio:

$$Q - W = U_2 - U_1. \quad (3.4)$$

Infinitesimalmente esta expresión debe escribirse de esta forma:

$$\delta Q - \delta W = dU, \quad (3.5)$$

donde δQ y δW son diferenciales inexactas pero la diferencia entre ambas es una diferencial exacta. La energía interna es una función de estado.

3.3.3. Segundo principio

Si el primer principio establece un balance energético, el segundo principio habla del sentido que debe tener. Existen numerosos enunciados del segundo principio. Clausius lo enunció como (Aguilar, 2001):

“No es posible ningún proceso espontáneo cuyo único resultado sea el paso de calor de un recinto a otro de mayor temperatura.”

El más extendido es el enunciado de Kelvin-Planck:

“No es posible ninguna transformación termodinámica cuyo único resultado sea la absorción de calor de un solo foco y de la producción de una cantidad equivalente de trabajo”

Para un ciclo cerrado, matemáticamente puede asegurarse que:

$$\oint \frac{\delta Q}{T} \leq 0. \quad (3.6)$$

Para procesos reversibles, esto es, la igualdad en la Eq. 3.6, se puede definir una nueva función de estado llamada entropía, S .

$$\frac{\delta Q_{rev}}{T} = dS. \quad (3.7)$$

Esta función de estado da una medida del grado de desorden de sus moléculas. Si los procesos son considerados desde el punto de vista del orden-desorden entonces puede afirmarse que existe una tendencia del universo en su conjunto a evolucionar hacia un estado de mayor desorden.

3.3.4. Tercer principio

El tercer principio establece la inaccesibilidad del cero absoluto de temperaturas en un número finito de operaciones. Con él, se pueden comprender las propiedades termodinámicas en el cero y en sus alrededores. El enunciado de Planck además permite poner un valor de referencia a la entropía (Aguilar, 2001):

“La entropía de toda sustancia sólida o líquida en estado de pureza y en equilibrio interno es nula en el equilibrio.”

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = 0. \quad (3.8)$$

Este principio facilita establecer un valor de referencia para muchas de las funciones termodinámicas que se verán en la §3.4. En otras, como la entalpía o la energía interna se suele establecer como referencia 0, en algún punto característico de la sustancia que se analiza, e.g. el punto triple en el agua, o fijando una presión y una temperatura, e.g. condiciones nominales.

3.4. Funciones termodinámicas

3.4.1. Potenciales termodinámicos

Existen una serie de funciones termodinámicas que se definen a partir de la energía interna y que son de una gran importancia. Todas ellas son variables extensivas con dimensión de energía y describen la cantidad de energía disponible en el sistema sujeta a ciertas restricciones. Sirven para predecir bajo las restricciones impuestas qué transiciones termodinámicas serán espontáneas y cuáles necesitarán un aporte energético. Conocida una, es posible calcular el resto.

$$\text{Entalpía:} \quad H = U + pV. \quad (3.9)$$

$$\text{Función de Helmholtz:} \quad F = U - TS. \quad (3.10)$$

$$\text{Función de Gibbs:} \quad G = H - TS. \quad (3.11)$$

El significado físico de estas funciones se hace patente en su forma diferencial. Para un sistema cerrado cuyo único trabajo es el que ejerce el medio sobre su pared obtenemos las siguientes relaciones:

$$dU = TdS - pdV, \quad (3.12)$$

$$dH = TdS + Vdp, \quad (3.13)$$

$$dF = -SdT - pdV, \quad (3.14)$$

$$dG = -SdT + Vdp. \quad (3.15)$$

La Eq. 3.12 es también llamada ecuación fundamental de la termodinámica porque resume el primer y el segundo principio de la termodinámica. Las otras tres ecuaciones contienen la misma información que la primera expresada a través de parejas de variables independientes diferentes.

3.4.2. Potencial químico

Hasta ahora, la mayoría de las expresiones están referidas a sistemas cerrados que solo intercambian calor y trabajo con los alrededores, y por tanto son de composición constante. El contenido energético de un sistema no solo se modifica en los intercambios de energía, sino también cuando su masa se modifica. Si se modifica un sistema de un solo componente infinitesimalmente en el número de moles entonces la ecuación fundamental (v. Eq. 3.12) se expresa así:

$$dU = TdS - pdV + \mu dn, \quad (3.16)$$

donde $\mu = (\partial U / \partial n)_{S,V}$ es una magnitud intensiva que se llama potencial químico. Puede definirse como la variación de la energía interna por mol añadida a un sistema en

un proceso a S y V constantes. Evidentemente, esto también puede aplicarse al resto de potenciales termodinámicos:

$$dH = TdS + Vdp + \mu dn, \quad (3.17)$$

$$dF = -SdT - pdV + \mu dn, \quad (3.18)$$

$$dG = -SdT + Vdp + \mu dn. \quad (3.19)$$

Y calcularse en cualquiera de sus formas:

$$\mu = \left(\frac{\partial U}{\partial n} \right)_{S,V} = \left(\frac{\partial H}{\partial n} \right)_{S,p} = \left(\frac{\partial F}{\partial n} \right)_{T,V} = \left(\frac{\partial G}{\partial n} \right)_{T,p}. \quad (3.20)$$

De estas expresiones solo la última coincide con la definición de una función molar parcial ya que esta define a T y p constantes. Esto se debe a que no está muy claro cuál es la variación de una sustancia a V y S constantes porque inevitablemente toda sustancia aporta su propio volumen y entropía. Una mejor definición de potencial químico sería usando la función de Gibbs: es el cambio de la energía libre que se produce en un sistema por mol de componente añadido en un proceso a T y p constantes.

Para un sistema multicomponente, se puede calcular G como:

$$G = \sum n_i \left(\frac{\partial G}{\partial n} \right)_{T,p} = \sum n_i g_i^\circ = \sum n_i \mu_i. \quad (3.21)$$

Con definiciones dadas por las Eq. 3.9 y 3.11 se pueden obtener las expresiones diferenciales de los potenciales para sistemas multicomponente:

$$dU = TdS - pdV + \sum \mu_i dn_i, \quad (3.22)$$

$$dH = TdS + Vdp + \sum \mu_i dn_i, \quad (3.23)$$

$$dF = -SdT - pdV + \sum \mu_i dn_i, \quad (3.24)$$

$$dG = -SdT + Vdp + \sum \mu_i dn_i. \quad (3.25)$$

3.4.3. Balances de masa y energía en sistemas abiertos

No todos los sistemas son estáticos. Existen multitud de procesos físicos y químicos donde el sistema es atravesado por un flujo, y en ellos, las variaciones en la energía cinética y potencial gravitatoria en muchos casos no son despreciables.

Cuando el sistema está compuesto por un fluido, la región del espacio que lo delimita se llama *volumen de control*. Si un flujo de materia penetra (\dot{m}_{in}) o abandona (\dot{m}_{out}) ese volumen modifica el sistema, por tanto, son necesarios un balance de masa y energía para tener caracterizado el sistema. Estos balances no son ni más ni menos que leyes de conservación locales, y a menudo, son expresados en forma de ecuaciones de continuidad.

La masa es una cantidad conservada en procesos en los que no hay reacciones nucleares. El balance másico expresa matemáticamente este hecho. Se toma la convención de que los flujos de entrada son positivos y los de salida negativos.

$$\dot{m} = \sum_i \dot{m}_{in,i} - \sum_j \dot{m}_{out,j}. \quad (3.26)$$

Si se integra esta ecuación con el tiempo, se puede obtener la masa del sistema, m , en cada instante a partir del instante inicial t_0 .

$$m = \int_{t_0}^t (\sum_i \dot{m}_{in,i} - \sum_j \dot{m}_{out,j}) dt. \quad (3.27)$$

La energía es una cantidad conservada en todos los procesos. El primer principio explicado en la §3.3.2 ya lo revelaba para sistemas cerrados. Esto es igualmente válido para sistemas abiertos. En ellos hay que tener en cuenta también la energía que es transportada por el flujo, esto es su energía interna, cinética y potencial, y el trabajo que realiza.

$$\begin{aligned} \dot{U} = & \sum_i \dot{m}_{in,i} (u_{in,i} + v_{in,i}^2 + gz_{in,i} + p_{in,i} v_{in,i}) \\ & - \sum_j \dot{m}_{out,j} (u_{out,j} + v_{out,j}^2 + gz_{out,j} + p_{out,j} v_{out,j}) + \dot{Q} - \dot{W}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Recordando la definición de entalpía dada por la Eq. 3.9:

$$\begin{aligned} \dot{U} = & \sum_i \dot{m}_{in,i} (h_{in,i} + v_{in,i}^2 + gz_{in,i}) \\ & - \sum_j \dot{m}_{out,j} (h_{out,j} + v_{out,j}^2 + gz_{out,j}) + \dot{Q} - \dot{W}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

En los procesos termoquímicos que se estudian en esta tesis, las variaciones en las velocidades de los flujos y la diferencia de altura son despreciables si se comparan con el aporte calórico de los mismos. Por tanto, los términos cinético y potencial de los flujos son despreciados. Por otro lado, si el trabajo del sistema se define como el desplazamiento de su pared contra una presión exterior uniforme (trabajo de expansión), parece razonable pensar que el flujo de trabajo sea la velocidad de este desplazamiento contra una presión, entonces:

$$\dot{U} = \sum_i \dot{m}_{in,i} h_{in,i} - \sum_j \dot{m}_{out,j} h_{out,j} + \dot{Q} - p\dot{V}. \quad (3.30)$$

3.4.3.1. Expresión entálpica del balance energético

El principal problema a la hora de usar la Eq. 3.30 es que resulta complicado identificar cuáles deben ser las variables de estado que van a describir el sistema. No existe

ninguna regla que obligue a elegir una u otra, salvo la de escoger aquella que minimize su número quedando completamente caracterizado el sistema. Entre los procesos termoquímicos que se estudian en esta tesis se encuentran los cambios de fase (de primer orden), y este hecho limita el número de variables que pueden serlo. En la §3.6, se demuestra que presión, temperatura y potencial químico son condiciones de equilibrio en cambios de fase. Sin embargo, la mayoría de las propiedades termodinámicas de las sustancias que se pueden encontrar en la literatura están definidas para presión y temperatura (y fracción másica para sistemas multicompuesto) ya que son variables fácilmente medibles.

En esta tesis, la elección de variables de estado más frecuente es la de presión y entalpía específica (y fracción másica para sistemas multicompuesto). Si atendemos a lo explicado en la §2.3 las variables de estado de las Eq. 3.26 y 3.30 serían masa, energía interna y volumen ya que son las variables que deben ser integradas. Para facilitar al entorno de simulación la elección de las variables de estado conviene expresar dichas ecuaciones explícitamente en términos de las variables de estado.

La derivada de la energía interna en términos de entalpía es:

$$\dot{U} = \frac{d}{dt}(H - pV) = \dot{H} - p\dot{V} - V\dot{p}. \quad (3.31)$$

Sustituyendo la expresión anterior en la Eq. 3.30:

$$\dot{H} = \sum_i \dot{m}_{in,i} h_{in,i} - \sum_j \dot{m}_{out,j} h_{out,j} + \dot{Q} + V\dot{p}. \quad (3.32)$$

La expresión entálpica del balance energético en términos de masa es:

$$m\dot{h} + \dot{m}h = \sum_i \dot{m}_{in,i} h_{in,i} - \sum_j \dot{m}_{out,j} h_{out,j} + \dot{Q} + \frac{m}{\rho}\dot{p}. \quad (3.33)$$

3.4.3.2. Principio de Bernoulli

Un caso práctico del balance de energías en un fluido es el que observó Bernoulli en 1738. La energía que posee el fluido ideal (sin viscosidad ni rozamiento) en régimen de circulación por un conducto cerrado es constante a lo largo de toda su línea de corriente. Esta es la base de la hidrostática. La suma de todas las formas de energía mecánica del fluido a lo largo de una línea de corriente es la misma en dicha línea:

$$p + \rho g z + \frac{\rho v^2}{2} = \text{constante}. \quad (3.34)$$

Esta ecuación es aplicable a fluidos no viscosos e incompresibles en los que no existe aportación de trabajo exterior. También es aplicable a fluidos compresibles (gases) cuando se mueven a bajas velocidades, esto es, un bajo número de Mach.

Resulta muy útil cuando se desea saber cuál es el caudal que circula entre dos depósitos que se encuentran a diferentes presiones unidos por un orificio. Si los dos puntos

de la línea de corriente se encuentran en la misma altura y uno está dentro de uno de los depósitos entonces la velocidad de salida del fluido se puede calcular con la siguiente ecuación:

$$v_{12} = [2(p_1 - p_2)\rho^{-1}]^{1/2}. \quad (3.35)$$

El flujo másico de salida será entonces:

$$\dot{m}_{12} = C_d A_s \rho v_{12}, \quad (3.36)$$

donde C_d es el coeficiente de descarga (que refleja la relación entre flujos reales y teóricos) y A_s el área del orificio de salida.

La expresión dada por la Eq. 3.36 podría servir para calcular el caudal másico de una válvula, donde el área varía en función de la apertura de la válvula. Cuando la válvula trabaja en un entorno cercano a un punto de operación, es habitual linealizar la caída de presión de la anterior expresión dando como resultado una más sencilla:

$$\dot{m}_{12} = \frac{\dot{m}_{nom}}{\Delta p_{nom}} y \Delta p. \quad (3.37)$$

En ella, se calcula el flujo másico de salida en función de los valores nominales del caudal y de la diferencia de presiones y la apertura, y , de la válvula.

3.4.4. Ecuación de estado

Una ecuación de estado es una relación matemática entre variables de estado que confina los estados termodinámicos a los únicos posibles, es decir, aquellos que son alcanzables por esa sustancia en ese estado de agregación. A pesar del esfuerzo de los investigadores, hasta ahora no se ha conseguido encontrar una ecuación capaz de predecir con precisión las propiedades de las sustancias bajo todas las condiciones. Si se limita su uso al más extendido, el de predecir el comportamiento de los gases, entonces existen numerosas expresiones capaces de reproducir parcialmente su comportamiento.

La expresión más sencilla es la de los gases ideales. En ella se desprecia el volumen ocupado por la molécula y las fuerzas de atracción-repulsión entre moléculas. Puede deducirse de las leyes experimentales, como las de Boyle y de Gay-Lussac (Aguilar, 2001), y su expresión más habitual es:

$$pV = nRT, \quad (3.38)$$

donde R es la constante de los gases ideales. Esta ecuación, no varía de una sustancia a otra, pero lamentablemente solo es válida para gases reales a bajas presiones o altas temperaturas.

La ley de Joule, también experimental, da una descripción energética de un gas ideal. La evidencia experimental de la expansión adiabática de un gas en el vacío demostró que la energía interna de un gas ideal es una función exclusiva de su temperatura. Es una consecuencia de haber despreciado las fuerzas intermoleculares en los gases. Si

estas son nulas, no se requiere energía para separar las moléculas, y por tanto, solo su energía cinética puede influir sobre la energía interna.

Es habitual definir las derivadas parciales de la energía interna y la entalpía respecto a la temperatura como las capacidades caloríficas a volumen y presión constantes:

$$C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_v, \quad C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p. \quad (3.39)$$

Para los gases ideales, estas derivadas parciales se convierten en totales, y por tanto:

$$U_2 - U_1 = \int_1^2 C_v dT, \quad H_2 - H_1 = \int_1^2 C_p dT. \quad (3.40)$$

Cuando un gas, además de cumplir la Eq. 3.38 y la ley de Joule, posee calor específico constante se dice que es un gas perfecto. Su energía interna y su entalpía se pueden calcular como se detalla a continuación:

$$U_2 - U_1 = C_v(T_2 - T_1), \quad H_2 - H_1 = C_p(T_2 - T_1). \quad (3.41)$$

En un gas ideal, los calores específicos están relacionados por la llamada ley de Mayer. Esta resulta de derivar con respecto al tiempo la entalpía de un gas ideal:

$$H = U + pV = U + nRT, \quad (3.42)$$

$$\dot{H} = C_p = C_v + nR. \quad (3.43)$$

El coeficiente de dilatación adiabática, γ , se define como el cociente entre los calores específicos:

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v}. \quad (3.44)$$

Entonces, los calores específicos de los gases ideales pueden calcularse en función de un solo coeficiente como:

$$C_v = \frac{nR}{\gamma - 1}, \quad C_p = \frac{\gamma nR}{\gamma - 1}. \quad (3.45)$$

Existe una relación entre el coeficiente de dilatación adiabática de los gases ideales con los grados de libertad. Así pues, se puede asumir que para gases monoatómicos $\gamma = 5/3$ y para gases diatómicos $\gamma = 7/5$.

Si se tiene una mezcla de gases ideales inertes entonces podría aplicarse:

$$pV = \sum n_i RT. \quad (3.46)$$

Entonces, se puede expresar la presión como:

$$p = \sum \frac{n_i RT}{V} = \sum p_i, \quad (3.47)$$

donde se define p_i como presión parcial de un gas. Esta es la conclusión que se llega en la ley de Dalton (Aguilar, 2001): “La presión total de un gas ideal es igual a la suma de las presiones parciales que cada gas ejercería si estuviera por sí solo ocupando el volumen total de la mezcla.”

La energía interna de una mezcla de gases ideales es igual a la suma de las energías internas iniciales de los gases. Esto es:

$$U = \sum n_i u_i^*, \quad (3.48)$$

donde u_i^* es la energía interna específica molar de cada especie. Esto es igualmente válido para las entalpías:

$$H = U + pV = \sum n_i (u_i^* + RT) = \sum n_i h_i^*. \quad (3.49)$$

En una transformación isoterma de gas ideal, se cumple que:

$$dG = -SdT + Vdp = Vdp = \frac{nRT}{p} dp. \quad (3.50)$$

Integrando entre dos estados, se obtiene:

$$G_2 - G_1 = nRT \ln \frac{p_2}{p_1}. \quad (3.51)$$

Si el estado inicial es un estado de referencia para una presión con valor 1:

$$G = G^\circ + nRT \ln p. \quad (3.52)$$

Si se trata de una mezcla de gases:

$$G_i = G_i^\circ + n_i RT \ln p_i. \quad (3.53)$$

Identificando el potencial químico μ con G/n , se obtiene la expresión útil para el potencial químico de un gas ideal:

$$\mu_i = \mu_i^\circ + RT \ln p_i. \quad (3.54)$$

Cuando los gases reales se alejan de las condiciones de idealidad, la Eq. 3.38 deja de predecir el comportamiento de los gases. No existen dos gases reales que tengan la misma conducta y ello debe reflejarse en la ecuación de estado.

Van der Waals en 1873 dedujo la siguiente expresión basándose en consideraciones cinéticas que corregían las carencias de la ecuación de los gases ideales:

$$\left(p + \frac{a_w n^2}{V^2} \right) (V - nb_w) = nRT, \quad (3.55)$$

donde a_w y b_w son dos constantes características dependientes de la sustancia. En ella, las moléculas son tratadas como partículas con volumen, no como puntos en el espacio, por

ello al volumen del gas V se le resta el volumen de las moléculas nb_w . El otro término de la corrección trata las fuerzas de atracción de las moléculas. Toda molécula situada junto a la pared del recinto tiene una fuerza resultante neta que la empuja en dirección opuesta proporcional a n/V . Por otra parte, el número de moléculas que chocan con la pared en un instante determinado es n/V . Por tanto, la presión que actúa sobre el gas es la presión cinética menos la presión cohesiva molecular.

Actualmente existen otras aproximaciones a la ecuación de estado que ajustan mejor a los gases reales que la de Van der Waals y con un coste computacional parecido. Sin embargo, en la mayoría de las situaciones que se tratan en esta tesis las presiones pueden considerarse bajas (<2 atm) y la ecuación de los gases ideales se puede utilizar sin perder demasiada precisión.

3.4.5. Termodinámica de disoluciones

Una disolución es una mezcla homogénea de dos o más componentes que constituyen una fase única (Rodríguez et al., 2000). Estas pueden pertenecer a cualquier estado de agregación de la materia, aunque habitualmente se suelen identificar con las de estado líquido. Muchas de las conclusiones obtenidas con estas últimas pueden extrapolarse a cualquier estado.

Las disoluciones líquidas pueden formarse al disolver líquidos, sólidos o gases en un líquido. El componente mayoritario se llama disolvente y los minoritarios solutos, aunque en la práctica no existe ninguna diferencia termodinámica entre ambos. Los sólidos (y los gases) no se disuelven de una forma ilimitada en líquido. A una temperatura y presión dadas se alcanza una saturación en la concentración, estableciéndose un equilibrio sólido-líquido (o gas-líquido). En los procesos termoquímicos, alcanzar esta saturación suele ser perjudicial para los instrumentos si estos no están preparados para ello. Por ejemplo, la formación de cristales en bombas de calor provoca que el fluido adquiera una consistencia de agua-nieve y bloquee el sistema de tuberías. Si no se disuelve rápidamente el daño es irreparable (Wang et al., 2011).

La presencia de cada uno de los componentes de la disolución afecta a las propiedades termodinámicas del resto. Por ejemplo, si mezclamos 1 litro de agua con 1 litro de alcohol no obtenemos 2 litros de la mezcla sino 1,93 litros. La suma de los volúmenes constituyentes no es el volumen total de la mezcla.

$$V \neq n_1 v_1^* + n_2 v_2^* + \dots \quad (3.56)$$

Como el volumen es una función homogénea de grado uno respecto al número de moles (todas las propiedades termodinámicas extensivas lo son), la suma de los volúmenes molares parciales por el número de moles es el volumen total de la mezcla al igual que pasaba con la función de Gibbs en la §3.4.2:

$$V = n_1 \left(\frac{\partial V}{\partial n_1} \right)_{T,P,n_i \neq n_1} + n_2 \left(\frac{\partial V}{\partial n_2} \right)_{T,P,n_i \neq n_2} + \dots = n_1 v_1^\diamond + n_2 v_2^\diamond + \dots \quad (3.57)$$

Se definen las magnitudes de exceso o de mezcla como la resta entre la suma de propiedades molares parciales y las suma de las propiedades puras. Por ejemplo, el volumen de exceso sería:

$$\Delta V^M = \sum n_i v_i^\diamond - \sum n_i v_i. \quad (3.58)$$

De acuerdo a la regla de las fases (v. §3.6), se necesita una variable de estado extra por cada soluto que tenga la disolución. Esta variable de estado suele ser una medida de composición. Entre ellas las más comunes son la fracción másica, la fracción molar y la concentración (másica y molar). La fracción másica, w_i , o fracción molar, x_i , se definen como el ratio de masa o moles de una determinada especie sobre el total:

$$w_i = \frac{m_i}{m}, \quad x_i = \frac{n_i}{n}. \quad (3.59)$$

Las concentraciones se definen como el ratio de masa o moles de una determinada especie sobre el volumen total de la mezcla:

$$C_{w,i} = \frac{m_i}{V}, \quad C_{x,i} = \frac{n_i}{V}. \quad (3.60)$$

Los moles y la masa se relacionan a través del peso molecular.

$$m = n \cdot M, \quad \sum m_i = \sum n_i \cdot M_i. \quad (3.61)$$

Estas relaciones permiten hacer cambios de fracciones másicas con fracciones molares y viceversa.

Una disolución ideal es aquella que cumple la ley de Raoult (Aguilar, 2001): “*La presión parcial de vapor de cualquier componente de la disolución es proporcional a la fracción molar de este componente en una disolución*”.

Si llamamos p_i^p a la presión de vapor del elemento i puro, entonces se cumple:

$$p_1 = x_1 p_1^p. \quad (3.62)$$

En un sistema binario de dos componentes:

$$x_1 = 1 - x_2, \quad (3.63)$$

se cumple que:

$$p = p_1 + p_2 = (1 - x_2)p_1^p + x_2 p_2^p = p_1^p + (p_2^p - p_1^p)x_2, \quad (3.64)$$

donde las presiones p , p_1 y p_2 son funciones lineales con respecto a la fracción molar.

Las disoluciones reales se apartan de este comportamiento lineal como muestra la Fig. 3.1. Cuando la fracción del disolvente tiende a la unidad, la presión de vapor real se acerca asintóticamente a la ley de Raoult. Cuando el soluto es un sólido, e.g. sal disuelta en agua, la descompensación entre las presiones de vapor del soluto y del disolvente puede ser muy grande. En esos casos, se puede considerar que la fase vapor está compuesta exclusivamente del disolvente ya que las trazas de soluto son despreciables.

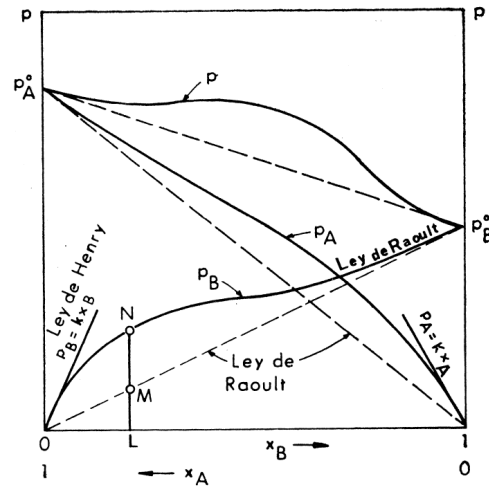


Figura 3.1: Disolución real (Aguilar, 2001).

A pesar de los importantes avances que se han hecho para predecir las propiedades termodinámicas basadas en métodos teóricos de sustancias puras y de la mezcla, lo cierto es que las ecuaciones que mejor ajustan siguen siendo las correlaciones basadas en datos experimentales, y son estas, las que se suelen emplear en el desarrollo de los modelos.

3.5. Transferencia de calor

Siempre que existe una diferencia de temperaturas en un sistema, se produce un flujo de calor de la parte caliente a la fría hasta igualarlas, cumpliendo el primer y el segundo principio. La velocidad con la que se transmite este calor es el objeto de estudio de esta sección. Se clasifica la transmisión del calor en tres mecanismos básicos: conducción, convección y radiación.

3.5.1. Conducción

La conducción es un mecanismo de transmisión de calor basado en el contacto sin intercambio de materia. Es explicado a escala microscópica como el intercambio de energía entre las partículas del sistema ya sean moléculas, átomos o electrones. En un fluido se debe principalmente a colisiones aleatorias de las moléculas; en un sólido metálico depende del intercambio de electrones libres y en un sólido no metálico del intercambio de los modos de vibración de sus partículas. La propiedad física (macroscópica) que determina la capacidad de un cierto material para conducir el calor es la conductividad térmica, k , y su valor suele ser variable en función de la temperatura a la que se encuentra la sustancia.

La ley de Fourier, que está basada en la observación empírica, establece el flujo de calor estacionario y unidimensional que atraviesa una longitud, l , a través de una superficie, A_s , como:

$$\dot{Q} = kA_s \frac{T_1 - T_2}{l}. \quad (3.65)$$

3.5.2. Convección

La convección es un mecanismo de transmisión de calor que se da entre un medio, ya sea sólido, líquido o gaseoso, y un fluido. Está ligado a la conducción y a movimientos macroscópicos de masa que renuevan el fluido en contacto. Estos movimientos puede deberse a causas externas o a diferencias de densidades creadas por la diferencia de temperaturas existentes en la masa del fluido, por lo que se diferenciará entre convección forzada y convección natural. Las leyes que rigen la convección son muy complicadas ya que dependen de tantos factores que en la práctica hacen imposible establecerlas analíticamente salvo para casos muy concretos. Por ello, se suele recurrir a métodos experimentales.

Con la ley de enfriamiento de Newton se puede calcular el flujo de calor que absorbe o cede un fluido a través de una superficie A_s :

$$\dot{Q} = \alpha A_s (T_1 - T_2). \quad (3.66)$$

En esta expresión se reúne en un solo coeficiente, α , toda la información específica del proceso y depende de todos los factores de los que depende el mecanismo de transmisión. Habitualmente, el coeficiente de convección se puede calcular mediante las innumerables correlaciones empíricas que hay en la literatura ([Lienhard IV y Lienhard V, 2004](#); [VDI, 2010](#)).

El número de Nusselt, Nu , mide el aumento de la transmisión del calor desde una superficie por la que un fluido discurre comparada con la que se produciría solo por conducción. Este número adimensional se expresa como:

$$Nu = \frac{\alpha l_c}{k}, \quad (3.67)$$

donde l_c es una dimensión que caracteriza al sistema. Para fluidos que discurren en el interior de tuberías circulares esta longitud es el diámetro hidráulico interno, si el fluido discurre por fuera de la tubería entonces la longitud característica se calcula según ([Ribatski y Jacobi, 2005](#)):

$$l_c = \left(\frac{\eta^2}{g\rho^2} \right)^{1/3}, \quad (3.68)$$

que no depende de parámetros geométricos sino de propiedades termodinámicas como la viscosidad dinámica, η , y la densidad, ρ .

3.5.3. Radiación

Todo sistema que tiene temperatura emite energía en forma de ondas electromagnéticas a su entorno. Esta emisión se hace desde la superficie que delimita el cuerpo, es isotrópica y su intensidad depende fuertemente de su temperatura. La emisividad, ε , es la propiedad de la materia que cuantifica su facilidad para transferir energía por radiación y está referida respecto al cuerpo emisor perfecto, también llamado cuerpo negro. Aunque esta depende de la longitud de onda emitida, la potencia total emitida por una superficie a una temperatura, T , puede expresarse mediante la ley de Stefan-Boltzmann:

$$P = A_s \varepsilon \sigma_{sb} T^4, \quad (3.69)$$

donde σ_{sb} es la constante de Stefan-Boltzmann.

Además de emitida, la radiación puede ser absorbida, reflejada o transmitida. El intercambio de calor entre dos cuerpos a dos temperaturas distintas es un problema mucho más complejo pero se suele simplificar mediante la siguiente expresión:

$$\dot{Q} = A_s F_{12} \sigma_{sb} (T_1^4 - T_2^4), \quad (3.70)$$

donde F_{12} es el llamado factor de forma, que da una medida de qué parte de la radiación emitida por la superficie 1 es interceptada por la superficie 2.

La transferencia de calor por radiación suele ser despreciable a bajas temperaturas, pero su dependencia con la cuarta potencia de la temperatura la hace dominante para altas temperaturas.

3.5.4. Caso práctico: intercambiador de calor

Un intercambiador de calor es un dispositivo cuya función principal es transferir calor de un fluido a otro. Es un elemento fundamental en la industria y existe una gran variedad de ellos (Shah y Sekulic, 2003). Suele representarse como un tubo en el que por el interior circula un fluido y por el exterior otro. Los principales mecanismos de transferencia de calor que pueden observarse en él son (Spakovszky, 2014):

- Transferencia convectiva de calor entre el fluido y la cara interior del tubo.
- Transferencia conductiva de calor entre la cara interior y exterior del tubo.
- Transferencia convectiva de calor entre el otro fluido y la cara exterior del tubo.

Los intercambiadores de calor típicamente se clasifican de acuerdo a la disposición de su flujo y del tipo de construcción. La disposición de los flujos puede ser paralela, a contracorriente o transversal. La disposición a contracorriente es la más común ya que es la que obtiene una mayor eficiencia de intercambio.

En un intercambiador de calor con una disposición de flujo a contracorriente donde el fluido 1 cede la energía al fluido 2, y asumiendo que no hay cambio de fase, el balance de energías es:

$$\dot{Q} = \dot{m}_1 (h_{1,in} - h_{1,out}) = \dot{m}_2 (h_{2,out} - h_{2,in}). \quad (3.71)$$

Para una temperatura de operación concreta para cada uno de los fluidos y en un entorno lo suficientemente próximo a ellas, este balance de energía se puede aproximar de la siguiente forma:

$$\dot{Q} = \dot{m}_1 c_{p,1} (T_{1,in} - T_{1,out}) = \dot{m}_2 c_{p,2} (T_{2,out} - T_{2,in}). \quad (3.72)$$

Si se divide longitudinalmente el intercambiador, desde un punto de vista local el calor cedido por el fluido 1 en la longitud infinitesimal dx es:

$$\dot{Q}_x = -\dot{m}_1 c_{p,1} dT_1, \quad (3.73)$$

donde el signo negativo se debe a que la temperatura del fluido decrece en la medida en la que aumenta x . El calor recibido en ese infinitesimal por el fluido 2 es:

$$\dot{Q}_x = -\dot{m}_2 c_{p,2} dT_2, \quad (3.74)$$

donde el signo negativo, al igual que antes, se debe a que la temperatura del fluido decrece en la medida en la que aumenta x . El balance local, se determina por la siguiente expresión:

$$-\dot{m}_1 c_{p,1} dT_1 = -\dot{m}_2 c_{p,2} dT_2 = \dot{Q}_x = \dot{q} dA_s = \dot{q} 2\pi r dx, \quad (3.75)$$

donde se ha considerado un intercambiador compuesto por un tubo cuyo radio es r . Despejando los diferenciales de la temperatura:

$$dT_1 = -\frac{\dot{q} 2\pi r dx}{\dot{m}_1 c_{p,1}}, \quad dT_2 = -\frac{\dot{q} 2\pi r dx}{\dot{m}_2 c_{p,2}}, \quad (3.76)$$

y restándolos se obtiene:

$$d(T_1 - T_2) = d\Delta T = -\left(\frac{1}{\dot{m}_1 c_{p,1}} - \frac{1}{\dot{m}_2 c_{p,2}}\right) \dot{q} 2\pi r dx. \quad (3.77)$$

Como la transferencia de calor entre fluidos es convectiva y en el tubo conductiva, se puede calcular el flujo de calor por área como:

$$\dot{q} = \alpha_{he} \Delta T, \quad (3.78)$$

donde α_{he} es el coeficiente de transferencia global del intercambiador. Si se sustituye este \dot{q} en la Eq. 3.77 y se reordena la expresión:

$$\frac{d\Delta T}{\Delta T} = -\alpha_{he} 2\pi r \left(\frac{1}{\dot{m}_1 c_{p,1}} - \frac{1}{\dot{m}_2 c_{p,2}}\right) dx. \quad (3.79)$$

Integrando desde $x = 0$ a $x = l$:

$$\ln\left(\frac{T_{1,out} - T_{2,in}}{T_{1,in} - T_{2,out}}\right) = -\alpha_{he} 2\pi r l \left(\frac{1}{\dot{m}_1 c_{p,1}} - \frac{1}{\dot{m}_2 c_{p,2}}\right). \quad (3.80)$$

Si reordenamos esta expresión puede escribirse como

$$\left(\frac{T_{1,out} - T_{2,in}}{T_{1,in} - T_{2,out}} \right) = e^{-\theta_{he}}, \quad (3.81)$$

donde

$$\theta_{he} = \alpha_{he} A_s \left(\frac{1}{\dot{m}_1 c_{p,1}} - \frac{1}{\dot{m}_2 c_{p,2}} \right). \quad (3.82)$$

El sistema de ecuaciones formado por las Eq. 3.72 y 3.81, resuelve las temperaturas de salida del intercambiador con las temperaturas de entrada y viceversa. Este sistema es más común verlo expresado de la siguiente forma:

$$T_{2,out} - T_{2,in} = \frac{\dot{m}_1 c_{p,1}}{\dot{m}_2 c_{p,2}} (T_{1,in} - T_{1,out}), \quad (3.83)$$

$$T_{1,out} - T_{2,in} = (T_{1,in} - T_{2,out}) e^{\theta_{he}}. \quad (3.84)$$

Si se combinan las ecuaciones Eq. 3.72 y 3.80, se obtiene la expresión habitual para el calor transferido en el intercambiador:

$$\dot{Q} = \alpha_{he} A_s \frac{(T_{1,in} - T_{2,out}) - (T_{1,out} - T_{2,in})}{\ln \left(\frac{T_{1,in} - T_{2,out}}{T_{1,out} - T_{2,in}} \right)}. \quad (3.85)$$

3.6. Termodinámica de cambios de fase

Una *fase* es un sistema o subsistema que tiene propiedades físicas y composición química homogéneas, limitado, generalmente, por una superficie a través de la cual las propiedades físicas cambian bruscamente. En los compuestos puros, cada estado de agregación (sólido, líquido, gas o plasma) constituye una fase. Para sistemas multicomponente, además de los estados de agregación hay que tener en cuenta la composición del sistema. Se considerará una fase si los compuestos son perfectamente miscibles. Cada una de las variedades alotrópicas también constituye una fase.

Se denomina cambio de fase a la evolución de un sistema cuando pasa de una fase a otra. Si el sistema de un componente perfectamente aislado presenta dos fases y estas están en perfecto equilibrio, entonces cumpliendo con el segundo principio:

$$dS = dS_1 + dS_2 = 0, \quad (3.86)$$

donde dS_1 es la variación de la entropía experimentada por la fase 1 y dS_2 la correspondiente a la fase 2. Si calculamos esta variación con la ecuación fundamental, Eq. 3.16:

$$dS_1 = \frac{1}{T_1} dU_1 + \frac{p_1}{T_1} dV_1 - \frac{\mu_1}{T_1} dn_1, \quad (3.87)$$

$$dS_2 = \frac{1}{T_2} dU_2 + \frac{p_2}{T_2} dV_2 - \frac{\mu_2}{T_2} dn_2. \quad (3.88)$$

Imponiendo las restricciones:

$$dU_1 + dU_2 = 0, \quad (\text{Sistema aislado}) \quad (3.89)$$

$$dV_1 + dV_2 = 0, \quad (\text{Volumen total constante}) \quad (3.90)$$

$$dn_1 + dn_2 = 0. \quad (\text{Masa total constante}) \quad (3.91)$$

Se obtiene que:

$$dS = \underbrace{\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)}_{\text{interacciones térmicas}} dU_1 + \underbrace{\left(\frac{p_1}{T_1} - \frac{p_2}{T_2}\right)}_{\text{interacciones mecánicas}} dV_1 - \underbrace{\left(\frac{\mu_1}{T_1} - \frac{\mu_2}{T_2}\right)}_{\text{interacciones difusivas}} dn_1 = 0. \quad (3.92)$$

Dado que dU_1 , dV_1 y dn_1 pueden tomar cualquier valor, para que se cumpla de forma general la Eq. 3.92 se tienen que anular por separado cada uno de los coeficientes. Por tanto, en todo cambio de fase se cumple:

$$T_1 = T_2, \quad (3.93)$$

$$p_1 = p_2, \quad (3.94)$$

$$\mu_1 = \mu_2. \quad (3.95)$$

Que es equivalente a decir que en todo cambio de fase se alcanza el equilibrio térmico, mecánico y difusivo. Como se vio en la §3.4.2, decir que se conserva el potencial químico es igual a decir que los potenciales de Gibbs específicos en las dos fases son iguales. Estos mismos argumentos pueden generalizarse para más de dos fases.

El orden del cambio de fase se establece por la derivada de menor orden de la función de Gibbs que presenta una discontinuidad. Si la transición es de primer orden, entonces existe una discontinuidad entre las dos fases en la entropía específica y en el volumen específico ya que:

$$\left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_p = -s, \quad (3.96)$$

$$\left(\frac{\partial g}{\partial p}\right)_T = v. \quad (3.97)$$

La primera consecuencia de ello es que también existe una discontinuidad en la entalpía específica, que se llama calor latente, L . Como g debe ser igual en las dos fases y $g = h - Ts$, entonces:

$$T(s_1 - s_2) = h_2 - h_1 = L. \quad (3.98)$$

Físicamente se puede interpretar como la cantidad de energía que se requiere por masa para pasar de una fase a otra. El calor específico, definido por la Eq. 3.39, se hace infinito en la transición.

La segunda consecuencia es que la densidad, que es la inversa del volumen específico, también sufre una discontinuidad en el cambio de fase. Esto permite una completa separación de fases.

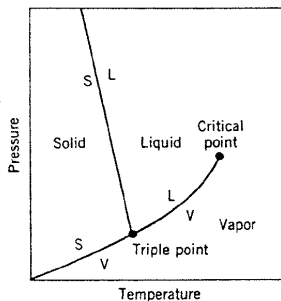


Figura 3.2: Diagrama p-T de las fases del agua (Kreith, 2000)

Son transiciones de orden uno todos los cambios de estado de agregación y las transformaciones alotrópicas. Las transiciones de orden superior, como pueden ser el paso de conductor a superconductor o de fluido a superfluido, quedan fuera del alcance de esta tesis.

La regla de las fases, enunciada por Gibbs, determina el grado de libertad de un sistema aislado en equilibrio (Aguilar, 2001):

“La suma del número de fases de un sistema en equilibrio y sus grados de libertad es igual al número de sus componentes, aumentando en el número de variables exteriores (p y T).”

Esta regla establece dos grados de libertad para un sistema en equilibrio de un solo componente y una fase, un grado si coexisten dos fases y ninguno si coexisten tres fases. En el diagrama de equilibrio del agua se puede observar esto (v. Fig. 3.2). Si el sistema tiene dos componentes, e.g. una disolución, la regla establece para el sistema tres grados de libertad para una fase, dos para dos fases y una para tres fases.

La regla es ambigua respecto a las propiedades termodinámicas que manifiestan una discontinuidad en el cambio de fase, ya que no pueden definirse en situaciones de coexistencia de fases. Una técnica habitual en el modelado de sistemas termodinámicos es definir las propiedades en estas situaciones como la media ponderada respecto a la fracción másica de sustancia de cada fase. Así pues, la propiedad se hace continua y la información que proporciona determina la masa relativa de sustancia que hay en cada fase.

En un cambio de fase hay una pérdida del grado de libertad del sistema, lo que implica que el estado del sistema pueda representarse con una variable de estado menos. Sin embargo, esta representación del estado es parcial ya que no da información del grado de coexistencia de las fases. Precisamente por el tipo de información que dan las variables discontinuas a las que se les puede aplicar la técnica anteriormente mencionada, i.e. entropía específica, volumen específico, entalpía específica, densidad..., son adecuadas para suplir esta carencia de información y deben ser escogidas como variables de estado del sistema en situaciones dinámicas de cambios de fase.

3.6.1. Conservación de la energía en un cambio de fase

La energía es una cantidad conservada en cualquier sistema, y por supuesto, también en un sistema de cambio de fase. La manipulación de la expresión del balance energético en este tipo de sistemas es especialmente útil para calcular la cantidad de materia que cambia de fase.

En un sistema abierto, el balance de masas para el CV (*Control volume*)² se puede expresar según la Eq. 3.26. Es interesante, limitar el CV en la frontera de una de las fases. Entonces, cuando se produce el cambio de fase, una cantidad de masa del sistema lo abandona, e.g. una ebullición donde el vapor abandona el recipiente donde está confinado el líquido. Destacando este hecho en el balance de masas se tiene que:

$$\dot{m} = \sum_i \dot{m}_{in,i} - \sum_j \dot{m}_{out,j} - \dot{m}_{pt}, \quad (3.99)$$

donde el flujo másico de cambio de fase, \dot{m}_{pt} , es otra salida más del sistema. El balance de energía (v. Eq. 3.33) para este caso particular puede expresarse así:

$$\dot{m}h + \dot{m}\dot{h} = \sum_i \dot{m}_{in,i}h_{in,i} - \sum_j \dot{m}_{out,j}h_{out,j} - \dot{m}_{pt}h_{sat2} + \dot{Q} + \frac{m}{\rho}\dot{p}, \quad (3.100)$$

donde se especifica que la entalpía con la que el flujo másico de cambio de fase abandona el CV es la de saturación del medio en la otra fase (la fase 2), h_{sat2} . Salvo algunas excepciones, para que se den condiciones de cambio de fase, la masa del sistema debe haber llegado a la saturación, esto es condiciones de coexistencia de fases. Aplicando esto en la Eq. 3.100:

$$\dot{m}h_{sat1} + \dot{m}\dot{h}_{sat1} = \sum_i \dot{m}_{in,i}h_{in,i} - \sum_j \dot{m}_{out,j}h_{out,j} - \dot{m}_{pt}h_{sat2} + \dot{Q} + \frac{m}{\rho}\dot{p}. \quad (3.101)$$

Si en esta expresión se sustituye \dot{m} por la obtenida con el balance de masas de la Eq. 3.99 se tiene que:

$$\begin{aligned} \sum_i \dot{m}_{in,i}h_{sat1} - \sum_j \dot{m}_{out,j}h_{sat1} - \dot{m}_{pt}h_{sat1} + \dot{m}\dot{h}_{sat1} = \\ = \sum_i \dot{m}_{in,i}h_{in,i} - \sum_j \dot{m}_{out,j}h_{out,j} - \dot{m}_{pt}h_{sat2} + \dot{Q} + \frac{m}{\rho}\dot{p}. \end{aligned} \quad (3.102)$$

Parece lógico suponer que si el sistema está a una determinada entalpía, las salidas del mismo que no sean las de cambio de fase sean a esta entalpía. Si se tiene en cuenta este hecho, se puede simplificar la expresión.

$$\sum_i \dot{m}_{in,i}h_{sat1} - \dot{m}_{pt}h_{sat1} + \dot{m}\dot{h}_{sat1} = \sum_i \dot{m}_{in,i}h_{in,i} - \dot{m}_{pt}h_{sat2} + \dot{Q} + \frac{m}{\rho}\dot{p}. \quad (3.103)$$

²Volumen de control.

Reordenando la ecuación es posible calcular el flujo másico de cambio de fase como:

$$\dot{m}_{pt} = \frac{1}{h_{sat2} - h_{sat1}} \left(\underbrace{\dot{Q}}_{\text{aporte exterior}} - \underbrace{\dot{m}h_{sat1}}_{\text{variación entálpica}} - \underbrace{\sum_i \dot{m}_{in,i}(h_{sat1} - h_{in,i})}_{\text{adecuación entradas}} + \underbrace{\frac{m}{\rho}\dot{p}}_{\text{trabajo expansión}} \right). \quad (3.104)$$

De esta expresión se pueden extraer varias conclusiones. El calor latente, $L = h_{sat2} - h_{sat1}$, es la energía necesaria para pasar una unidad de masa de una fase a otra (de 1 a 2). La energía disponible del sistema para llevar a cabo este cambio de fase tiene cuatro componentes. El primero es \dot{Q} , que es el flujo de calor que se le introduce al sistema con el fin de que se realice el proceso. Pero no todo este flujo de calor puede ser usado con este fin. A este flujo se le debe restar, por un lado, la energía que consume el sistema (segundo término) para mantenerse en condiciones de saturación, y por el otro, la energía necesaria para que las entradas lleguen a condiciones de saturación (tercer término). El cuarto término corresponde a la energía que se recupera de la pared del sistema cuando la presión varía.

La Eq. 3.104 es expresión de carácter general, ya sea para fluidos con una sola especie o varias especies. Una de las principales dificultades para resolver esta ecuación es el cálculo de la variación entálpica de saturación. El problema está en que la entalpía de saturación no es una variable de estado del sistema. Una práctica aconsejable para facilitar este cálculo al entorno de simulación es sustituir esta variación en función de las variables de estado. Para fluidos con un solo componente, la variable de estado habitual para calcularla es la presión y la variación puede calcularse como sigue:

$$\dot{h}_{sat1} = \frac{\partial h_{sat1}}{\partial p} \dot{p}. \quad (3.105)$$

Para fluidos con dos componentes, las variables de estado habituales para calcular la entalpía de saturación son la presión y la fracción másica. Su variación debe calcularse con la siguiente expresión:

$$\dot{h}_{sat1} = \frac{\partial h_{sat1}}{\partial p} \dot{p} + \frac{\partial h_{sat1}}{\partial w} \dot{w}. \quad (3.106)$$

Lo cierto, es que en la literatura difícilmente se encuentran expresiones de la entalpía de saturación para fluidos con dos componentes, y menos, que esta dependa de la presión y la fracción másica. Esta se suele calcular primero calculando la temperatura de saturación con la presión y fracción másica, después utilizando este valor en la expresión de la entalpía específica en función de la temperatura y la fracción másica. Por tanto, es más práctica la siguiente expresión para calcular la variación de la entalpía específica

de saturación con el tiempo:

$$\begin{aligned} \dot{h}_{sat1} &= \frac{\partial h}{\partial T} \dot{T}_{sat1} + \frac{\partial h}{\partial w} \dot{w} = \frac{\partial h}{\partial T} \left(\frac{\partial T_{sat1}}{\partial p} \dot{p} + \frac{\partial T_{sat1}}{\partial w} \dot{w} \right) + \frac{\partial h}{\partial w} \dot{w} = \\ &= \frac{\partial h}{\partial T} \frac{\partial T_{sat1}}{\partial p} \dot{p} + \left(\frac{\partial h}{\partial T} \frac{\partial T_{sat1}}{\partial w} + \frac{\partial h}{\partial w} \right) \dot{w}. \end{aligned} \quad (3.107)$$

Si la comparamos con la expresión dada por la Eq. 3.106 se puede identificar:

$$\frac{\partial h_{sat1}}{\partial p} = \frac{\partial h}{\partial T} \frac{\partial T_{sat1}}{\partial p}, \quad \frac{\partial h_{sat1}}{\partial w} = \frac{\partial h}{\partial T} \frac{\partial T_{sat1}}{\partial w} + \frac{\partial h}{\partial w}. \quad (3.108)$$

3.7. Casos prácticos de cambios de fase I: condensación y ebullición

Los fenómenos de condensación y ebullición son dos de los de mayor relevancia en la industria. Los altos ratios de transferencia de calor que se obtiene, y que estas se produzcan de una forma isoterma, hace que sean altamente atractivos para procesos de refrigeración y potencia. Típicamente, la fenomenología se ha asociado a procesos de convección porque provocan movimientos de masa macroscópicos, pero al ser cambios de fase involucran también variables que no se suelen usar en estos procesos como son aquellos que afectan a la superficie, e.g. la tensión superficial, y al calor latente. Aunque son dos fenómenos similares pero opuestos, cada uno tiene sus propias características y por ello deben ser tratados de forma separada.

3.7.1. Condensación

La condensación es un fenómeno de cambio de fase de vapor a líquido. Ocurre cuando la temperatura del vapor es reducida por debajo de su temperatura de saturación, cosa que habitualmente sucede cuando el vapor entra en contacto con una superficie fría.

Se pueden observar dos modos diferentes de condensación: condensación en película (*film condensation*) o condensación gota a gota (*dropwise condensation*). El primero de ellos, es el modo dominante. El condensado empapa toda la superficie creando una delgada lámina de líquido, que por acción de la fuerza de la gravedad, se desliza hacia cotas inferiores. La condensación entonces se produce mayoritariamente la interfase líquido-vapor de dicha película. En el segundo modo, sobre la superficie se forman gotas de diferentes tamaños que cuando alcanzan cierto tamaño se deslizan también por acción de la fuerza de la gravedad. Este modo, aunque alcanza más de 10 veces mejor ratio de transferencia de calor, es complicado de mantener industrialmente y a menudo requiere aditivos en el vapor o revestimientos sobre la superficie (Çengel y Ghajar, 2011). Por su improbabilidad, una suposición habitual es que todo el condensado proviene del primer modo.

En esta tesis, el fenómeno de la condensación adquiere relevancia en instalaciones de tubos cilíndricos horizontales, ya sea en su cara externa o en su cara interna. A continuación se va a analizar este fenómeno en estas dos situaciones.

3.7.1.1. Condensación sobre tubos cilíndricos horizontales

El flujo de condensado sobre un tubo cilíndrico horizontal se divide en dos en su parte superior y discurre simultáneamente por ambas caras del tubo hasta que se une en su parte inferior, tal como muestra la Fig. 3.3a. El espesor de la película depende en primera instancia del ratio de condensado que se vaya produciendo y de la velocidad de la película, que como puede intuirse, no es constante a lo largo de la curva del tubo. Siguiendo los argumentos expuestos por Nusselt en 1916 para la condensación en película sobre una superficie vertical plana, se puede resolver analíticamente el problema de la condensación sobre tubos horizontales (Dhir y Lienhard, 1971).

La primera suposición es que la película se mueve sobre la superficie del tubo en un régimen laminar. De acuerdo a ello, y usando la ley de la viscosidad de Newton, que muestra la relación lineal existente entre el balance de tensiones tangenciales al movimiento, τ , y la velocidad de la deformación en dicha dirección, $\frac{dv}{dy}$, se tiene que:

$$\eta \frac{dv}{dy} = \sum \tau = (\rho_f - \rho_v)g(\delta - y) \sin(\theta), \quad (3.109)$$

donde el sentido de las variables espaciales sigue el convenio mostrado en la Fig. 3.3b. x es la coordenada espacial paralela al movimiento, v su velocidad, y la coordenada espacial tangencial al movimiento, δ el espesor de la película y θ la coordenada angular. El balance de tensiones es la resta entre la tensión gravitatoria que tira del fluido en la dirección perpendicular a la superficie terrestre y el empuje del vapor que se opone a este movimiento. La viscosidad del fluido, η , es la variable que completa esta relación lineal.

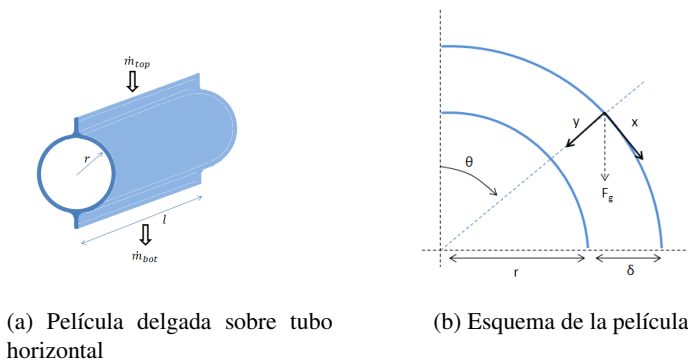


Figura 3.3: Condensación sobre tubos horizontales

Integrando la Eq. 3.109 sobre y y aplicando la condición de contorno de que la velocidad es nula en la misma superficie del tubo ($v = 0$ en $y = \delta$), el perfil de velocidades es:

$$v = \frac{(\rho_f - \rho_v)g}{\eta} \left(\delta y - \frac{y^2}{2} \right) \sin(\theta). \quad (3.110)$$

La velocidad media dependiendo del ángulo es:

$$v_\theta = \frac{1}{\delta} \int_0^\delta \frac{(\rho_f - \rho_v)g}{\eta} \left(\delta y - \frac{y^2}{2} \right) \sin(\theta) dy = \frac{(\rho_f - \rho_v)g\delta^2}{3\eta} \sin(\theta). \quad (3.111)$$

El flujo másico por unidad de longitud (Γ) en función del ángulo es:

$$\Gamma_\theta = \rho_f \delta v_\theta = \frac{\rho_f(\rho_f - \rho_v)g\delta^3}{3\eta} \sin(\theta). \quad (3.112)$$

El calor transferido del vapor al tubo a través de la película de líquido es igual al calor liberado cuando el vapor es condensado. De acuerdo con la teoría de condensación de Nusselt, el calor es transferido solo por conducción en la película de líquido. Asumiendo esto:

$$d\dot{Q} = Ldm = lLd\Gamma = k_f \frac{T_{sl} - T_w}{\delta} (ldx), \quad (3.113)$$

donde la aplicación de la Eq. 3.65 permite tener una medida de la conducción a ambos lados de la película dado que tienen diferentes valores de la temperatura. En la interfase vapor-película, la temperatura es la de saturación del líquido, T_{sl} ; en la interfase líquido-sólido, la temperatura es la de la superficie del tubo, T_w . Haciendo el cambio de variable, $\theta = x/r$:

$$\frac{d\Gamma}{d\theta} = \frac{rk_f}{L\delta} (T_{sl} - T_w). \quad (3.114)$$

Usado el espesor de la película dado en la Eq. 3.112 e integrando sobre la mitad del tubo:

$$\int_0^\Gamma \Gamma^{1/3} d\Gamma = \left(\frac{rk_f(T_{sl} - T_w)}{L} \right) \left(\frac{\rho_f(\rho_f - \rho_v)g}{3\eta} \right)^{1/3} \int_0^\pi \sin^{1/3} \theta d\theta. \quad (3.115)$$

El flujo másico medio por unidad de longitud es:

$$\Gamma = 1,9236 \left(\frac{\rho_f(\rho_f - \rho_v)gr^3 k_f^3 (T_{sl} - T_w)^3}{\eta L^3} \right)^{1/4}. \quad (3.116)$$

Usando la ley de enfriamiento de Newton (Eq. 3.66):

$$\dot{Q}_t = 2lL\Gamma = \alpha_t A_{s,t} (T_{sl} - T_w), \quad (3.117)$$

es posible obtener el coeficiente de transferencia de calor medio del tubo:

$$\alpha_t = 0,7282 \left(\frac{\rho_f(\rho_f - \rho_v)gk_f^3 L}{2\eta(T_{sl} - T_w)r} \right)^{1/4}. \quad (3.118)$$

La temperatura del líquido en la película varía entre la de interfase vapor-película, T_{sl} , y la de la interfase líquido-sólido, T_w . Una suposición habitual es evaluar las propiedades termodinámicas de la película a una temperatura media, T_f .

$$T_f = \frac{T_{sl} - T_w}{2}. \quad (3.119)$$

Para compensar que el condensado se enfría por debajo de la temperatura de saturación a la temperatura media, T_f , es habitual reemplazar el calor latente, L , por un calor latente modificado, L^+ , que se define tal que:

$$L^+ = L + 0,68c_{p,f}(T_{sl} - T_w). \quad (3.120)$$

Los condensadores basados en tubos horizontales son corrientes en la industria. Consisten en haces de tubos dispuestos en filas y columnas para minimizar su volumen. Cuando se trabaja con este tipo de condensadores hay que tener en cuenta suposiciones adicionales ya que el espesor de la película es mucho menor en los tubos superiores que en los inferiores como consecuencia del vertido del condensado producido en los tubos superiores sobre los inferiores. Si los tubos drenan suavemente y homogéneamente sobre el tubo inmediatamente inferior despreciándose olas e imperfecciones en la película, entonces el coeficiente de transferencia de calor para toda la columna de tubos puede calcularse analíticamente como (Çengel y Ghajar, 2011):

$$\alpha = 0,7282 \left(\frac{\rho_f(\rho_f - \rho_v)gk_f^3L^+}{2\eta(T_{sl} - T_w)rN_{row}} \right)^{1/4}. \quad (3.121)$$

El condensado total producido por el haz de tubos puede ser determinado por la siguiente expresión:

$$\dot{m} = \frac{\dot{Q}}{L^+} = \frac{N_{col}N_{row}\alpha A_{s,t}(T_{sl} - T_w)}{L^+}. \quad (3.122)$$

3.7.1.2. Condensación en el interior de tubos cilíndricos horizontales

La condensación sobre tubos horizontales, al igual que sobre otras geometrías básicas, se puede resolver analíticamente porque los factores que influyen en el resultado son pocos. A medida que se van añadiendo factores como turbulencias, imperfecciones en la superficie o la velocidad del vapor se tiene que hacer uso de correlaciones experimentales. En el caso de la condensación en el interior de tubos, tanto la velocidad del vapor como la limitación del flujo de condensado son factores que no pueden despreciarse.

Cuando la velocidad del vapor es baja, este puede considerarse estancado y el líquido en el interior del tubo se mueve por un gradiente hidráulico. La condensación que se produce en la pared interna del tubo hace que se recubra de una película de líquido que

por acción de la gravedad cae hasta su parte más baja del tubo, llegando a acumularse el condensado en esa zona. En (Chato, 1962) se comprobó experimentalmente que la transferencia de calor no era particularmente sensible a la cantidad de condensado acumulado en el fondo del tubo en estas condiciones y se sugiere la siguiente expresión pseudo-analítica para el coeficiente de transferencia de calor:

$$\alpha = 0,555 \left(\frac{\rho_f(\rho_f - \rho_v)gk_f^3L^+}{2\eta_f(T_{sl} - T_w)r} \right)^{1/4}, \quad (3.123)$$

donde las propiedades termodinámicas de la película deben evaluarse a la temperatura media dada por la Eq. 3.119.

Para un condensador compuesto por un haz de tubos donde la condensación se produce en el interior, y considerando bajas velocidades en el vapor, el condensado total se puede calcular con la Eq. 3.122 donde el coeficiente de transferencia de calor es el dado por la Eq. 3.123. Es lógico pensar que si la velocidad del fluido es baja (movimiento por gradiente hidráulico) y la longitud a recorrer grande, aunque el régimen sea laminar el flujo al final perderá su calor sensible y adquirirá la temperatura de la pared del tubo. Este hecho debe ser incluido en el balance energético del mismo.

El comportamiento de un condensador de este tipo fuera de las condiciones anteriormente citadas dista mucho de estos resultados. La caída de presión a lo largo del condensador se hace muy complicada de estimar y existen muy pocas referencias en la literatura que traten este problema (Collier y Thome, 1994).

3.7.2. Ebullición

La ebullición y la evaporación son dos procesos similares que obtienen el mismo resultado: un cambio de fase de líquido a vapor. Ambos procesos ocurren cuando la presión de vapor es menor que la presión de saturación. La principal diferencia entre ambos es dónde tienen lugar: la ebullición ocurre en la interfase líquido-sólido mientras que la evaporación ocurre en a interfase líquido-vapor. Mientras que la ebullición normalmente requiere que la masa entera de líquido alcance las condiciones de saturación, la evaporación solo ocurre cuando la fase gaseosa, que puede ser una mezcla de diferentes sustancias, no está saturada con la sustancia evaporante. Cuando la fase gaseosa solo tiene un componente que resulta ser el mismo que evapora de la fase líquida y este está en equilibrio térmico, es muy difícil diferenciar entre ambos procesos. Tanto, que hasta a veces pueden considerarse el mismo.

Una de las características más importantes de la ebullición es la formación de burbujas de vapor que aparecen en la interfase líquido-sólido y ascienden hasta la interfase líquido-vapor. El crecimiento de estas y su dinámica dependen de la diferencia de temperatura entre sólido y líquido y de las propiedades termodinámicas del fluido. Y afectan fuertemente a la transferencia de calor. A pesar de que el fenómeno de la ebullición es bien conocido, el proceso de la formación de las burbujas aún no se entiende completamente lo que obliga a recurrir a expresiones empíricas o semi-analíticas para predecir

los ratios de transferencia de calor.

Hay dos modos básicos de ebullición: en reposo o en movimiento. El primero, en inglés *pool boiling*, ocurre cuando la superficie caliente está sumergida en el líquido y este no es agitado. El movimiento en el líquido se debe a una mezcla entre convección natural y ascensión de las burbujas. El segundo, en inglés *flow boiling*, sucede cuando el líquido fluye por una superficie caliente. La convección en este caso es forzada. Si ocurre en una tubería cerrada el líquido y el vapor fluyen a la vez condicionando la dinámica del flujo. A este flujo se conoce como flujo bifásico.

La ebullición puede ser clasificada en: subenfriada y saturada. Se dice que la ebullición es subenfriada cuando la mayor parte de la masa del líquido tiene una temperatura inferior a la de saturación. En este caso, la velocidad de transmisión del calor es lenta y se genera un gradiente de temperaturas en la masa del líquido desde la superficie del sólido caliente. Las burbujas se generan en la interfase líquido-sólido pero quedan confinadas en una región cercana a la superficie caliente ya que alejadas de esta, el gradiente negativo de temperaturas hace que se condensen. Cuando la temperatura del líquido alcanza las condiciones de saturación la ebullición es saturada y las burbujas alcanzan la interfase líquido-vapor produciéndose una separación efectiva de vapor.

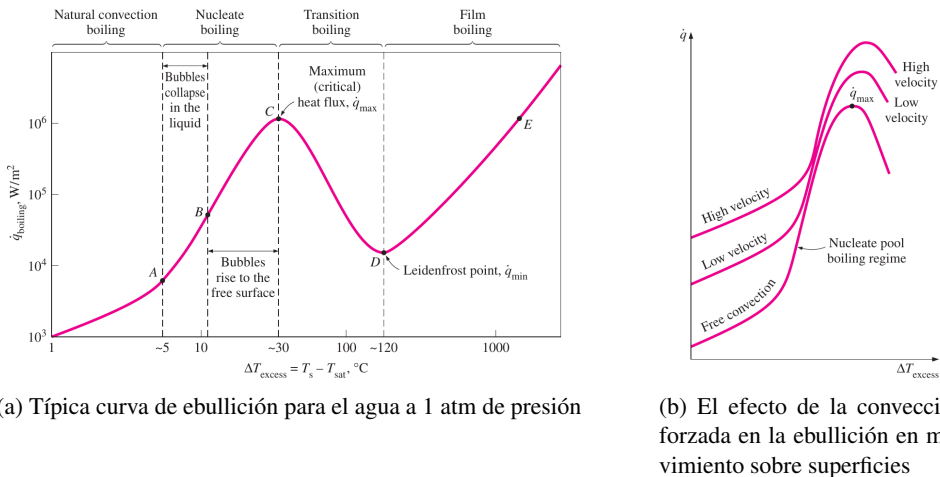
En esta tesis, toda ebullición es tratada como de saturación. La ebullición subenfriada queda enmascarada, por tanto, en el proceso de transmisión de calor entre el sólido y el líquido.

3.7.2.1. Ebullición en reposo

En la ebullición en reposo se pueden identificar cuatro regímenes, cada uno dominado por un fenómeno en particular en la transferencia de calor. La curva de ebullición (también llamada curva de Nukiyama) es una representación del flujo de transferencia de calor por área en función de la diferencia de temperaturas entre el líquido y el sólido caliente y muestra las diferencias entre estos regímenes. La curva de la Fig. 3.4a representa la curva de ebullición del agua a 1 atm de presión y es similar para todos los fluidos. Depende de la presión, del líquido y del material usado para calentar el líquido.

En el primer régimen, conocido como ebullición de convección natural, la temperatura del sólido es solo unos grados mayor que la temperatura de saturación, T_s y T_{sat} respectivamente según la nomenclatura de la Fig. 3.4a. Se caracteriza por la ausencia de burbujas. El líquido es sobrecalentado por encima del equilibrio en la interfase líquido-sólido y las corrientes de convección natural lo transmiten al resto de líquido. Cuando este líquido sobrecalentado alcanza la interfase líquido-vapor se produce evaporación para devolver al sistema al estado de equilibrio. Para el agua, el límite de este régimen se alcanza con una diferencia de temperaturas de aproximadamente 5 °C.

Cuando se incrementa la temperatura, aparecen las primeras burbujas. Al principio, estas burbujas no llegan a la superficie y se condensan en el líquido. Este mecanismo de transmisión del calor es más rápido que solo la convección natural y el vapor sigue produciéndose en la interfase líquido-vapor. Si se sigue incrementando la temperatura



(a) Típica curva de ebullición para el agua a 1 atm de presión

(b) El efecto de la convección forzada en la ebullición en movimiento sobre superficies

Figura 3.4: Curva de Nukiyama (Çengel y Ghajar, 2011)

del sólido, pasados los 10 °C de diferencia en el agua, alguna de las burbujas llega a la superficie. A partir de entonces la producción del vapor se localiza principalmente en la interfase líquido-sólido. Si se aumenta la temperatura del sólido se alcanza un máximo en el flujo de calor. Este es el llamado punto de flujo de calor crítico ($\Delta T \simeq 30$ °C para el agua) y marca el límite del régimen conocido como ebullición nucleada.

A partir del punto de flujo de calor crítico, la transferencia de calor decae debido a que se empieza a formar una película de vapor en la interfase líquido-sólido. Siguen existiendo las burbujas, pero las partes cubiertas por la película actúan de aislante entre sólido y líquido debido al bajo coeficiente de conducción térmica que tiene el vapor. Este régimen, llamado de transición, se caracteriza por su inestabilidad y suele evitarse en operación.

Cuando la película recubre toda la superficie, se alcanza un mínimo local ($\Delta T \simeq 120$ °C para el agua), llamado punto de Leidenfrost. A partir de ese punto, el régimen se llama ebullición en película y se caracteriza porque la radiación se convierte en el mecanismo de transferencia de calor dominante entre el sólido y el líquido. Por tanto, a medida que aumenta la diferencia de temperaturas la transferencia aumenta a la cuarta potencia.

Un fenómeno experimental que se ha observado es que cuando la fuente de calor es controlada, la ebullición no siguen esta curva. Si aplica calor aumentando progresivamente la diferencia de temperaturas, al alcanzar el punto de flujo crítico no prosigue por el régimen de ebullición. Se produce un salto al de ebullición en película que como consecuencia incrementa súbitamente la temperatura del material empleado para calentar el líquido. Dependiendo del material se puede provocar una fusión del mismo, es por ello, por lo que se llama fenómeno de quemado a este salto. Este fenómeno forma un ciclo de histéresis, ya que si se disminuye la diferencia de temperaturas en el régimen de

ebullición en película, al llegar al punto de Leidenfrost se produce una disminución repentina de la temperatura del material que calienta el líquido hasta pasar a la ebullición nucleada.

Correlaciones de transferencia de calor. Reproducir en una sola expresión los cuatro regímenes de la ebullición en reposo es una tarea inabarcable e ineficiente por la cantidad de consideraciones que se deberían tener en cuenta. Es habitual encontrar en la literatura correlaciones empíricas que reproducen cada uno de los regímenes con cierto grado de éxito.

Para el régimen de ebullición de convección natural, que está gobernada por las corrientes convectivas inducidas naturalmente, la transferencia de calor puede ser determinada con bastante grado de precisión por las correlaciones que se suelen emplear en convección natural. Por ejemplo, si el evaporador está formado por tubos cilíndricos horizontales suficientemente largos para despreciar los efectos de borde, entonces la correlación más adecuada es la sugerida por [Churchill y Chu \(1975\)](#):

$$Nu = \left(0,60 + \frac{0,387Ra^{1/6}}{\left(1 + \left(\frac{0,559}{Pr} \right)^{9/16} \right)^{8/27}} \right)^2, \quad (3.124)$$

válida para números de Rayleigh, Ra , comprendidos entre 10^{-5} y 10^{12} . El número de Rayleigh es un número adimensional asociado a la transmisión de calor que se define como:

$$Ra = \frac{g\beta c_p \rho^2}{\eta k} (T_w - T_\infty) l_c^3. \quad (3.125)$$

Este número depende de las propiedades termodinámicas del fluido como el coeficiente de expansión térmica β , el calor específico a presión constante c_p , la densidad ρ , la viscosidad η , y el coeficiente de conductividad térmica k . Además, también depende de la aceleración gravitatoria g , la temperatura de la superficie T_w , la temperatura del fluido en un punto alejado de la capa límite T_∞ y de la longitud característica l_c . En este caso, la longitud característica es el diámetro exterior del tubo. Todas las propiedades termodinámicas son evaluadas en la capa límite del líquido cuya temperatura es:

$$T_{lim} = \frac{T_\infty + T_w}{2}. \quad (3.126)$$

El número de Prandl, Pr , es un número adimensional proporcional al cociente entre la difusividad de momento y la difusividad térmica y se define así:

$$Pr = \frac{\eta c_p}{k}. \quad (3.127)$$

En el régimen de ebullición nucleada, la transferencia de calor depende fuertemente de las burbujas (generación y dinámica), y por tanto, es muy complicado de predecir. El

Tabla 3.1: Valores de C_R y n_R para varias combinaciones de sólido-líquido (Incropera et al., 2012)

Combinación líquido-sólido	C_R	n_R
Agua-Cobre		
Rugoso	0,0068	1,0
Pulido	0,0128	1,0
Agua-Acero inoxidable		
Químicamente fresado	0,0133	1,0
Mecánicamente pulido	0,0132	1,0
Molido y pulido	0,0080	1,0
Agua-Latón	0,0060	1,0
Agua-Níquel	0,0060	1,0
Agua-Platino	0,0130	1,0
n-Pentano-Cobre		
Pulido	0,0154	1,7
Rectificado	0,0049	1,7
Benceno-Cromo	0,0101	1,7
Alcohol etílico-Cromo	0,0027	1,7

estado de la superficie y el material con el que se calienta el líquido también afectan a la transmisión de calor. La correlación más usada para este régimen es la propuesta por Rohsenow (1952):

$$\dot{Q} = A_s \eta L \left(\frac{g(\rho - \rho_v)}{\sigma} \right)^{1/2} \left(\frac{c_p(T_w - T_{sl})}{C_R L P r^{n_R}} \right)^3, \quad (3.128)$$

donde A_s es el área de intercambio, L es el calor latente, σ la tensión superficial y T_{sl} la temperatura de saturación del líquido. El valor de la constante experimental n_R depende del líquido y la constante experimental C_R depende de la combinación sólido-líquido. La Tab. 3.1 muestra algunos valores de estas constantes. Todas las propiedades termodinámicas deben ser evaluadas a la temperatura de saturación del líquido.

La correlación de Rohsenow, Eq. 3.128, es independiente de la geometría o la orientación de la superficie caliente. Sin embargo, es muy dependiente de las propiedades de la superficie, y solo debe aplicarse a superficies limpias y relativamente suaves. La correlación tiene un $\pm 30\%$ de error en el flujo de calor para una diferencia de temperaturas dada, por ello los resultados deben ser interpretados correctamente.

El punto de corte entre ambas correlaciones, Eq. 3.124 y 3.128, no se puede definir para una diferencia de temperaturas exacta porque ambas dependen del líquido y de sus propiedades termodinámicas. Esto supone un problema a la hora de modelar dinámicamente una ebullición de este tipo. El punto de corte se desplaza con el tiempo en la

medida en la que lo hacen las propiedades termodinámicas del fluido. Cuando el modelo entra en la zona de influencia del corte, se produce un evento de estado para calcular el nuevo valor, ralentizando, en el mejor de los casos, parando, en el peor, la simulación. Una posible estrategia para afrontar el problema consiste en usar una sola correlación para las dos regiones si el modelo es capaz de admitir el error cuando trabaja fuera de la zona de operación.

Más allá del flujo de calor crítico, las variables quedan fuera de la zona de operación de los sistemas modelados en la tesis y por tanto carecen de interés en la misma. Si se quiere ampliar los conocimientos en la materia se pueden consultar las referencias (Çengel y Ghajar, 2011; Incropera et al., 2012).

3.7.2.2. Ebullición en movimiento

Si el fluido es forzado a moverse por fuerzas externas, e.g. una bomba hidráulica o la gravedad, la ebullición muestra una combinación de efectos producidos por la ebullición en reposo y la convección forzada. Esta ebullición se puede clasificar en función de si el fluido es forzado a moverse sobre o en el interior de la superficie caliente.

Cuando la ebullición en movimiento se produce sobre la cara exterior de un cuerpo, esta presenta los mismos regímenes que la ebullición en reposo. Sin embargo, la transferencia de calor se ve modificada considerablemente. A mayor velocidad, mayor transferencia (Çengel y Ghajar, 2011). Para evaporadores de tubos horizontales sumergidos, el efecto de la velocidad se puede traducir en un desplazamiento de la curva de ebullición hacia mayores valores de transferencia de calor (v. Fig. 3.4b).

La ebullición en movimiento en el interior de geometrías es un fenómeno mucho más complejo. Esto se debe a que no hay una interfase líquido-vapor para que escape el vapor generado, y por tanto, líquido y vapor se ven forzados a moverse conjuntamente. El modo en el que líquido y vapor coexisten es determinante para entender las características termohidráulicas del fluido. Se pueden distinguir hasta cuatro configuraciones diferentes de flujo bifásico³: disperso, intermitente, estratificado y anular. La determinación de la configuración del flujo depende de la presión, el flujo másico, el flujo de calor y la geometría del canal. No existe un método directo para determinar estos patrones (Bonilla et al., 2013b), pero si se es capaz de determinar las velocidades superficiales del fluido de ambas fases, es posible hacerlo indirectamente mediante los esquemas experimentales como el que muestra la Fig. 3.5.

3.7.2.3. Evaporación en película descendente

Un caso particular de ebullición en movimiento sucede cuando esta se produce en una película de líquido que desciende sobre la superficie de un sólido. El líquido es forzado a moverse por la fuerza de la gravedad pero al igual que en el caso de la condensación sobre tubos horizontales (cf. §3.7.1.1), el mecanismo de transferencia de calor

³No todos los autores se ponen de acuerdo en esta clasificación. Algunos autores consideran otras configuraciones, y hay otros que distinguen también entre configuraciones intermedias.

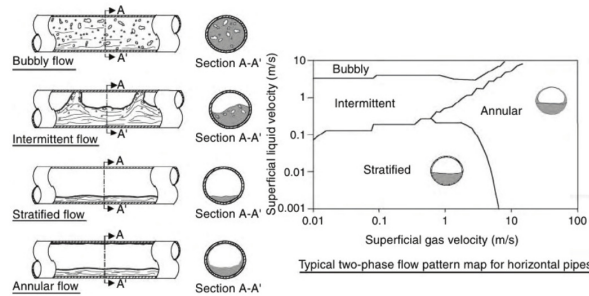


Figura 3.5: Principales patrones de flujo bifásico en tuberías horizontales (Romero-Alvarez y Zarza, 2007)

no se ajusta al de una combinación entre un cambio de fase y una convección forzada convencional. Esto se debe a que la estrechez de la película dificulta los movimientos macroscópicos de masa en dirección perpendicular al movimiento.

La evaporación en película descendente es un proceso controlado por dos fenómenos diferentes, el de conducción-convección a través de la película y el del cambio de fase, y ambos están ligados al espesor de la película. Por ello, las inestabilidades en la película juegan un papel importante. El movimiento de la película habitualmente está dominado por efectos de viscosidad, gravedad y tensión superficial, y cualquier perturbación que le afecte puede provocar ondas en la película que a su vez afectan fuertemente el ratio de evaporación (Habert, 2009). El proceso de evaporación hace que la película adelgace progresivamente, llegando incluso a provocar huecos secos en la película que afectan también al ratio de evaporación.

A pesar de los evidentes inconvenientes derivados de la inestabilidad de película, los ratios de transferencia de calor obtenidos por este tipo de evaporación son muy elevados, lo que hace que el fenómeno sea muy atractivo para la industria. Si se comparan los evaporadores de película descendente de tubos horizontales con los evaporadores de tubos sumergidos, se obtienen las siguientes ventajas (Thome, 2004):

- Mayor rendimiento en la transferencia de calor.
- Menor carga de refrigerante, reducción de aproximadamente 1/3 del fluido de trabajo.
- Mayor uniformidad en el coeficiente global de transferencia de calor.
- Mejor control de la temperatura.
- Más compacto, reducción del volumen del evaporador.

Y desventajas:

- Menor experiencia en el diseño.

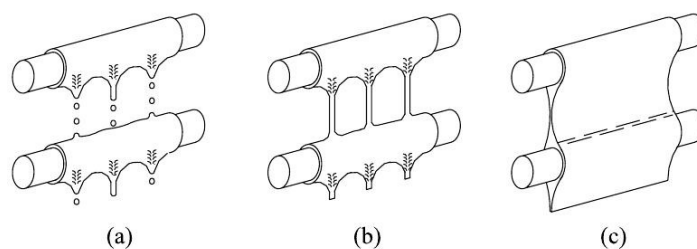


Figura 3.6: Modos idealizados de drenaje: (a) por gotas (b) por columna (c) por cortina (Mitrovic, 1986)

- Gran sensibilidad a la no uniformidad de la distribución del líquido en la parte superior del tubo.
- Menor tolerancia a la falta de fluido.

El potencial para reemplazar los evaporadores de tubos sumergidos por los de tubos horizontales de película descendente en la industria es evidente, pero las reticencias a hacerlo se deben a la dificultad en distribuir uniformemente el líquido en el tubo y a la alineación de los tubos. Además, la experiencia adquirida en la industria con los evaporadores de tubos sumergidos ha permitido la optimización de su diseño, cosa que aún no ha pasado con los de película descendente donde la superficie de transferencia, la geometría del haz de tubos y las estrategias de operación aún deben refinarse (Ribatski y Jacobi, 2005).

El funcionamiento de un evaporador de película descendente y tubos horizontales es sencillo. En la parte superior del evaporador, una bandeja perforada u otro tipo de distribuidor rocía el líquido en forma de spray sobre la primera fila de un haz de tubos. Sobre la superficie de cada uno de los tubos, se forma una película delgada. Cuanto más uniforme sea la distribución de líquido sobre la superficie de los tubos, más uniforme será el espesor de la película y mejor comportamiento tendrá el evaporador. La película formada desliza por acción de la gravedad empapando completamente al tubo. La disposición del haz en forma de filas y columnas hace que la película formada en la primera fila de tubos fluya por las columnas de tubos hasta caer en un depósito situado en el fondo del evaporador.

La forma en la que la película fluye de un tubo a otro influye en la uniformidad de esta sobre el tubo. Existen tres modos básicos de drenaje: por gotas, por columnas y por cortina (v. Fig. 3.6). La determinación de un modo u otro no solo depende del flujo másico, sino que también del espaciado entre tubos (Yung et al., 1980) y de las propiedades termodinámicas del líquido (Habert, 2009). El modo cortina es el más conveniente para la evaporación en película descendente ya que permite una mayor uniformidad y evita huecos secos en la película.

La aparición de huecos secos en la película y el efecto de estos en la transmisión de calor puede ser estimado (Ribatski y Thome, 2007; Habert y Thome, 2010). Si se

consideran los huecos secos como una reducción del área mojada del tubo, el efecto en la transferencia de calor es proporcional a esta reducción. Habert y Thome (2010) presentaron una correlación experimental del área aparente para distintos tubos y distintos fluidos en función del número de Reynolds de la película al llegar al tubo:

$$F_A = \begin{cases} Re_{top}/Re_{onset} & \text{si } Re < Re_{onset} \\ 1 & \text{si } Re \geq Re_{onset} \end{cases}, \quad (3.129)$$

donde F_A es el cociente entre el área mojada aparente y la total del tubo, Re_{top} es el número de Reynolds en la parte superior del tubo y Re_{onset} es el valor mínimo límite del número de Reynolds por debajo del cual aparece este efecto. Este límite se puede calcular con la siguiente expresión:

$$Re_{onset} = 65,8 \left(\frac{2\dot{q}_w r}{\eta L} \right), \quad (3.130)$$

que depende del flujo de calor por área que recibe la película de líquido, \dot{q}_w .

En la evaporación en película descendente se pueden identificar dos de los regímenes estudiados en la ebullición en reposo (v. §3.7.2.1): ebullición por convección natural y ebullición nucleada. En la primera, la película se calienta por encima del estado de saturación y libera ese calor con la evaporación en la interfase líquido-vapor. La ebullición nucleada en una película descendente difiere de la ebullición en reposo debido a que posiblemente todas las burbujas lleguen a la interfase líquido-vapor.

Los efectos observados en la transferencia de calor son los siguientes (Habert, 2009):

- *Temperatura de saturación.* En el régimen convectivo, un aumento de la temperatura causa un aumento en la transferencia, probablemente debido a la variación en la viscosidad que afecta a la película. En el régimen nucleado, se observan efectos competitivos opuestos, puede ayudar al incremento de la densidad de nucleación o inhibir el crecimiento de burbujas debido al salto en el perfil de temperaturas.
- *Flujo de calor.* En el régimen convectivo no se ha observado variación en el coeficiente. En el nucleado, se observa un aumento en la densidad de nucleación.
- *Flujo másico.* Tanto en el régimen convectivo como en el nucleado no parece existir una relación entre el coeficiente de transferencia de calor y el flujo másico, siempre y cuando no haya huecos en la película.
- *Diámetro del tubo.* En el régimen convectivo se han medido mayores valores de coeficientes de transferencia de calor en tubos con menor diámetro. En el régimen convectivo no se ha observado tal variación.
- *Distribuidor del líquido.* Una distribución uniforme en cantidad y temperatura del líquido sobre los tubos es crucial para la formación de la película.

- *Flujo de vapor.* El flujo de vapor tiene un doble efecto, puede provocar una mala distribución del spray perjudicando la transferencia, o puede promover olas en la película cuyo resultado es mejorar la convección, y por tanto, la transferencia.

Existen muchas correlaciones para la evaporación en película descendente en la literatura, (Fernández-Seara y Pardiñas, 2014; Ribatski y Jacobi, 2005). El grado de aplicabilidad de la mayoría sigue siendo bastante restrictivo. La mayoría de estas correlaciones están basadas en números adimensionales como el de Reynolds, Prandl o Arquímedes (número basado en diámetro del tubo) aunque si el régimen es nucleado entonces se suele emplear también el flujo de calor por área en la correlación. La siguiente relación fue propuesta por Sernas (1979) y Rogers et al. (1995) con diferentes coeficientes (c_1 , c_2 y c_3).

$$Nu = c_1 Re^{c_2} Pr Ar^{c_3}. \quad (3.131)$$

Esta misma correlación fue usada por de la Calle et al. (2014) donde se ajustaron los coeficientes con datos experimentales para un evaporador de una planta de desalinización por destilación multiefecto.

3.7.2.4. Evaporación súbita

Cuando un líquido entra en un recinto donde la presión es menor que su presión de vapor, se produce una evaporación repentina parcial del líquido hasta que ambas presiones se igualan. El calor latente se emplea para enfriar la temperatura del líquido que entra. Este proceso se llama evaporación súbita o *flash*, y es muy habitual en sistemas de refrigeración donde suele haber circulación de líquido entre recintos a diferentes presiones. La conveniencia o no del proceso depende de las características del sistema, algunas veces se explota para obtener vapor como en la destilación multi-etapa, y otras veces se intenta evitar ya que puede producir inestabilidades del sistema o una penalización de la transferencia de calor en evaporadores (Palenzuela et al., 2014).

En esta tesis se diferencian dos situaciones, aunque el proceso en sí mismo sea idéntico. La primera situación, corresponde al caso en el que la corriente de líquido entra al sistema por la fase de vapor. Si se aísla el proceso y se hace un balance de masa y energía se tiene que:

$$0 = \dot{m}_{in} - \dot{m}_{out} - \dot{m}_{ev}, \quad (3.132)$$

$$0 = \dot{m}_{in} h_{in} - \dot{m}_{out} h_{sl} - \dot{m}_{ev} h_{sv}. \quad (3.133)$$

En el proceso no hay ni acumulación de masa ni de energía. La entalpía específica de salida del líquido corresponde a la de saturación de ese líquido a esa presión. Si se despeja el flujo másico de salida, \dot{m}_{out} , de la Eq. 3.132 y se sustituye en Eq. 3.133 se puede calcular el flujo de evaporación como:

$$\dot{m}_{ev} = \frac{\dot{m}_{in}(h_{in} - h_{sl})}{h_{sv} - h_{sl}}. \quad (3.134)$$

La segunda situación es cuando la corriente de líquido entra al sistema por la fase líquida. Este al entrar evapora dentro de la masa de líquido generando burbujas que, al igual que en la ebullición subenfriada, tienden a condensarse rápidamente si la temperatura del líquido no está en condiciones de saturación. Estos casos quedan enmascarados en la transferencia de calor entre líquidos. Si la fase líquida está en condiciones de saturación o próxima entonces las burbujas alcanzan la interfase líquido-vapor. El tratamiento para calcular el flujo de evaporación es similar al expuesto en la §3.6.1, donde nuevamente la frontera del CV será la que cubra solo la fase líquida. El flujo de evaporación para este caso puede calcularse de acuerdo a:

$$\dot{m}_{ev} = \frac{1}{h_{sv} - h_{sl}} \left(-m\dot{h}_{sl} - \sum_i \dot{m}_{in,i}(h_{sl} - h_{in,i}) + \frac{m}{\rho} \dot{p} \right), \quad (3.135)$$

donde se ha tenido en cuenta que puede haber varias entradas de flujo.

3.8. Casos prácticos de cambios de fase II: absorción y desorción

La absorción describe el proceso de transferencia de masa de un vapor a un líquido (o un sólido en algunos casos). Es un proceso similar a la condensación ya que implica un cambio de fase vapor-líquido, pero requiere de un disolvente que tenga afinidad por ese vapor y que tras la transferencia forme disolución con él. Después de que el vapor sea absorbido en una fase condensada, este libera el calor de absorción, que es análogo al calor latente en un proceso de condensación. No hay que confundir absorción con adsorción, i.e. proceso por el cual átomos, iones o moléculas son atrapados o retenidos en la superficie de un sólido. El primero es un fenómeno de volumen, el segundo de superficie.

La desorción, también llamado empobrecimiento, describe el proceso dual a la absorción, es decir, la generación de vapor en una disolución absorbente. Al igual que la ebullición, es un proceso que requiere energía.

Lo que caracteriza a estos dos procesos es que tanto la absorción como la desorción se realizan a temperaturas y presiones diferentes en la disolución a las de saturación del vapor. Es por ello, por lo que estos procesos son muy atractivos en la industria de la refrigeración ya que son capaces de sustituir una entrada mecánica al sistema por una entrada de calor.

La absorción es un proceso ligado a fenómenos difusivos y por tanto de no equilibrio. Se produce en la interfase líquido-vapor y origina un gradiente de concentraciones en dirección perpendicular a la superficie. A una cierta temperatura y presión existe una concentración de saturación a partir de la cual no hay más afinidad por el vapor. Esta saturación fija una concentración en la capa límite de esa interfase. La absorción es un proceso rápido en comparación con la homogeneización de la concentración en el líquido, y por tanto, se crea un gradiente de concentraciones en el líquido. La ten-

dencia termodinámica a alcanzar un equilibrio origina una fuerza que empuja a igualar concentraciones en todos los puntos del líquido.

Se puede establecer una analogía entre los mecanismos de transferencia de calor y los mecanismos de transferencia de masa. Ambos se producen por un desequilibrio, uno de temperaturas y el otro de concentraciones, y ambos cumplen con el segundo principio obligando al sistema a alcanzar un estado de máxima entropía. El resultado de estos desequilibrios es la aparición de un flujo de calor o de masa en dirección opuesta al gradiente de temperaturas o concentraciones. Si la difusión se produce a escala microscópica entonces la transferencia se lleva a cabo por conducción y la ley que aproxima su comportamiento es la de Fick:

$$\dot{m}_{dif} = -D_{AB}A_s \frac{dC_{W,A}}{dx}, \quad (3.136)$$

donde D_{AB} es el coeficiente de difusión del elemento A en B y $C_{W,A}$ la concentración másica del elemento A . Si la difusión se produce a escala macroscópica como pueda ser en un fluido, entonces se habla de convección de masa y sigue una ley análoga a la ley de enfriamiento de Newton:

$$\dot{m}_{dif} = \alpha_{dif}A_s(C_{W,sat} - C_{W,\infty}), \quad (3.137)$$

donde α_{dif} es el coeficiente de difusión convectiva, $C_{W,sat}$ la concentración másica de saturación y $C_{W,\infty}$ la concentración másica en un punto alejado de la superficie por donde se produce la difusión. El número de Sherwood, Sh , es un número adimensional utilizado en transferencia de masa equivalente al número de Nusselt para la transferencia de calor. Representa el cociente entre la transferencia de masa por convección y por conducción:

$$Sh = \frac{\alpha_{dif}l_c}{D_{AB}}. \quad (3.138)$$

La transferencia de masa por convección, al igual que pasa con la de calor, es un proceso bastante complejo que depende de muchos factores, ya sean geométricos, hidráulicos o de las propiedades termodinámicas del fluido. La dificultad de hallar soluciones analíticas hace que sea necesario el uso de correlaciones experimentales. En la absorción, la transferencia de calor y de masa son fenómenos acoplados y no se pueden tratar de forma independiente. Esto puede mostrarse en forma de relación entre el número de Nusselt y el de Sherwood (Çengel y Ghajar, 2011), aunque también suele expresarse en forma de correlación.

La absorción es el proceso crítico en las bombas de calor, por ello el esfuerzo dedicado a su estudio ha sido importante, sobre todo desde los últimos 25 años. Los absorbedores de película descendente son de los que más éxito tienen en la industria, entre ellos destacan los de tubos horizontales. Sin embargo, aún existen lagunas para una completa comprensión del fenómeno sobre estas geometrías. La validez experimental de las correlaciones de la literatura es muy limitada (Killion y Garimella, 2001).

3.9. Termodinámica de reacciones químicas

La entalpía es una función de estado fundamental para aquellos sistemas en los que tiene lugar una reacción química. Esto se debe a que la diferencia de entalpías entre el estado final e inicial independientemente del camino seguido constituye el calor de reacción si el proceso sucede a presión constante. Aplicando el primer principio al sistema:

$$U_2 - U_1 = Q - p(V_2 - V_1), \quad (3.139)$$

el calor de reacción es:

$$Q = (U_2 + pV_2) - (U_1 + pV_1) = H_2 - H_1. \quad (3.140)$$

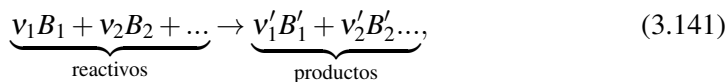
Esta misma relación se presentó en la §3.6, en la que el calor de cambio era el resultado de la diferencia entre las entalpías final e inicial. Si el signo de este calor es positivo, la reacción es exotérmica y liberará calor; si el signo es negativo, la reacción es endotérmica y consumirá energía en forma de calor.

En la §3.3.4 se comentó que el valor absoluto de las entalpías no podía calcularse en termodinámica, por ello se deben definir arbitrariamente estados de referencia sobre los cuales poder medir las diferencias. En química, es habitual definir entalpías de referencia de los elementos en condiciones normales, 25°C y 1 atm, para los cuales se considera nula. A los compuestos se les asignan entalpías molares de formación que representan la variación de entalpía que corresponde a la formación de un mol de sustancia en condiciones normales a partir de los elementos que lo componen en su forma más estable (Aguilar, 2001).

La ley experimental de Hess pone de manifiesto la condición de función de estado de la entalpía al afirmar que (Aguilar, 2001): “*El balance calorífico de una reacción química depende exclusivamente de la naturaleza y condiciones de los productos iniciales y finales y es independiente de las etapas intermedias*”.

Esta ley permite calcular el calor de reacción en reacciones difíciles de realizar en la práctica, siempre y cuando sea posible realizar la reacción por otro camino. Los calores de reacción se suman y se restan del mismo modo que las reacciones. Si se cambia el sentido de la reacción, el calor de reacción cambia de signo.

Dada la siguiente reacción:



donde B_i son los reactivos, B'_i los productos y v_i sus respectivos coeficientes estequiométricos, el calor de reacción a una presión y temperatura se expresa como:

$$Q = \underbrace{(v'_1 H'_1 + v'_2 H'_2 + \dots)}_{\text{productos}} - \underbrace{(v_1 H_1 + v_2 H_2 + \dots)}_{\text{reactivos}}, \quad (3.142)$$

donde H_i son las entalpías molares de formación de los distintos componentes.⁴

Haciendo uso de la capacidad calorífica a presión constante:

$$C_p = \left(\frac{\delta Q}{\partial T} \right)_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p, \quad (3.143)$$

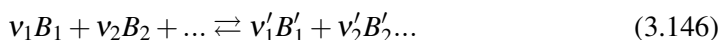
en el calor de reacción se obtiene que:

$$\frac{\delta Q}{\partial T} = \left(\frac{\partial \Delta H}{\partial T} \right)_p = \sum v_i \left(\frac{\partial H_i}{\partial T} \right)_p = \sum v_i C_{p,i} = \Delta C_p. \quad (3.144)$$

Esta última expresión permite conocer el valor del calor de reacción a una temperatura diferente, T_2 , que la conocida, T_1 :

$$\Delta H_2 = \Delta H_1 + \int_1^2 \Delta C_p dT. \quad (3.145)$$

Si se considera que la reacción es reversible se obtiene:



En el momento inicial la reacción tiene un número de moles $n_{0,i}$ de la especie B_i , pasado un tiempo el número de moles de esa especie será:

$$n_i = n_{0,i} + v_i \xi, \quad (3.147)$$

donde el grado de avance, ξ , es una variable que describe el progreso de la reacción y donde los coeficientes estequiométricos son usados según el convenio de signos. Cuando la reacción comienza, se tiene que $\xi = 0$ y $n_i = n_{0,i}$. Al progresar la reacción, si ξ es positivo la reacción avanza en el sentido de izquierda a derecha y si es negativo lo hace en sentido contrario.

Una variación infinitesimal en ξ corresponde con una variación en n_i .

$$dn_i = v_i d\xi. \quad (3.148)$$

Si existiesen varias reacciones simultáneas (subíndice j) esta variación sería:

$$dn_i = \sum_j v_{i,j} d\xi_j. \quad (3.149)$$

La velocidad de reacción se define como:

$$Z = \frac{d\xi}{dt}. \quad (3.150)$$

⁴Para compactar la notación, en los sumatorios los coeficientes estequiométricos se se les introduce el siguiente convenio de signos: positivo si es producto, negativo si es reactivo. Así, la expresión dada por la Eq. 3.142 puede escribirse como:

$$Q = \sum v_i H_i = \Delta H.$$

Teniendo en cuenta esto, la variación del número de moles en el tiempo es:

$$\frac{dn_i}{dt} = v_i \frac{d\xi}{dt} = v_i Z. \quad (3.151)$$

Si existiesen varias reacciones simultáneas entonces la expresión sería:

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_j v_{i,j} Z_j. \quad (3.152)$$

La función de Gibbs para una mezcla reactiva a una temperatura y presión uniforme es:

$$G = \sum n_i \mu_i = \sum (n_{0,i} + v_i \xi) \mu_i. \quad (3.153)$$

La variación de G según el grado de avance es:

$$dG = \sum \mu_i dn_i = \sum (v_i \mu_i) d\xi. \quad (3.154)$$

Si se define la afinidad química, A , como el siguiente cociente:

$$A = - \left(\frac{dG}{d\xi} \right)_{T,p} = - \sum v_i \mu_i, \quad (3.155)$$

Entonces los potenciales termodinámicos de un sistema multiespecie pueden expresarse como:

$$dU = TdS - pdV + \sum \mu_i dn_i = TdS - pdV - Ad\xi, \quad (3.156)$$

$$dH = TdS + Vdp - Ad\xi, \quad (3.157)$$

$$dF = -SdT - pdV - Ad\xi, \quad (3.158)$$

$$dG = -SdT + Vdp - Ad\xi. \quad (3.159)$$

La afinidad proporciona una medida de la espontaneidad de la reacción. Esta, se verificará espontáneamente hacia la derecha ($d\xi > 0$) si $A > 0$. En el caso de que la reacción sea hacia la izquierda ($d\xi < 0$), la reacción será espontánea si $A < 0$. Se llega al equilibrio cuando $A = 0$.

En una reacción en la que los reactivos y los productos están en estado gaseoso dentro de las condiciones de idealidad, el potencial químico puede expresarse según se vio en la §3.4.4 por la Eq. 3.54. La afinidad química en ese caso es:

$$A = - \sum v_i \mu_i = - \sum v_i (\mu_i^\circ + RT \ln p_i), \quad (3.160)$$

$$\sum v_i \mu_i = \sum v_i \mu_i^\circ + RT \sum v_i \ln p_i. \quad (3.161)$$

Se puede definir la entalpía libre de referencia como:

$$\Delta G^\circ = \sum v_i \mu_i^\circ. \quad (3.162)$$

En el equilibrio químico se debe cumplir que $A = 0$, entonces:

$$0 = \Delta G^\circ + RT \sum v_i \ln p_i. \quad (3.163)$$

Si se define la constante de equilibrio como:

$$k_p^{eq} = \frac{(p'_1)^{v'_1} (p'_2)^{v'_2} \dots}{(p_1)^{v_1} (p_2)^{v_2} \dots}, \quad (3.164)$$

donde los coeficientes estequiométricos se usan sin el signo. Esta expresión define la ley de acción de masas. Con esa notación, la Eq. 3.163 toma la forma:

$$0 = \Delta G^\circ + RT \ln k_p^{eq}. \quad (3.165)$$

Despejando de esta ecuación, la constante de equilibrio puede expresarse también como:

$$k_p^{eq} = e^{-\Delta G^\circ / RT}. \quad (3.166)$$

En ocasiones interesa que la ley de acción de masas esté referida a las concentraciones molares. En un gas ideal:

$$C_{x,i} = \frac{n_i}{V} = \frac{p_i}{RT}. \quad (3.167)$$

Si se sustituye el el valor de la presión parcial se tiene:

$$k_p^{eq} = \prod p_i^{v_i} = \prod (RT)^{v_i} (C_{x,i})^{v_i} = (RT)^{\Delta v} \prod (C_{x,i})^{v_i} = (RT)^{\Delta v} k_C^{eq}. \quad (3.168)$$

Donde $\Delta v = \sum v_i$ es la variación total del número de moles del sistema con el convenio de signos. Aplicando la condición de equilibrio químico:

$$0 = \Delta G^\circ + RT \ln k_p^{eq} = \Delta G^\circ + RT \ln k_C^{eq} + \Delta v RT \ln RT. \quad (3.169)$$

Si incorporamos este último término a la entalpía libre de referencia entonces se obtiene una expresión análoga a la Eq. 3.166:

$$k_C^{eq} = e^{-\Delta G^\circ / RT} = \frac{(C'_{x,1})^{v'_1} (C'_{x,2})^{v'_2} \dots}{(C_{x,1})^{v_1} (C_{x,2})^{v_2} \dots}. \quad (3.170)$$

La entalpía libre por definición (v. Eq. 3.11) puede expresarse como:

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ. \quad (3.171)$$

Entonces la Eq. 3.170 puede expresarse como:

$$k_C^{eq} = e^{\Delta S^\circ / R} e^{-\Delta H^\circ / RT}. \quad (3.172)$$

Para un intervalo reducido de temperaturas, el calor de reacción, ΔH° , y la entropía de la reacción, ΔS° , puede considerarse contantes. Entonces, la ecuación de Arrhenius

que expresaba experimentalmente la dependencia de la constante de cinética de una reacción química con respecto a la temperatura a la que se lleva a cabo esa reacción se hace válida. Esta, se expresa de la siguiente forma:

$$k_{arr} = k_{arr,0} e^{-E_{ac}/RT}, \quad (3.173)$$

donde $k_{arr,0}$ es el factor de pre-exponencial y E_{ac} es la energía de activación de la reacción necesaria para que esta se lleve a cabo.

Las constantes de equilibrio indican dónde alcanza el equilibrio una reacción que puede ir en los dos sentidos. Esto es, cuando las velocidades de la reacción directa (de izquierda a derecha) e inversa (de derecha a izquierda) se igualan. Las velocidades de reacción directa, $Z_{C,dir}$, e inversa, $Z_{C,inv}$, se pueden expresar como:

$$Z_{C,dir} = k_{C,dir} (C_{x,1})^{v_1} (C_{x,2})^{v_2} \dots, \quad (3.174)$$

$$Z_{C,inv} = k_{C,inv} (C'_{x,1})^{v'_1} (C'_{x,2})^{v'_2} \dots \quad (3.175)$$

Que al igualarlas se obtiene la expresión dada por la Eq. 3.170:

$$k_C^{eq} = \frac{k_{C,inv}}{k_{C,dir}} = \frac{(C'_{x,1})^{v'_1} (C'_{x,2})^{v'_2} \dots}{(C_{x,1})^{v_1} (C_{x,2})^{v_2} \dots}. \quad (3.176)$$

Para la reacción dada por la Eq. 3.146, la variación de la concentración en el tiempo del elemento A_i viene dada por la siguiente ecuación:

$$\frac{dC_{x,i}}{dt} = v_i (Z_{C,inv} - Z_{C,dir}). \quad (3.177)$$

Si la reacción se produce en un recinto a volumen constante (e.g. un reactor), entonces, puede ser más práctico expresar la variación del número de moles con el tiempo. Para ello, se debe multiplicar la Eq. 3.177 por el volumen:

$$\frac{dn_i}{dt} = v_i (Z_{C,inv} - Z_{C,dir}) V. \quad (3.178)$$

Introduciendo este volumen y los del resto de concentraciones de las Eq. 3.174 y 3.175 en las constantes de cinéticas $k_{dir,n}$ y $k_{inv,n}$ las velocidades de reacción pueden escribirse como:

$$Z_{dir} = k_{n,dir} (n_1)^{v_1} (n_2)^{v_2} \dots, \quad (3.179)$$

$$Z_{inv} = k_{n,inv} (n'_1)^{v'_1} (n'_2)^{v'_2} \dots \quad (3.180)$$

Y la Eq. 3.178 se expresa de forma más elegante como:

$$\frac{dn_i}{dt} = v_i (Z_{inv} - Z_{dir}). \quad (3.181)$$

3.10. Resumen

Este capítulo es una introducción a la termodinámica química. Pretende mostrar las claves para entender los desarrollos de los modelos de esta tesis. Comienza con una breve introducción delimitando la disciplina y estableciendo la terminología usada a lo largo del capítulo. Luego, se enuncian los principios de la termodinámica que constituyen la base sobre la que se sustenta la ciencia. Se continúa con una breve exposición de las ecuaciones termodinámicas más utilizadas como son los potenciales termodinámicos, las ecuaciones de estado (haciendo especial hincapié en el comportamiento de los gases ideales) y los balances de energía y masa. Los mecanismos de transferencia de calor: conducción, convección y radiación son presentados. Se introduce la termodinámica de cambios de estado y casos prácticos como condensación y evaporación o absorción y desorción, detallándolos ya que son la base de los fenómenos aquí tratados. El capítulo finaliza con una introducción a la termodinámica de reacciones químicas.

Capítulo 4

Modelado y simulación de una planta de generación de hidrógeno

Here comes the sun

Here comes the sun

And I say

*It's all right*¹

The Beatles

(Letra de George Harrison)

4.1. Introducción

En la búsqueda de fuentes de energías alternativas limpias, las tecnologías relacionadas con hidrógeno han adquirido una buena posición debido a su potencial para reemplazar los combustibles fósiles en numerosas aplicaciones. Este es el motivo por el cual la investigación en nuevos métodos de producción de hidrógeno se han intensificado en los últimos años (Pregger et al., 2009).

Parece razonable que el agua, compuesta por dos átomos de hidrógeno y uno de oxígeno, por su abundancia y asequibilidad sea la materia prima ideal para producir hidrógeno.



Sin embargo, la ruptura de los enlaces atómicos en la molécula del agua (v. Eq. 4.1) usando solo calor es un proceso que requiere temperaturas muy altas (cercasas a los 2500 K) para lograr un grado significativo de disociación. Además, precisa de una técnica para separar la mezcla resultante dada la alta afinidad de recombinación y que en casos de altas concentraciones es altamente explosiva (Steinfeld, 2005).

En los últimos años se han desarrollado numerosos procesos termoquímicos para la generación de hidrógeno que usan la energía solar concentrada como fuente de energía

¹trad.: Aquí viene el sol. Aquí viene el sol. Y yo digo. Está bien.

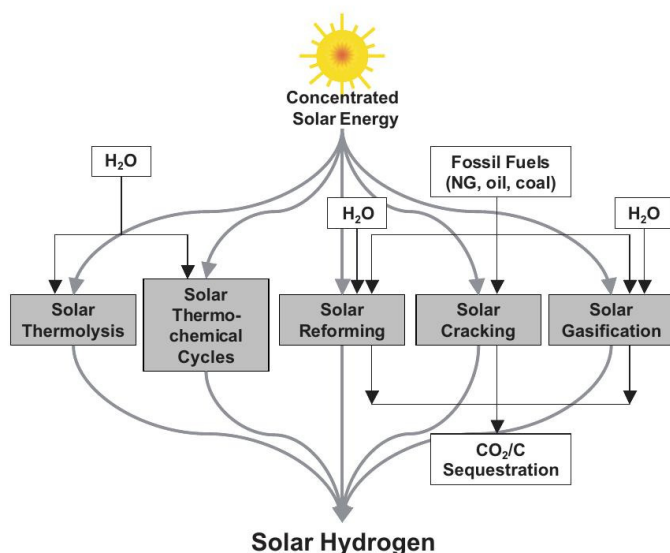


Figura 4.1: Cinco caminos termoquímicos para la producción de hidrógeno solar (Steinfeld, 2005)

primaria, como puede verse en la Fig. 4.1. El *solar reforming*, el *solar cracking* y la gasificación solar usan combustibles fósiles como reactivos (Steinfeld, 2005). Los ciclos termoquímicos de ruptura del agua son una de las técnicas más prometedoras para lograr la disociación evitando los problemas de la separación y las altas temperaturas. Este tipo de sistemas reduce los requerimientos de temperatura permitiendo ser alcanzables con sistemas de energía solar concentrada. Además, al ser sistemas cíclicos, la generación de hidrógeno y oxígeno se produce en pasos diferentes, evitando complejos mecanismos para la separación de los productos. Numerosos estudios se han publicado acerca del catalizador usado, de la configuración multi-paso y del diseño del reactor (Steinfeld, 2005; Serpone et al., 1992; Funk, 2001; Kodama y Gokon, 2007).

Los sistemas redox de dos pasos son uno de los ciclos termoquímicos de ruptura del agua más eficientes (Steinfeld, 2005). La idea es sencilla, un óxido metálico que es reducido, i.e. pierde un oxígeno de la capa superficial, tiene una gran afinidad para absorber oxígeno del agua. Los sistemas redox de dos pasos se aprovechan de esta capacidad. En el primer paso, el óxido metálico, MO , mediante el uso de calor es reducido, M , liberando el oxígeno (v. Eq. 4.2). En el segundo paso, ya con la presencia de agua, se produce la disociación. El óxido reducido atrapa el oxígeno perdido en la anterior etapa del agua y libera el hidrógeno (v. Eq. 4.3).



El proyecto Hydrosol ha desarrollado y demostrado la producción continua de hidrógeno a partir del agua con energía solar basándose en estas ideas (Roeb et al., 2009). El objetivo del proyecto Hydrosol II fue desarrollar un estudio de viabilidad para una planta de producción a gran escala. Como resultado de este estudio se construyó en el CIEMAT-Plataforma Solar de Almería una planta piloto (Roeb et al., 2011). El proyecto Hydrosol 3D estudió la viabilidad de una planta a escala comercial. Los datos contenidos en esta Tesis pertenecen a este último proyecto.

Roeb et al. (2009) desarrollaron un modelo del primer reactor a escala de laboratorio que se construyó en el marco del proyecto Hydrosol. Este modelo permitía la predicción dinámica del comportamiento térmico usando un método de cálculo de volúmenes finitos radiales para los balances de masa y energía. Fue validado con datos experimentales usando un horno solar para concentrar la irradiancia solar².

Un nuevo modelo de un sistema de producción de hidrógeno fue presentado por Säck et al. (2011). Este modelo fue desarrollado modularmente en tres bloques: una herramienta de simulación de la distribución de potencia, un modelo térmico y un modelo para la producción de hidrógeno. Los tres se conectan a un software de control que maneja las comunicaciones entre ellos, las entradas y las salidas del sistema, usando una interfaz en LabVIEW. La herramienta de simulación de la distribución de potencia es un código modular de trazado de rayos desarrollado en lenguaje C y lenguaje de ensamblador embebido en una interfaz LabVIEW. Simula la distribución de potencia mediante el cálculo del número de rayos que alcanza la apertura del reactor por unidad de área. Para ello, usa medidas de la deflectometría de algunos heliostatos representativos. La deflectometría evalúa la curvatura local de los espejos mediante el estudio de las deformaciones en patrones de líneas reflejadas en la superficie de los heliostatos (Belhomme et al., 2009). Los modelos de temperatura y producción de hidrógeno están programados en módulos de simulación de LabVIEW. El modelo de producción de hidrógeno usa un *Shrinking Core Model* que ha sido ajustado con datos empíricos obtenidos por Neises et al. (2010).

En este capítulo se describen los trabajos de M&S realizados para una planta de generación de hidrógeno del tipo Hydrosol II. Se ha desarrollado un modelo dinámico siguiendo una metodología de modelado modular y jerárquica, la cual divide el modelo en dos submodelos: el campo de heliostatos y la planta de procesamiento. El objetivo de este modelo es ser usado como herramienta para la automatización de la producción de hidrógeno en la planta. Los requerimientos de velocidad de ejecución y precisión lo hacen diferente al resto de modelos publicados hasta la fecha. Es un modelo no lineal, basado en primeros principios y orientado a objetos. Está implementado en el lenguaje de modelado Modelica. La disposición acausal de los submodelos ha permitido ampliar el rango de aplicabilidad del modelo permitiendo su uso con dos configuraciones causales diferentes. El modelo del campo solar y el comportamiento térmico del modelo de la planta de procesamiento han sido calibrados y validados con datos experimentales

²El horno solar tiene una distribución menos uniforme en el absorbedor que los sistemas de recepción central, como el usado en la planta piloto.

obtenidos en la planta piloto.

Hasta ahora, la estrategia de operación del campo de heliostatos era manual, basada en la experiencia del operador (de la Calle et al., 2012). Aunque esta estrategia es suficiente para operar en condiciones nominales, automatizarla de modo que se determine qué heliostato debe estar enfocado en el receptor para alcanzar la temperatura deseada permite un mejor tratamiento de las perturbaciones, e.g. irradiancia solar variable, y una reducción de los tiempos de transición entre ciclos mejorando la producción continua de hidrógeno. Los trabajos realizados para esta sección han permitido mejorar la operación de la planta (Roca et al., 2013, 2014).

4.2. Descripción del sistema

La planta piloto para la producción de hidrógeno solar del proyecto Hydrosol II fue instalada en el CIEMAT-Plataforma Solar de Almería (Roeb et al., 2011). Con una potencia máxima de $100 \text{ kW}_{\text{th}}$ es capaz de producir hidrógeno de forma cuasi-continua. Para ello, dos reactores iguales dispuestos en paralelo alternan ciclos de producción de hidrógeno-oxígeno. El absorbedor del reactor está compuesto por 9 monolitos apalados cada uno con unas dimensiones de $0.146 \text{ m} \times 0.146 \text{ m} \times 0.06 \text{ m}$, que están ensamblados formando un único módulo de geometría cuadrada. Los monolitos están compuestos por carburo de silicio (SiC), un material que soporta las temperaturas que se alcanzan en el reactor. Sobre ellos está impresa una lámina del óxido metálico que actúa como catalizador de la reacción.

Los reactores están instalados a media altura en la torre solar SSPS-CRS (v. Fig. 4.2a). El campo solar está formado por 93 heliostatos Martin Marietta. Cada heliostato posee 12 facetas de 3.3 m^2 , formando una superficie de aproximadamente 40 m^2 . Cinco distancias focales son suficientes para cubrir todo el campo: 67 m, 97 m, 115 m, 136 m y 162 m (Säck et al., 2011). Con una irradiancia solar directa típica de 950 W/m^2 , el campo solar proporciona una potencia $2.7 \text{ MW}_{\text{th}}$ y una densidad de potencia pico de 2.5 MW/m^2 . Aproximadamente, el 99 % de la potencia es acumulada en una circunferencia de 2.5 m de diámetro, y el 90 % en una de 1.8 m. La apertura de cada reactor es de $0.5 \text{ m} \times 0.5 \text{ m}$ (v. Fig. 4.2b), por tanto, gran parte de la potencia concentrada no alcanza el absorbedor. La que incide sobre la apertura, tiene una distribución de potencia casi uniforme ya que es la parte más cercana al pico de potencia.

El objetivo principal del proyecto es lograr una producción constante de hidrógeno. Para ello, se dispone de un sistema redox de dos pasos. La reacción de reducción (v. Eq. 4.2) es endotérmica y se produce a una temperatura de operación $T_{\text{reg}} = 1200 \text{ }^\circ\text{C}$. La reacción de disociación del agua (v. Eq. 4.3) es exotérmica y su temperatura de operación es de $T_{\text{gen}} = 800 \text{ }^\circ\text{C}$. Por tanto, dos se requieren dos valores de potencia diferentes, uno para cada ciclo.

Aunque el ciclo alcanzaría mayor eficiencia teniendo unas temperaturas de operación mayores, la degradación de la lámina de óxido lo impide. Un problema aún no resuelto con este tipo de ciclos es que el estrés térmico al que está sometido el material



(a) Vista general de la instalación



(b) Reactores (Roeb et al., 2011)



(c) Monolito (Neises et al., 2010)

Figura 4.2: Detalle de las instalaciones de la planta piloto Hydrosol II

lo desgasta limitando la planta a un número de ciclos determinado. La Fig. 4.2c muestra la degradación de un monolito tras 58 ciclos. A temperaturas superiores a 1200 °C se ha observado que el SiC reacciona con el óxido (Neises et al., 2010).

Para que las reacciones tengan lugar, se precisa de una atmósfera gaseosa, ya que éstas se producen en la interfase sólido-gas. El gas fluye dentro de los reactores a través de los canales de los monolitos. Para el ciclo de regeneración (reducción), se emplea nitrógeno; para la generación (disociación), se emplea una mezcla de vapor de agua y nitrógeno. El nitrógeno es inerte a las reacciones, y se utiliza para expulsar los gases de reacción.

La dinámica de la planta se muestra en el diagrama de la Fig. 4.3. Los dos reac-

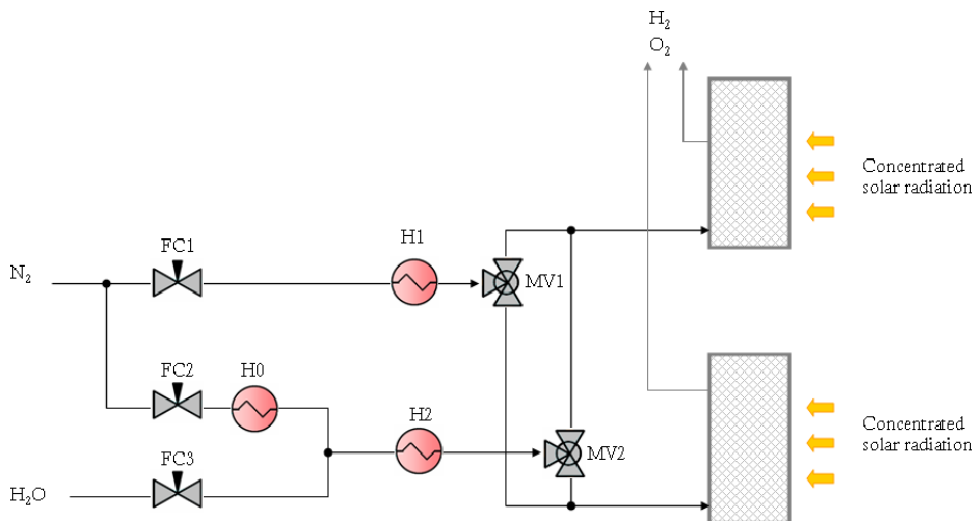


Figura 4.3: Diagrama de flujos de la planta piloto Hydrosol II

tores de la planta trabajan en paralelo. Las reacciones se alternan de un reactor a otro, mientras uno está en el ciclo de generación el otro está en el de regeneración. Cuando las reacciones se agotan los ciclos se conmutan. Un sistema de válvulas (MV1 y MV2) permite que cada reactor reciba un flujo de nitrógeno o de mezcla de agua y nitrógeno, según corresponda con el ciclo. El nitrógeno es precalentado con los calentadores H0 y H1, dependiendo de la línea seguida. La mezcla de agua y nitrógeno también es precalentada por el calentador H2. Las válvulas FC1, FC2 y FC3 permiten controlar el caudal y la concentración de los flujos de gas de entrada a los reactores. Para mantener los reactores a su temperatura de operación, y por tanto que las reacciones puedan producirse, es necesaria una cantidad precisa de potencia térmica. Esta proviene del campo de heliostatos que concentra la irradiancia solar en la apertura de los reactores.

4.3. Modelado dinámico

Los modelos descritos en esta sección siguen una metodología de modelado orientada a objetos, modular y jerárquica (v. §2.2). Están implementados en Modelica 2.2.1 (Modelica Association, 2007). El modelo de la planta fue diseñado según describe la Fig. 4.4. Se trata de un modelo de uno de los reactores de la planta piloto Hydrosol II. Este se divide en dos submodelos interconectados, el modelo del campo de heliostatos y el modelo de la planta de procesamiento. A su vez, el modelo de la planta de procesamiento se divide en cuatro submodelos interconectados: reactor, reacción, fuente y sumidero. Aunque la causalidad del modelo fue diseñada según especifican la flechas de la figura, esta puede modificarse según se verá en la §4.3.2.3.

El objetivo de los modelos aquí desarrollados es predecir el comportamiento de

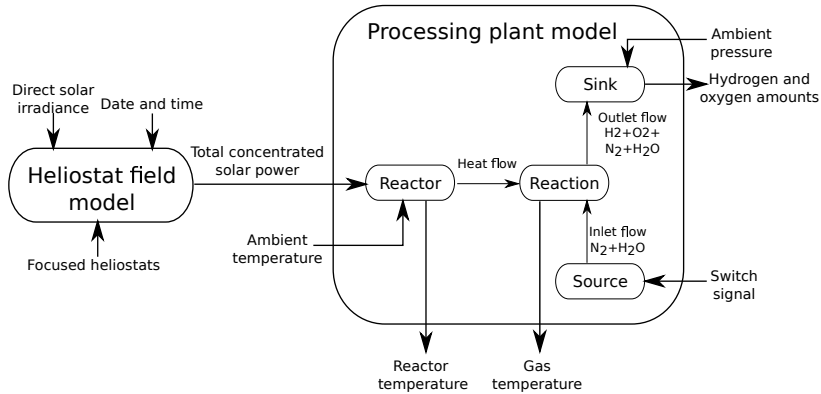


Figura 4.4: Esquema de modelado

la planta, probar diferentes condiciones de operación, probar diferentes estrategias de control y/o usarse en control. Esto hace que se exijan unos requisitos de precisión y esfuerzo computacional específicos: el modelo ha de poder ser usado en aplicaciones de tiempo real aunque esto suponga una pérdida de precisión. Por ello, los modelos intentan minimizar el número de ecuaciones para reducir el esfuerzo computacional tanto como sea posible, siempre y cuando se conserven los principios esenciales.

4.3.1. Modelo del campo de heliostatos

Los heliostatos reflejan la radiación solar concentrándola en la apertura del receptor. Existen numerosos algoritmos que permiten calcular la potencia concentrada y su distribución en un receptor central. Como explica [García et al. \(2008\)](#), hay dos tipos de algoritmos para calcular la potencia. El primer tipo correspondería a los que se emplean en el diseño de plantas solares con el fin de maximizar la energía solar recogida, mientras que el segundo tipo corresponde a los que se emplean para evaluar la potencia reflejada por los heliostatos al receptor. Aunque estos últimos ofrecen gran precisión, los modelos numéricos que utilizan suelen ser demasiado complejos, y su esfuerzo computacional es demasiado elevado para que puedan ser usados en aplicaciones de tiempo real. Recientemente, se ha desarrollado un nuevo código llamado STRAL ([Belhomme et al., 2009](#)) para calcular la distribución de potencia, que reduce en 6 el tiempo de computación necesario comparado con el código MIRVAL ([Leary y Hankins, 1979](#)). Este, consigue resultados muy precisos en poco tiempo, sin embargo, no está claro que pueda usarse en aplicaciones de tiempo real.

Para garantizar una simulación en tiempo real, un modelo simplificado del campo de heliostatos fue desarrollado para estimar la potencia solar concentrada en la instalación Hydrosol II. El diseño del modelo se muestra en la Fig. 4.5. Las entradas son: la irradiancia solar directa, la fecha y la hora, y un vector que indica qué heliostatos están enfocados. La salida del modelo es la potencia total concentrada en uno de los reactores. Para reducir la complejidad, el modelo asume las siguientes hipótesis:

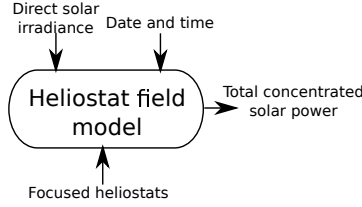


Figura 4.5: Esquema del modelo del campo de heliostatos

- Los errores de seguimiento son despreciados.
- La densidad de potencia que alcanza el absorbedor es uniforme.
- Los errores de canteo, bloqueo y sombreado son asumidos como constantes.

Debido a que la apertura del reactor es pequeña comparada con la varianza de la distribución gaussiana de potencia (v. §4.2), solo una parte cercana al pico logra cruzarla. La parte que logra pasar es la más constante de la distribución. La varianza de la distribución gaussiana de potencia de los campos de heliostatos es mayor que la de los hornos solares debido en parte errores en el enfoque.

La aportación del k -ésimo heliostato en la potencia solar concentrada que alcanza el receptor, P_k , se puede aproximar por:

$$P_k = I \cdot \cos(\theta_{ik}) \cdot A_{s,h} \cdot \kappa \cdot (1 - \Lambda). \quad (4.4)$$

Se define el vector booleano \mathbf{b} como aquel donde cada elemento vale 1 o 0 dependiendo de si el heliostato está enfocado o no. La potencia total concentrada en el receptor, P , es:

$$P = \sum_{k=1}^{N_T} P_k \mathbf{b}_k, \quad (4.5)$$

donde N_T es el número de heliostatos del campo solar, I es la irradiancia solar directa, θ_i es el ángulo solar de incidencia en el plano del heliostato, $A_{s,h}$ es el área del heliostato, κ es el parámetro global de los errores (canteo, bloqueo, sombreado, eficiencia óptica) y Λ es el factor de atenuación atmosférica. El ángulo de incidencia para el heliostato k , θ_{ik} , depende de la posición del Sol, \mathbf{x}_{sun} , del ángulo acimutal, θ_{ak} , y de elevación de cada heliostato, θ_{ek} :

$$\theta_{ik} = f(\mathbf{x}_{sun}, \theta_{ak}, \theta_{ek}). \quad (4.6)$$

El parámetro de ajuste κ se asume único y constante para todos los heliostatos y necesita ser calibrado. El factor de atenuación atmosférica se calcula con la correlación para un día claro que se emplea en el código MIRVAL (Leary y Hankins, 1979):

$$\Lambda = 10^{-4}(67,9 + 11,76 \cdot 10^{-2} l_{hr} - 1,97 \cdot 10^{-2} l_{hr}^2), \quad (4.7)$$

donde l_{hr} es la distancia entre el heliostato y el receptor, y que debe ser menor que un kilómetro.

Para que el modelo sea lo más simple posible, se desprecian los errores de seguimiento y se asume que todos los rayos reflejados por el heliostato son reflejados desde el centro de masas de la superficie del heliostato al centro del receptor. Los rayos que caen fuera de la apertura del reactor son asumidos por el parámetro κ . Además, la densidad de potencia es asumida como uniforme en el plano del receptor. Por tanto, θ_{ik} es una función de la posición del Sol, de las coordenadas del heliostato k , \mathbf{x}_{hk} , y de la posición del receptor, \mathbf{x}_r :

$$\theta_{ik} = f(\mathbf{x}_{sun}, \mathbf{x}_{hk}, \mathbf{x}_r) \quad (4.8)$$

El algoritmo propuesto en Blanco-Muriel et al. (2001) es usado para determinar las coordenadas del Sol.

4.3.2. Modelo de la planta de procesamiento

Atendiendo a razones de funcionalidad, se presentan tres diseños del modelo de la planta de procesamiento: uno para predecir el comportamiento térmico de la planta, otro para predecir el comportamiento térmico-químico y otro donde se ha invertido la causalidad del modelo. Los tres diseños que se presentan se componen de los mismos elementos: reactor, reacción, fuente y sumidero. Sin embargo, la funcionalidad de los mismos cambia dependiendo del diseño. La implementación orientada a objetos ha permitido reutilizar el código de todos ellos.

4.3.2.1. Diseño térmico

El diseño térmico del modelo se muestra en la Fig. 4.6. El objetivo del modelo es reproducir únicamente su comportamiento térmico (temperatura del reactor y temperatura del gas) desligándolo de su comportamiento químico. Para ello se han desarrollado los siguientes submodelos.

Fuente. El sistema de canalización, mezcla y precalentamiento del gas (N_2 - H_2O) proporciona a los reactores un caudal constante a una temperatura fija de 200 °C. La com-

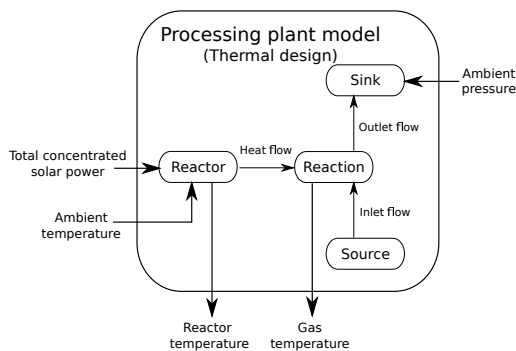


Figura 4.6: Esquema del modelo de la planta de procesamiento (diseño térmico)

posición del mismo también es fija dependiendo del ciclo químico de los reactores. Una señal de conmutación permite intercambiar esta composición. Para el modelo térmico, se obvia este mecanismo de conmutación. No se especifica el tipo de gas que entra y sale del reactor. Un conector propio permite la comunicación con el modelo de la reacción. La información que se transmite es el flujo másico y la temperatura del gas, que son asignados como parámetros del modelo.

Reactor. El reactor ha sido modelado como una masa de metal que recibe toda la potencia concentrada por el campo de heliostatos. Este a su vez, intercambia energía con el ambiente mediante procesos radiativos y convectivos. También intercambia energía con el gas que circula dentro del reactor mediante procesos convectivos. La conducción en el reactor es despreciada debido a su escasa contribución. La masa y el calor específico de este bloque, m_{react} y c_{react} , son asumidos como parámetros constantes que deben ser calibrados. Los balances de energía son los siguientes:

$$\begin{aligned} U_{react} &= m_{react}c_{p,react}T_{react}, \\ \dot{U}_{react} &= P - \dot{Q}_{conv,gas} - \dot{Q}_{rad,env} - \dot{Q}_{conv,env}, \end{aligned} \quad (4.9)$$

donde U_{react} es la energía interna del reactor, y T_{react} la temperatura del reactor. P es la potencia solar total concentrada proveniente del campo de heliostatos, $\dot{Q}_{conv,gas}$ el flujo de calor transferido con el gas y $\dot{Q}_{conv,env}$ y $\dot{Q}_{rad,env}$ son las pérdidas de calor entre el reactor y el ambiente, expresados como:

$$\dot{Q}_{conv,gas} = \alpha_{conv,gas}^A (T_{react} - T_{gas}), \quad (4.10)$$

$$\dot{Q}_{conv,env} = \alpha_{conv,env}^A (T_{react} - T_{env}), \quad (4.11)$$

$$\dot{Q}_{rad,env} = \alpha_{rad,env}^A (T_{react}^4 - T_{gas}^4). \quad (4.12)$$

El coeficiente de transferencia de calor por el área de contacto de cada una de las transferencias, α^A , es considerado constante y es un parámetro a calibrar.

La comunicación con el modelo del campo de heliostatos y de la reacción se realiza mediante el conector *HeatPort* de la MSL que transmite flujo de calor y temperatura. La temperatura ambiente también se recibe por un conector de este tipo.

Reacción. El balance de energía dentro del reactor es solo modelado por la mezcla de gases. Si se desprecia la energía consumida por la reacción, la ecuación es un balance entre el flujo de calor convectivo recibido, el trabajo realizado por el gas y el balance negativo dado por la entrada fría y la salida caliente del gas, que puede expresarse como:

$$\begin{aligned} U_{gas} &= m_{gas}c_{p,gas}T_{gas} - p_{gas}V, \\ \dot{U}_{gas} &= \dot{Q}_{conv,gas} + \dot{m}_{gas,in}c_{gas}T_{gas,in} - \dot{m}_{gas,out}c_{gas}T_{gas}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

La masa de gas, m_{gas} , se calcula con un sencillo balance másico:

$$\dot{m}_{gas} = \dot{m}_{gas,in} - \dot{m}_{gas,out}, \quad (4.14)$$

donde $\dot{m}_{gas,in}$ y $\dot{m}_{gas,out}$ son los flujos másicos de entrada-salida. La Eq. 4.13 permite calcular la temperatura del gas, T_{gas} . El volumen, V , y el calor específico del gas, $c_{p,gas}$ son parámetros del sistema. Un solo calor específico es considerado porque incluir los de cada uno de los gases de la mezcla añade una complejidad computacional innecesaria al modelo. Esto es posible porque los calores específicos de cada uno de los gases son del mismo orden de magnitud y la masa de gas dentro del reactor es pequeña. Este calor específico fue calculado considerando el coeficiente de dilatación adiabática $\gamma=1.4$ con la Eq. 3.45. El peso molecular del nitrógeno fue el utilizado en los cálculos molares, por ser el gas más abundante en el reactor.

La presión del reactor, p_{gas} , es calculada con una ecuación de estado (v. §3.4.4). En una primera versión se empleó la ecuación de Van der Waals (v. Eq. 3.55) calibrada para el caso concreto, porque se esperaba una mejor respuesta del modelo que con la ecuación de gases ideales (v. Eq. 3.38) para altas temperaturas. Sin embargo, posteriores análisis han demostrado que la diferencia en la respuesta del modelo es inapreciable.

Los flujos másicos de entrada y salida así como sus temperaturas son transmitidos a la fuente y al sumidero por un conector diseñado para tal fin, que además también transmite la presión del gas. La comunicación con el modelo del reactor se hace a través de un conector *HeatPort*.

Sumidero. El gas abandona los reactores a través de un orificio que tras su paso por una tubería es liberado a la atmósfera. Para modelar el flujo de salida, se asume el principio de Bernoulli ya que es válido para fluidos compresibles que se mueven a bajas velocidades. Las Eq. 3.35 y 3.36 permiten calcular el flujo másico de salida. Como el coeficiente de descarga y el área del orificio solo aparecen en una única ecuación, han sido calibrados como un único parámetro.

4.3.2.2. Diseño químico

La utilización de una metodología de modelado orientada a objetos permite heredar los modelos de la §4.3.2.1 y solo añadir al código nuevas ecuaciones que describan el comportamiento químico de la planta. La Fig. 4.7 que representa el esquema del modelado, revela su similitud con el mostrado en la Fig. 4.6.

Fuente. La entrada de una señal booleana de conmutación permite saber en qué ciclo se encuentra la planta, y por tanto, cuál debe ser la composición de gas de la entrada. Esta es fija para cada ciclo y puede ser cambiada paramétricamente. Un nuevo conector, *gas*, comunica además de flujo másico, temperatura y presión de la composición química con un vector de fracciones másicas de los gases que intervienen en la reacción: N_2 , H_2O , H_2 y O_2 .

Reactor. El modelo del reactor es el mismo que en el diseño térmico (v. §4.3.2.1).

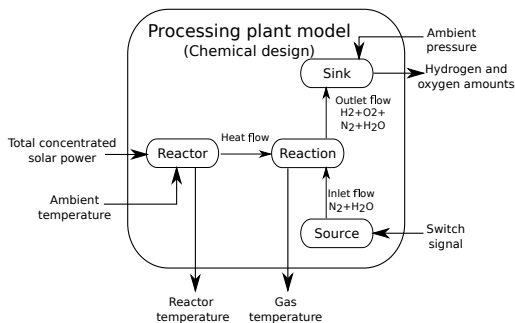


Figura 4.7: Esquema del modelo de la planta de procesamiento (diseño químico)

Reacción. El balance energético es el mismo que el expresado por la Eq. 4.13, donde se sigue despreciando el consumo de energía por parte de las reacciones. El calor específico también es un parámetro a calibrar.

Para calcular el balance másico adecuadamente, las reacciones que tienen lugar en el reactor deben ser incluidas. Es por tanto, más apropiado definir un sistema de ecuaciones con los balances molares, donde estos son calculados de acuerdo a la cinética de las reacciones (cf. §3.9). Se asumen las velocidades de reacción que se incluyen en el trabajo de [Agrafiotis et al. \(2007\)](#).

$$Z_{gen} = k_{arr,gen} n_M n_{H_2O}, \quad (4.15)$$

$$Z_{reg} = k_{arr,reg} n_{MO}, \quad (4.16)$$

donde las constantes cinéticas, $k_{arr,gen}$ y $k_{arr,reg}$, tienen una dependencia con la temperatura expresada por la ecuación de Arrhenius (v. Eq. 3.173). Dado que la reacción se produce sobre la superficie de los monolitos, como temperatura de la reacción se toma la calculada con el modelo del reactor. n_M y n_{MO} no representan el número de moles total de estos elementos en los reactores, óxido metálico reducido y óxido metálico respectivamente, sino solo los disponibles. Únicamente una pequeña fracción del óxido sobre la superficie de los monolitos puede ser reducida. Esta cantidad se asume constante y debe ser calibrada. Sin embargo, lo cierto es que los experimentos han demostrado un deterioro del óxido que reduce esta capacidad con el tiempo (v. §4.2) pero este hecho no se ha tenido en cuenta en el modelo.

Con las velocidades de reacciones dadas por las Eq. 4.15 y 4.16, el balance molar dentro de los reactores es el siguiente:

$$\dot{n}_M = Z_{reg} - Z_{gen} \quad (4.17)$$

$$\dot{n}_{H_2O} = -Z_{gen} + \dot{n}_{H_2O,in} - \dot{n}_{H_2O,out} \quad (4.18)$$

$$\dot{n}_{MO} = Z_{gen} - Z_{reg} \quad (4.19)$$

$$\dot{n}_{H_2} = Z_{gen} - \dot{n}_{H_2,out} \quad (4.20)$$

$$\dot{n}_{O_2} = Z_{reg} - \dot{n}_{O_2,out} \quad (4.21)$$

$$\dot{n}_{N_2} = \dot{n}_{N_2,in} - \dot{n}_{N_2,out} \quad (4.22)$$

Para el balance energético o para la ecuación de estado, el número de moles en el reactor es la suma de las especies gaseosas del mismo.

Sumidero. Al igual que en el diseño térmico, este modelo solo sirve para modelar el flujo másico de salida. La diferencia con el desarrollado para el modelo térmico es que éste usa un conector de tipo *gas* que permite conocer la composición de salida del gas.

4.3.2.3. Diseño inverso

Una de las mayores ventajas de trabajar con una metodología de modelado orientada a objetos es la implementación acausal de los modelos. En numerosas ocasiones, se encuentran diferentes aplicaciones a los modelos que para los que fueron diseñados, y uno de los mayores escollos que suele surgir es el problema de la causalidad computacional de los mismos, porque lo que antes eran entradas ahora son salidas. Una implementación acausal evita reescribir todo el código, y que sea el entorno de simulación el que se encargue de resolver el nuevo modelo. Pero no siempre este es capaz de resolverlo. Uno de los motivos es que el nuevo diseño del modelo exija un cambio de las variables de estado, y este, no sea posible. Cuando la nueva entrada es una de las variables de estado del sistema antiguo salta un mensaje de error, ya que los entornos de simulación a menudo no están preparados para integrar una entrada. Este problema no es exclusivo de la inversión de modelos como se verá más adelante en la §5.3.1.7.

En esta tesis, se han propuesto dos soluciones diferentes para resolver este problema. Una de ellas es calcular la derivada de la entrada fuera de línea (*offline*). Un método de derivación por diferencias finitas permite calcular esta derivada para todos los puntos de los que se han tomado datos menos para el primero, al cual se le asigna un valor de 0. Este procedimiento tiene la ventaja de ser muy rápido, ya que consiste en una simple resta. Sin embargo, tiene la desventaja de que es un preprocesamiento de los datos y por tanto requiere de un código externo que haga esta operación en línea si se quiere utilizar en una aplicación en tiempo real, ya que con Modelica no es posible hacerla.³ Otra desventaja es que si el paso de integración no coincide con la constante de tiempo de la derivada, el error producido puede llegar a ser relevante. Dymola usa un método de interpolación lineal para calcular el valor de la entrada a partir de los datos proporcionados. DASSL, como se vio en la §2.3.10 es un integrador de paso variable y aunque puede llegar a ser muy preciso para los transitorios, cuando el sistema está en un estado estacionario el paso de integración es grande.

La otra opción es hacer una derivación en línea (*online*). DASSL, complica la aplicación de un método de diferencias finitas para calcular la derivada de la entrada. Dymola no ofrece información en línea del paso de integración, además, saber el valor previo de las variables de estado cuando el integrador se ve obligado a parar, resulta complica-

³En esta tesis, las simulaciones se hacen con Dymola y con un archivo de trayectorias, nunca en tiempo real sobre la planta. Una vez realizado el experimento, el preprocesamiento de los datos se realizaba en Matlab.

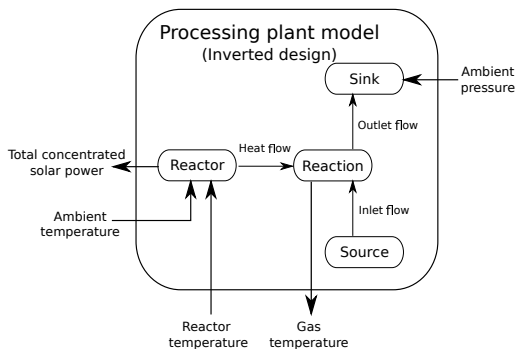


Figura 4.8: Esquema del modelo de la planta de procesamiento (diseño inverso)

do. La siguiente aproximación matemática permite aplicar el método de las diferencias finitas a la entrada del sistema, u , y calcular su derivada, du , con el siguiente código:

```
du = (1/T) * (u - x);
der(x) = (1/T) * (u - x);
```

Listing 4.1: Derivación en línea

donde T es el parámetro de tiempo y x una variable auxiliar. Cuanto menor sea T , mayor precisión y mayor esfuerzo computacional. Este método puede usarse para aplicaciones en tiempo real, pero ralentiza las simulaciones ya que añade una variable de estado adicional al modelo.

Un buena idea cuando se calcula una derivada de forma numérica es ponerle un valor límite de saturación. Si hay un cambio abrupto en la variable, la derivada tenderá a infinito y puede que incurra en problemas numéricos. Un valor alto de este límite no afectará en exceso la dinámica del sistema y le añadirá robustez. La derivación en línea de la forma en la que se ha planteado tiende a introducir una oscilación parásita de alta frecuencia en el resultado. Cuanto menor es el parámetro de tiempo, mayor es la oscilación en amplitud y frecuencia llegando a apantallar el cálculo. Un filtro paso bajo resuelve este problema permitiendo usar menores valores del parámetro de tiempo ganando en precisión.

El diseño inverso del modelo de la planta de procesamiento es el mostrado en la Fig. 4.8. En él, el objetivo es calcular la potencia necesaria por el reactor para que siga un determinado perfil de temperaturas en el reactor. Los componentes son los mismos que los usados en la §4.3.2.1. Como la temperatura es una variable de estado, y ahora, también una entrada; se requiere alguno de los dos métodos explicados previamente para calcularla. Se optó por una derivación en línea, para que el modelo pudiese usarse en tareas de control.

4.4. Simulación dinámica

Los trabajos de simulación de los modelos expuestos en la §4.3 fueron realizados con Dymola 6.0b. El algoritmo de integración numérica fue DASSL y la tolerancia relativa y absoluta usada fue 10^{-4} para todos los ejemplos menos para las simulaciones de la planta de procesamiento con el diseño químico, que tuvo que aumentarse hasta 10^{-6} para asegurar la convergencia dada la sensibilidad de las propiedades químicas a las variables de estado.

La serie de experimentos para la calibración y la validación fue tomada de la campaña experimental del proyecto Hydrosol 3D. En ella, se escogieron los experimentos de los días 18 y 24 de febrero de 2011. El día 18, el experimento que se realizó consistió en una sucesión de ciclos conmutando entre los dos reactores. El día 24, también se realizó una sucesión de ciclos, aunque esta vez solo se empleó uno de los reactores.

4.4.1. Calibración

Los modelos del campo solar y de la planta de generación fueron calibrados usando los experimentos del día 24 de febrero de 2011. En el modelo del campo solar, el único parámetro de calibración fue κ . Los parámetros térmicos del modelo de la planta de procesamiento que fueron calibrados fueron: la capacidad calorífica del reactor, los coeficientes de transferencia de calor, el volumen y área del orificio de salida⁴. Dado que la instalación se utiliza para probar diferentes óxidos metálicos, los parámetros químicos de cada uno de ellos deben calibrarse. La composición química del gas a la salida de los reactores es medida con un cromatógrafo de gases y un espectrómetro de masas. Estos instrumentos de medida no estaban disponibles cuando se realizaron los experimentos, y por tanto, la calibración química no fue posible. Las energías de activación y constantes de reacción han sido tomadas del trabajo de [Agrafiotis et al. \(2007\)](#). Para el número de moles del metal óxido y metal óxido reducido se estimó un valor aproximado de acuerdo a la experiencia con la instalación.

Para reducir la complejidad de la calibración, los modelos del campo solar y de la planta de procesamiento fueron calibrados por separado. Además, se descartó hacer una calibración usando métodos analíticos dada la complejidad de los modelos. Esta, se realizó mediante métodos heurísticos a pesar de que no garantizan una solución óptima.

Para la calibración de los modelos se optó por combinar Dymola, para gestionar el lenguaje Modelica, y Matlab, para la optimización con las *toolboxes* de optimización y simulación (Global Optimization Toolbox y Simulink) ([Hongesombut et al., 2002](#); [Bonilla et al., 2012b](#)). La *toolbox* de optimización dispone de una amplia librería de métodos heurísticos que permiten obtener un ajuste de parámetros próximo al óptimo. Al igual que en los dos trabajos citados, fue un algoritmo genético el método de optimi-

⁴En el trabajo de [de la Calle et al. \(2012\)](#) también fueron calibrados las constantes de la ecuación de Van der Waals. Sin embargo, posteriores análisis demostraron que la ecuación de los gases ideales podía usarse sin perder precisión en el modelo.

zación heurística escogido por su probada fiabilidad.

Los pasos seguidos para la calibración fueron:

1. Modificar el modelo en Dymola con clases de entrada, salida y parámetros en capa superior de modelado.
2. Importar el modelo en Simulink con el DymolaBlock especificando el *path* del modelo desarrollado en Modelica.
3. Compilar el modelo en Simulink con los comandos *dymcomp* y *loaddsin*.
4. Construir otro modelo en Simulink usando el bloque S-function con el SimStr.dll generado en el paso previo y comparando sus salidas con los datos experimentales como función objetivo del problema.
5. Emplear el algoritmo genético apropiado del Global Optimization Toolbox que llame al anterior modelo Simulink para minimizar la función objetivo ajustando los parámetros.

El algoritmo genético seleccionado determina cómo de bueno será el ajuste y cuánto tiempo se requerirá para la calibración. Los parámetros desconocidos deben ser previamente ajustados a mano para acortar el tiempo de calibración. Ese ajuste manual pasará a ser un individuo de la población inicial. Además, se debe restringir los valores de los rangos de variabilidad de los parámetros tanto como sea posible. Aplicando estos consejos, solo 20 individuos y 50 generaciones fueron necesarios para encontrar un ajuste próximo al óptimo de los parámetros térmicos.

El parámetro de ajuste del campo solar, κ , fue calibrado utilizando como función objetivo el error absoluto entre medidas experimentales puntuales y las simuladas. Cuando el parámetro convergió a un cierto valor, la simulación de la potencia solar concentrada para todo el día de calibración fue una de las entradas al modelo de la planta de generación.

Dado que algunos de los parámetros térmicos de ajuste que fueron calibrados solo afectaban a una salida específica, dos funciones objetivo fueron necesarias. Una de ellas fue el error absoluto en la temperatura del reactor debido su importancia en la velocidad de las reacciones. La segunda función objetivo fue el error absoluto en la temperatura del gas, debido a que ambas temperaturas están relacionadas con la transferencia de calor. Como resultado a este problema de optimización se obtuvo un conjunto de soluciones con la misma eficiencia Pareto. La solución escogida fue la que mejor balance tenía con las dos funciones objetivos.

En la Tab. 4.1 se muestran los resultados de esta calibración. Además, también se muestran los parámetros asignados ya sea porque se dispone de los datos o porque su valor se ha estimado dada la imposibilidad de ser calibrados.

Tabla 4.1: Parámetros del modelo

Parámetros asignados		Parámetros calibrados	
Parámetro	Valor	Parámetro	Valor
C_d	0.8	κ	0.07155
$\dot{m}_{gas,in}$	$0.0024 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$	$\alpha_{conv,gas}^A$	$0.2969 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
γ	1.4	$\alpha_{conv,env}^A$	$2.3509 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
m_{reac}	20 kg	$\alpha_{rad,env}^A$	$0.16561 \cdot \sigma_{SB} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$
n_M	2 mol	c_{reac}	$1755.94 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
$w_{H_2O,in}$	0.40	V	0.8002 m^3
$A_{s,h}$	39.6 m^2	$A_{s,o}$	$2.058 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$

4.4.2. Validación

Para validar los modelos, los resultados de las simulaciones fueron comparados con los datos obtenidos el día 18 de febrero de 2011. Evidentemente, solo el modelo del campo solar y el diseño térmico del modelo de la planta de generación pudo ser validado con datos experimentales. Como ya se comentó en la §4.4.1, los instrumentos de medida de la composición de salida no estaban disponibles en esta serie de experimentos.

Dado que los modelos están basados en primeros principios, la evolución de todas las variables que participan en ellos puede ser mostrada y por tanto considerarse una variable de salida. Sin embargo, entre ellas las más importantes son: para el modelo del campo solar, la potencia total concentrada; para el modelo de la planta de generación si el diseño es térmico, temperatura del reactor y del gas; si es químico, concentración de hidrógeno a la salida; y si es inverso, potencia solar concentrada.

4.4.2.1. Diseño térmico

La validación del diseño térmico del modelo se hizo sobre los dos reactores de la planta. Las entradas reales al modelo, irradiancia solar directa y número de heliostatos enfocados⁵, son mostradas en la Fig. 4.9. Las salidas del modelo y los datos reales usados para la validación, potencia solar concentrada, temperatura del reactor y del gas, se muestran en la Fig. 4.10 para los dos reactores de la planta. Las medidas de la potencia solar concentrada que pueden observarse en la parte superior de las Fig. 4.10a y 4.10b, fueron obtenidas usando un sistema compuesto por una barra rotatoria con un blanco lambertiano y una cámara CCD que ha permitido la captura puntual de la distribución de potencia en los focos (Ballestrín y Monterreal, 2004). El error en la medida usando este sistema es de al menos un 3%. En la parte de abajo de ambas figuras puede observarse la evolución de las temperaturas del reactor y del gas en ambos focos comparada

⁵La entrada real al modelo es el vector de heliostatos enfocados. Sin embargo, dada la dificultad de representarlo en una gráfica, se opta por representar el número de heliostatos enfocados.

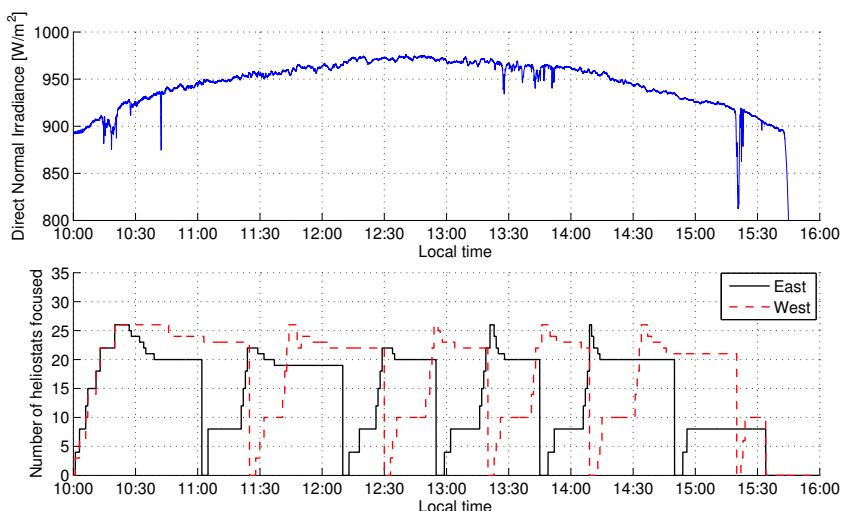
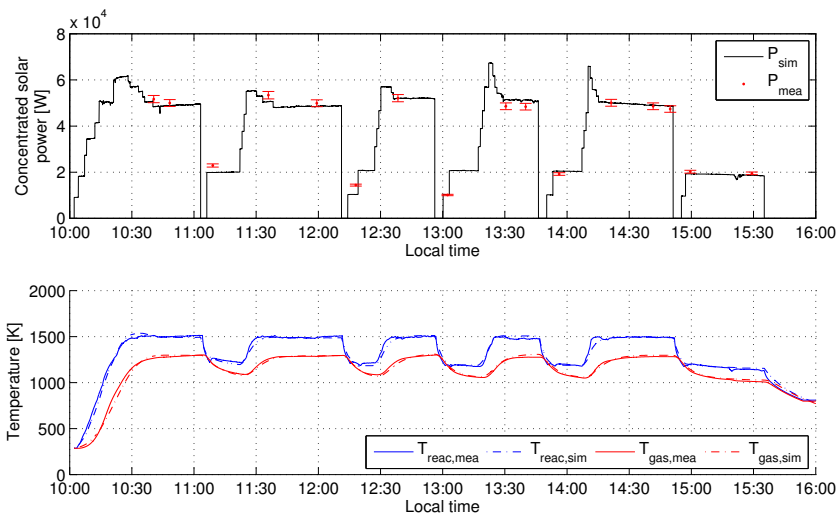


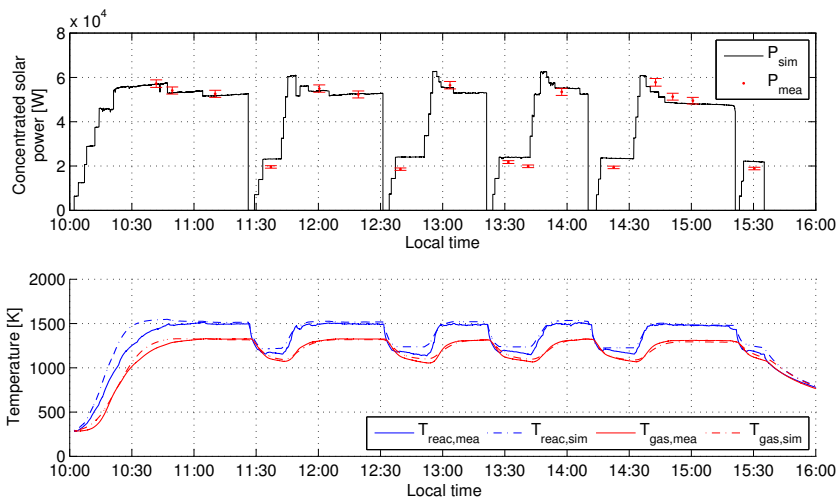
Figura 4.9: Entradas al modelo para su validación

con los datos experimentales. Cada monolito en el lecho del reactor tiene un termopar, la temperatura media de los 9 monolitos es tomada como temperatura de referencia para el reactor. La temperatura del gas se mide con un termopar situado en la tubería de salida del gas. Los conjuntos termopar-transmisor introducen un error de al menos un 5 % en las medidas. El comportamiento térmico del sistema queda perfectamente capturado por los modelos; estos siguen los datos reales en todo el experimento, tanto en el arranque como en los ciclos de generación y regeneración, demostrando su validez. Para el reactor este, los errores relativos cometidos son de 1.51 % y 1.33 % para la temperatura del reactor y la temperatura del gas respectivamente. Para el reactor oeste, los errores relativos fueron de 1.91 % y 1.69 %.

Los test de validación fueron exitosos, ya que demostraron la coincidencia entre las simulaciones y los datos experimentales con una desviación media menor del 2%. Es importante enfatizar que el modelo está compuesto por dos modelos parciales y uno de ellos utiliza los resultados del otro, por tanto, el error en el segundo es acumulado y depende del error del primero. Esta situación se puede visualizar en la Fig. 4.10b, donde al comienzo de la simulación el error en la temperatura del reactor es claramente mayor que en el resto de la simulación. El error producido en la potencia concentrada se debe a que el foco no estaba correctamente centrado en la apertura, situación que se corrigió posteriormente tras la primera medida de potencia. Este error en la potencia al comienzo del experimento es propagado a la planta de procesamiento que responde con una descompensación entre la temperatura medida y la simulada.



(a) Reactor este

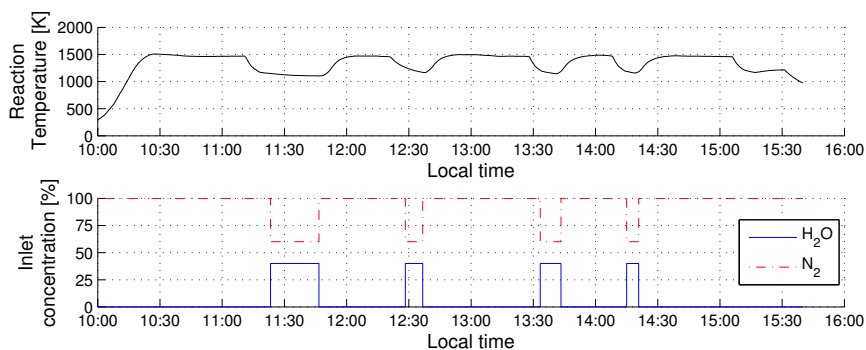


(b) Reactor oeste

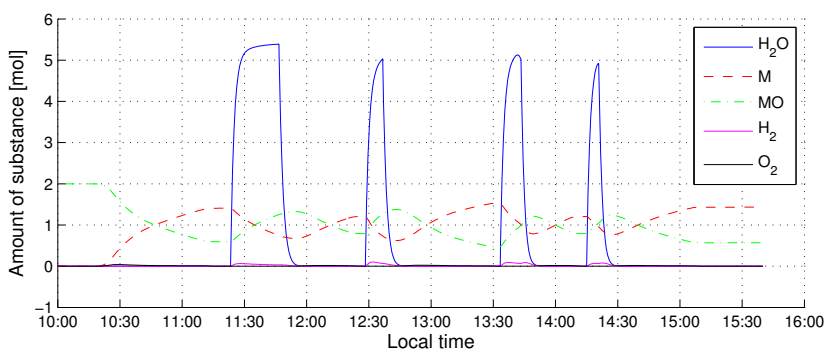
Figura 4.10: Validación de la potencia solar concentrada y el comportamiento térmico

4.4.2.2. Diseño químico

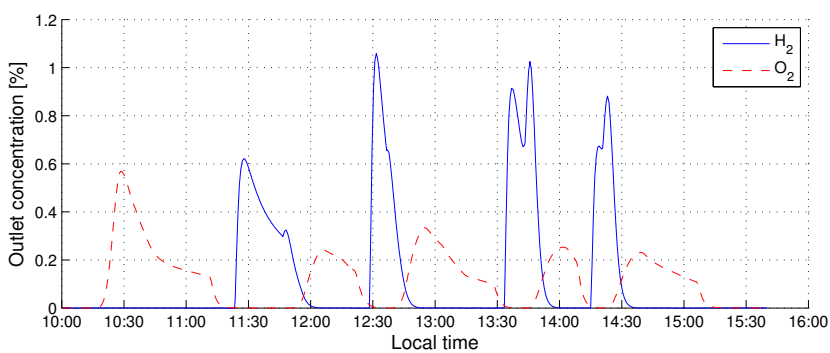
La no disponibilidad de los sistemas de medición de la concentración química de salida, no permitió hacer una calibración del modelo (diseño químico), y por tanto, tampoco una validación rigurosa del mismo. El ajuste de dicho modelo se hizo manual, valiéndose de los conocimientos adquiridos con los experimentos. Los resultados obtenidos por las simulaciones, aunque no tienen una validez rigurosa, encajan con lo



(a) Temperatura de la reacción y concentración de entrada



(b) Moles en el reactor



(c) Concentración de los productos

Figura 4.11: Simulación del comportamiento químico

esperado de ellos.

Usando la potencia solar concentrada simulada del experimento del día 24 de febrero de 2011, se obtuvo el perfil de temperatura de la reacción que se muestra en la parte superior de la Fig. 4.11a. En la parte inferior de la figura, se puede ver la concentración

de entrada que fue virtualmente generada para esta simulación de acuerdo a los ciclos químicos de la planta. Con esa temperatura del reactor y esa concentración de entrada, la variación de los moles de las sustancias implicadas en las reacciones son las que se muestran en la Fig. 4.11b. La suma de los moles del óxido metálico y del óxido metálico reducido es constante, pero parcialmente varían con los ciclos. Cuando el ciclo es de generación, una gran cantidad de agua entra en el reactor que es expulsada en el ciclo del regeneración, ya que la reacción de generación es dominante respecto a la de regeneración. Las concentraciones de salida de los productos del reactor arrastrados por el nitrógeno (o el nitrógeno y el agua) son los que se muestra en la Fig. 4.11c. En ella, se ve la producción de oxígeno e hidrógeno según los ciclos químicos. Los resultados son similares a los obtenidos por Säck et al. (2011).

4.4.2.3. Diseño inverso

El modelo inverso se validó con la simulación de la potencia solar concentrada del reactor este del experimento del día 18 de febrero de 2011. Se usaron los parámetros que fueron calibrados para el modelo térmico, y como entrada, la temperatura medida en el reactor que se muestra en la Fig. 4.10a. El resultado de la simulación puede verse en la Fig. 4.12. La salida del modelo inverso, P_{inv} , sigue el comportamiento de la curva de la potencia simulada, P_{sim} . El comportamiento mostrado por el modelo inverso es más suave que el esperado debido a que no refleja la discretización de la potencia impuesta por el número de heliostatos enfocados. El error medio absoluto entre las dos simulaciones es de 5928 W. Es importante resaltar, que aunque el modelo en algunos puntos muestra potencias negativas estas no son posibles en la realidad.

Como se comentó en la §4.3.2.3, la derivación en línea provoca una oscilación parásita de alta frecuencia que puede mitigarse con un filtro pasa bajo. Para esta simulación de la Fig. 4.12 se seleccionó una frecuencia de corte de $8 \cdot 10^{-4}$ Hz. La elección de esta frecuencia de corte es clave, ya que una mala elección provoca resultados no deseados. La Fig. 4.13 muestra el efecto del filtro en el modelo. Arriba a la izquierda se ve el

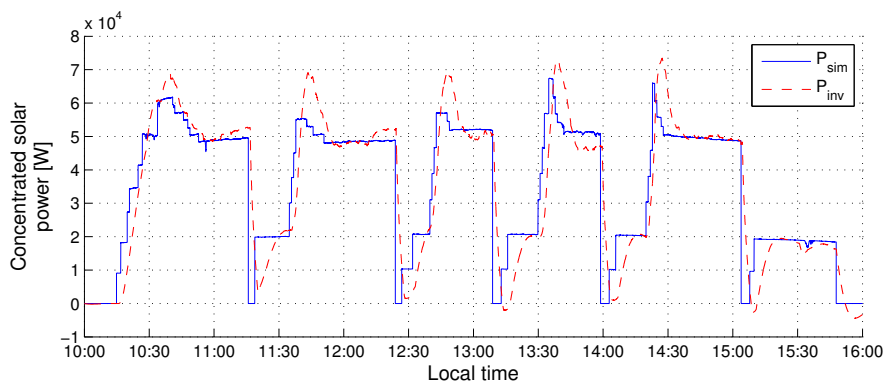


Figura 4.12: Validación del comportamiento inverso

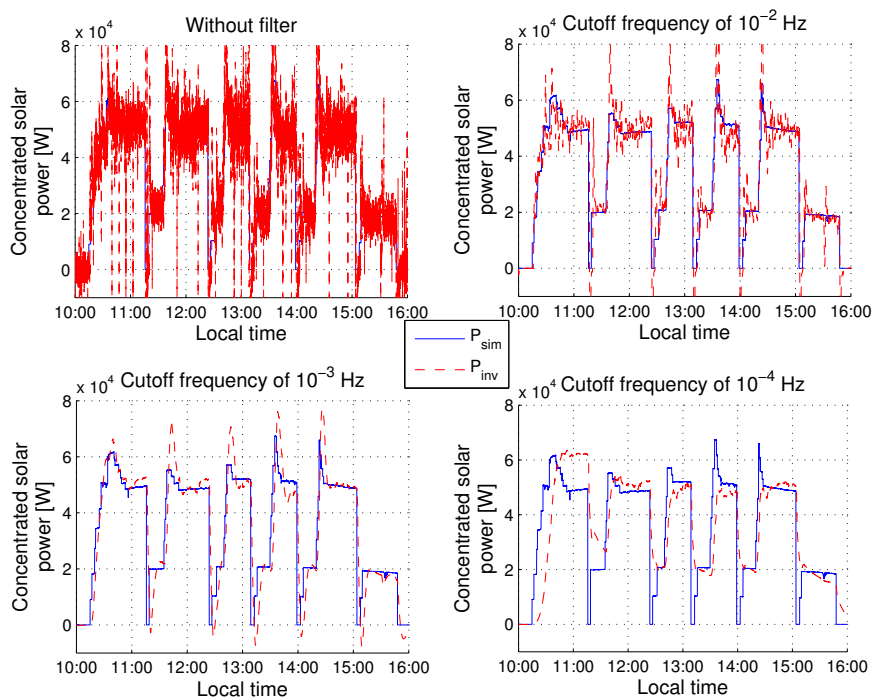


Figura 4.13: Comparación de las frecuencias de corte del filtro

resultado del modelo sin filtrar. Arriba a la derecha, se ve el modelo con una frecuencia de corte de 10^{-2} Hz. Dicha frecuencia es insuficiente para eliminar la oscilación. Abajo a la izquierda se ve el resultado del modelo con el filtro de 10^{-3} Hz, un resultado muy similar al mostrado en la Fig. 4.12. Finalmente, abajo a la derecha se puede observar el efecto de una frecuencia de corte de 10^{-4} Hz. Esta última frecuencia de corte es excesiva, ya que apantalla la dinámica del modelo.

4.5. Resumen

En este capítulo se presentan los trabajos de modelado y simulación que se han hecho para una planta de generación de hidrógeno con energía solar. Tras una breve introducción donde se explica el proceso de la generación de hidrógeno y donde se hace una breve revisión del estado de la tecnología en modelos de generación de hidrógeno, se pasa a explicar el funcionamiento de la planta real en la que se ha basado el capítulo. El modelo se ha desarrollado con una metodología modular, jerárquica y orientada a objetos, dividiendo el modelo en el campo solar y en la planta de procesamiento, y este último en fuente, reactor, reacción y sumidero. Se presentan tres diseños del modelo atendiendo a la funcionalidad del modelo de la planta de procesamiento y explotando la

orientación a objetos del mismo: uno térmico, otro químico y otro inverso. Finalmente, los trabajos de simulación describen la calibración y la validación del modelo con datos reales de la planta. Las comparaciones con dichos datos revelan una buena concordancia entre las medidas y las simulaciones.

4.6. Contribuciones científicas relacionadas

Las contribuciones científicas de esta Tesis doctoral relacionadas con el capítulo son enumeradas y brevemente comentadas en la siguiente lista.

1. A. DE LA CALLE, L. ROCA, L. J. YEBRA & A. VIDAL. “A simulator tool to test control algorithms in a hydrogen solar plant”. Poster en *SolarPACES Conference 2011*. Granada, España. (2011).

En este trabajo se presenta una primera versión del modelo de la planta de generación de hidrógeno (diseño térmico) y un esquema para controlar la potencia solar concentrada y la temperatura.

2. A. DE LA CALLE, L. ROCA, L. J. YEBRA, A. VIDAL & S. DORMIDO. “Modelling Thermo-chemical Hydrogen Generation in a Solar Plant”. Poster en *7th Vienna International Conference on Mathematical Modelling (MATHMOD)* (pp. 1260-1264). Viena, Austria. (2012). DOI: [10.3182/20120215-3-AT-3016.00223](https://doi.org/10.3182/20120215-3-AT-3016.00223)

En este trabajo se presenta el *work-in-progress* del diseño químico del modelo de la planta de generación.

3. A. DE LA CALLE, L. ROCA, L. J. YEBRA & S. DORMIDO. “Modeling of a two-step solar hydrogen production plant”. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(14), 10549 - 10556, 2012. DOI: [10.1016/j.ijhydene.2012.04.056](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.04.056)

En este artículo se presenta el modelo de la planta de generación de hidrógeno (diseño térmico y químico). Se presentan también los trabajos de calibración y validación usando datos experimentales. La validación demuestra la buena concordancia entre los datos experimentales y las simulaciones.

4. L. ROCA, A. DE LA CALLE & L. J. YEBRA. “Heliostat-field gain-scheduling control applied to a two-step solar hydrogen production plant”. *Applied Energy*, 103, 298-305, 2013. DOI: [10.1016/j.apenergy.2012.09.047](https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2012.09.047)

En este artículo se presenta la estructura de control de la temperatura media de un reactor de una planta de generación de hidrógeno con energía solar. El modelo del campo de heliostatos se usa para crear un vector de las potencias ordenadas de menor a mayor donde con un PI adaptativo por tabla (*gain scheduling*) se escoge el número de heliostatos enfocados necesario. El control es probado primero en el modelo térmico de la planta de generación y posteriormente en la planta experimental obteniendo buenos resultados.

5. L. ROCA, R. DÍAZ-FRANCO, A. DE LA CALLE, J. BONILLA, L. J. YEBRA & A. VIDAL. “A combinatorial optimization problem to control a solar reactor”. Presentación oral en *SolarPACES Conference 2013*. Las Vegas, Estados Unidos. (2013). Publicado en *Energy Procedia*, Volume 49, 2014, (pp. 2037-2046) DOI: [10.1016/j.egypro.2014.03.216](https://doi.org/10.1016/j.egypro.2014.03.216)

En este trabajo se presenta una estructura de control de los heliostatos usando el modelo inverso para obtener una referencia de la potencia concentrada a seguir. El modelo del campo de heliostatos se usa en un *feedforward*. El control es probado en el modelo de la planta de generación de hidrógeno.

6. L. ROCA, R. DÍAZ-FRANCO, A. DE LA CALLE, J. BONILLA & A. VIDAL. “A control based on a Knapsack problem for solar hydrogen production”. *Optimal Control, Applications and Methods - Optimal Control of Solar Energy Systems* (special issue), First published online, Mar 2014. DOI: [10.1002/oca.2118](https://doi.org/10.1002/oca.2118)

Este artículo continúa con el trabajo la estructura de control para la potencia solar concentrada en un reactor tipo Hydrosol II. La estrategia de control de los heliostatos usa el modelo inverso para obtener una potencia solar concentrada referencia y el modelo del campo de heliostatos para un control *feedforward* del número de heliostatos enfocados. El control se prueba en el modelo de la planta de generación de hidrógeno y en la planta piloto Hydrosol II obteniendo buenos resultados.

Capítulo 5

Modelado y simulación de una bomba de calor de doble efecto

*¿Y yo para qué las quiero,
las cuatro estaciones,
si todo lo que sueño
está entre interiores?*

Extremoduro
(Letra de Roberto Iniesta)

5.1. Introducción

Una de las dificultades de trabajar con energía solar térmica es la variabilidad de su principal fuente de energía, la irradiancia solar que llega a la superficie de la tierra. Dada la naturaleza de la fuente y de las perturbaciones que la afectan, sobre las que poco o nada se puede hacer, tratar de compensar dichas perturbaciones en los procesos asociados a esta ha sido uno de los principales campos de estudio de los investigadores desde que nació la tecnología. El rango de soluciones propuestas varía desde sistemas de almacenamiento térmico hasta fuentes de energía auxiliar. La elección de cuál es la solución más adecuada depende en gran medida del propio sistema y su propósito.

Por otro lado, una de las demandas de la industria es incrementar la eficiencia de los procesos reduciendo el coste energético de los mismos. La energía perdida de algunos procesos industriales es susceptible de ser recuperada. Volver a inyectar esta energía al proceso es una de las posibles vías para incrementar la eficiencia energética. Uno de los principales escollos para poner en práctica este concepto es que la energía recuperada suele ser de menor temperatura que la demandada por el proceso.

Las bombas de calor pueden ser la convergencia de ambos campos de estudio en numerosos procesos relacionados con la energía solar térmica, e.g. la desalinización solar. Una bomba de calor es una máquina térmica que transfiere calor de un cuerpo frío a uno caliente. De acuerdo con el segundo principio de la termodinámica (v. §3.3.3),

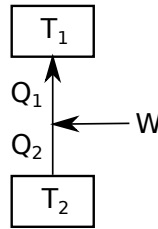


Figura 5.1: Esquema genérico de una bomba de calor

para que tenga lugar esta transferencia de calor se requiere un aporte externo de energía, ya sea en forma de calor o de trabajo. La Fig. 5.1 expone este concepto. En ella, se representa el intercambio de energía que se produce en una bomba de calor. Si $T_1 > T_2$ se puede afirmar que:

$$Q_1 = Q_2 + W, \quad (5.1)$$

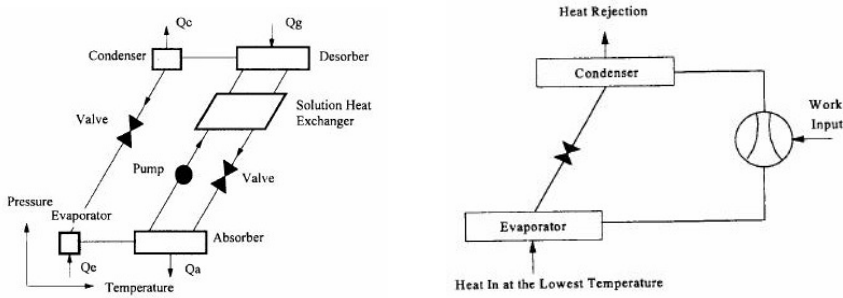
donde Q_1 es el calor transmitido al cuerpo caliente, Q_2 el calor extraído del cuerpo frío y W el aporte externo de energía. El rendimiento de una bomba de calor viene determinado por el llamado COP (*Coefficient of performance*), que se define como:

$$COP = \frac{Q_1}{W} = \frac{Q_1}{Q_1 - Q_2} \leq \frac{T_1}{T_1 - T_2}. \quad (5.2)$$

El valor del COP es siempre superior a la unidad. Da una idea de cuánto calor del foco frío es transferido al foco caliente. En ciclos reversibles, se observa que su valor será mayor cuanto más cerca térmicamente estén los cuerpos. Sin embargo, muchos de los procesos termodinámicos que ocurren en el interior de la máquina son irreversibles por lo que el COP dependerá más del diseño de la máquina que de la diferencia de temperaturas entre los focos.

El tipo de entrada externa de energía determina la tecnología que debe usar la bomba de calor. Si la entrada es calor, la tecnología más extendida es la de absorción, basada en procesos termoquímicos. Esta explota la capacidad de algunos fluidos de absorber-desorber a diferentes temperaturas que las de evaporación-condensación del fluido refrigerante. La Fig. 5.2a muestra el esquema de un ciclo típico: evaporación-absorción-desorción-condensación y los dos niveles de presión. Si la entrada es trabajo, entonces la tecnología más extendida es la de compresión de vapor. La Fig. 5.2b muestra un esquema típico de la tecnología donde un compresor mecánico aporta el trabajo necesario para que sea posible la transferencia de calor.

El rendimiento de los ciclos reversibles es independiente de los fluidos de trabajo, como ya se vio en la Eq. 5.2. Sin embargo, en el diseño de bombas de calor reales deben ser tenidos en cuenta ya que la irreversibilidad de los procesos hace que este se vea afectado. Además, de ellos depende en gran medida los costes iniciales y de operación (Herold et al., 1996; Anand et al., 2013). Los dos fluidos convencionales para su uso en máquinas de absorción son amoníaco-agua y agua-bromuro de litio (donde los primeros actúan de refrigerante y los segundos de absorbente). Otros fluidos han sido también



(a) Esquema del ciclo de absorción de un solo efecto (b) Esquema de una bomba de calor por compresión de vapor

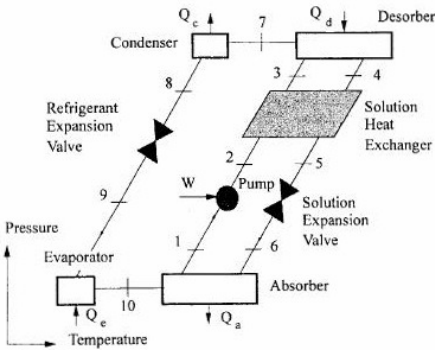
Figura 5.2: Ejemplos de tecnologías de bombas de calor (Herold et al., 1996)

considerados para su uso en bombas de calor, pero la razón por la que estos dos han copado el mercado es por su buen comportamiento en rangos de operación habituales. Las propiedades deseables para los fluidos de absorción son evaluadas en la Tab. 5.1. Como puede verse, algunas de estas propiedades son mutuamente exclusivas. Ambos fluidos poseen desventajas. Que la presión de vapor del amoniaco sea relativamente baja y la del agua relativamente alta, provoca que haya trazas de fluido absorbente en el vapor, contaminando el ciclo. Los ciclos de amoniaco-agua requieren de un rectificador que separe el vapor, perdiendo eficiencia. En ese sentido, usar el bromuro de litio de litio como absorbente es más ventajoso ya que esencialmente no es volátil. Sin embargo, este tiene la desventaja de que una alta concentración a baja presión puede provocar cristalización del fluido, y por tanto, el rango de operación está limitado.

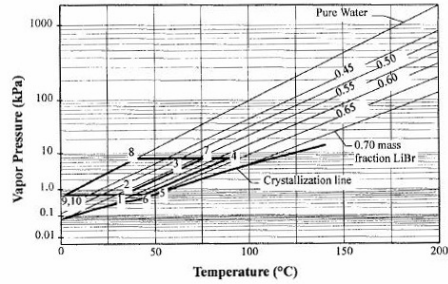
En la Fig. 5.3a se muestra el ciclo de absorción de una bomba de calor de un solo efecto, donde los fluidos de trabajo son agua y bromuro de litio. Este ciclo es el más

Tabla 5.1: Propiedades de los fluidos de trabajo en máquinas de absorción (Herold et al., 1996)

	Propiedad	Amoniaco-agua	Agua-Bromuro de litio
Refrigerante	Alto calor latente	Bueno	Excelente
	Presión de vapor moderado	Muy alto	Muy bajo
	Baja temperatura de congelación	Excelente	De limitada aplicación
	Baja viscosidad	Buena	Buena
Absorbente	Baja presión de vapor	Pobre	Excelente
	Baja viscosidad	Buena	Buena
Mezcla	No fase solida	Excelente	De limitada aplicación
	Baja toxicidad	Pobre	Buena
	Alta afinidad entre refrigerante y absorbente	Buena	Buena



(a) Ciclo de absorción



(b) Diagrama de Dühring del ciclo

Figura 5.3: Bomba de calor de agua-bromuro de litio de un solo efecto (Herold et al., 1996)

secillo. La representación es por medio de un diagrama de bloques en el que la posición de los mismos indica la presión, temperatura y fracción másica relativa de cada uno. La máquina está formada por cuatro componentes principales que intercambian calor con el exterior, un intercambiador de calor interno, dos válvulas para limitar los flujos y una bomba.

La circulación de la disolución absorbente forma un ciclo cerrado entre el generador y el absorbedor. La diferencia de presiones entre ambos componentes obliga a que una bomba hidráulica impulse la disolución desde el absorbedor al generador, sin embargo, en el sentido contrario la circulación es espontánea y se controla con la apertura de una válvula. El generador es el elemento a través del cual se produce la entrada de calor a alta temperatura. Este calor, es mayoritariamente usado para que se produzca la evaporación del compuesto volátil, en este caso, el agua que es fluido refrigerante. La presión de vapor de la sal es tan alta que la volatilidad del mismo es, en la práctica, nula. Se puede asumir entonces que el vapor está únicamente formado por agua pura. Aunque se descarte la presencia de trazas de sal en el vapor, si hay que asegurarse de que las velocidades del vapor no sean elevadas ya que podrían arrastrar gotas de disolución que hacen al vapor altamente corrosivo. Al evaporar el refrigerante, la concentración de las sales aumenta en la disolución.

El intercambiador de calor permite la transferencia de calor sensible entre la disolución entrante (fría) y saliente (caliente) del generador. Su propósito es reducir el consumo de calor externo para adecuar la temperatura de la disolución entrante a la del interior. El rendimiento de este componente tiene un gran impacto en el diseño de la máquina.

A la salida del intercambiador, el flujo típicamente sigue manteniendo su carácter subenfriado, condición que mantiene hasta que alcanza el absorbedor, cuya presión es menor que su presión de vapor. También es posible que el flujo encuentre algún elemento que induzca una caída de presión suficiente como para que alcance su presión de

vapor, p.e. una válvula reguladora. En cualquiera de los dos casos, se produce una evaporación súbita que reduce la temperatura del fluido hasta la temperatura de saturación a esa presión.

Una vez en el absorbedor, la disolución concentrada en sal es puesta en contacto con el vapor procedente del evaporador. Como ya se comentó en la §3.8, la absorción se produce en la superficie del líquido mientras esta no esté saturada de refrigerante. Como la disolución entrante está saturada y previsiblemente la que se encuentra ya en el recinto también, para que se produzca absorción necesariamente el absorbedor debe enfriarse por uno foco externo. Una vez que el vapor es absorbido, la disolución reduce su concentración en sales y es enviada al generador.

El lazo de refrigerante lo completan los otros dos componentes. El vapor procedente del generador es condensado en el condensador, el cual, cede su calor latente a un foco externo. Habitualmente, este foco coincide con el del absorbedor, y por tanto, la temperatura en ambos es aproximadamente la misma. El condensado abandona el condensador en un régimen subenfriado hacia el evaporador empujado por la diferencia de presiones entre ambos componentes. Este líquido, al igual que pasaba con el disolvente, ya sea en la válvula o en la entrada al evaporador sufre una caída de presión tal que produce una evaporación súbita de parte del líquido. Afortunadamente, al ser agua el líquido refrigerante y esta tener un calor latente elevado, la fracción de agua evaporada mediante este proceso es baja. Una vez dentro del evaporador, el foco frío proporciona la energía necesaria para evaporar el resto del refrigerante. El vapor de baja presión producido en el evaporador es el consumido por el absorbedor.

El rendimiento de las máquinas de un solo efecto se ve limitado por la baja temperatura de la entrada caliente de calor (en torno a los 75 °C) con COP típicos de 1.7 (Herold et al., 1996). Ese es el motivo por el que difícilmente pueden ser competitivas económicamente respecto a los sistemas de compresión de vapor. Su aplicación habitual es la de aprovechar la energía perdida de un proceso como entrada de calor de alta temperatura.

Mucho más competitivas son las máquinas de doble efecto, cuyo COP puede rondar entre 2 y 2.2. Además, su entrada de alta temperatura es accesible por el vapor procedente de calderas de gas, hecho que hace aún más competitiva la tecnología al ser un elemento ya maduro en la industria. La Fig. 5.4 muestra las diferentes configuraciones que se pueden adoptar con la tecnología de doble efecto. Destacan por tener tres niveles de presión. Tienen dos generadores, uno de alta temperatura y otro de baja temperatura, dos condensadores y dos intercambiadores de calor para la disolución. Lo más habitual es que el generador de baja temperatura y el condensador de alta temperatura se integren en un mismo componente que haga de intercambiador de calor interno. La entrada de calor a alta temperatura se realiza a través del generador de alta temperatura y la entrada de calor a baja temperatura a través del evaporador. El calor cedido por la bomba de calor se realiza en el absorbedor y del condensador de baja temperatura, que suele ser a la misma fuente de calor.

La principal característica del diseño de doble efecto es que el calor procedente de la

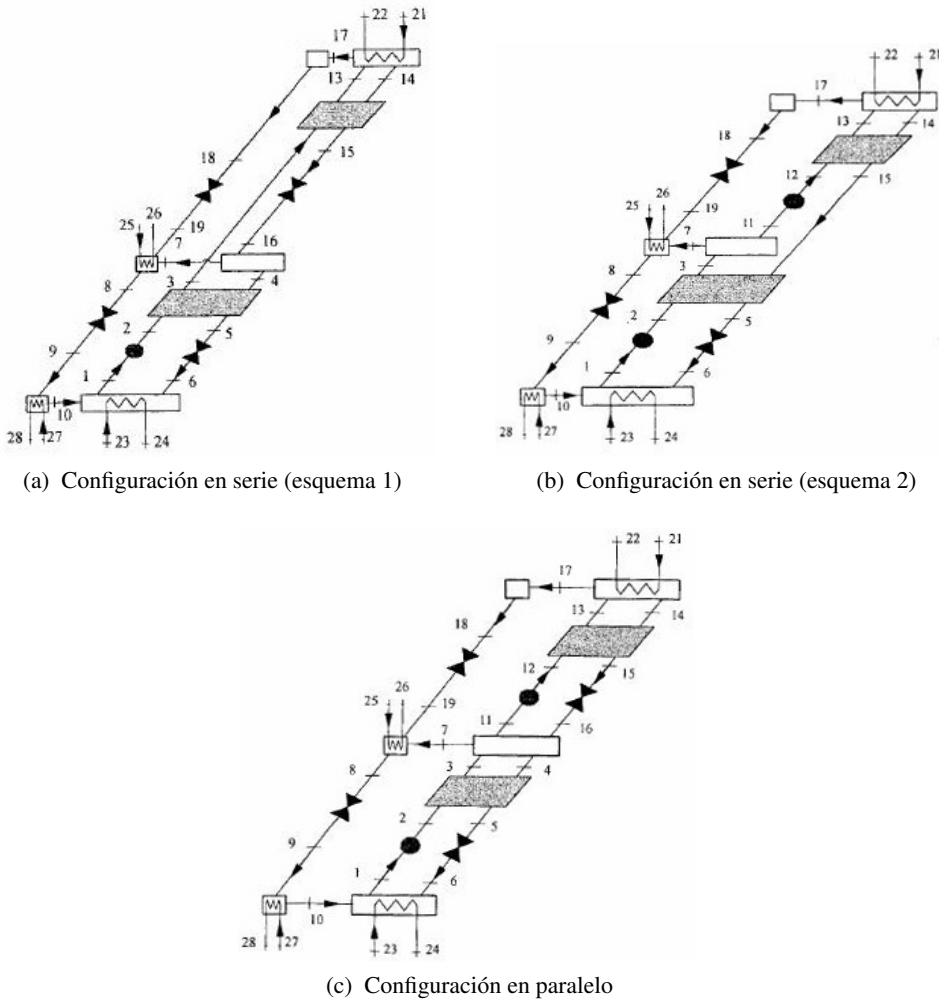


Figura 5.4: Bomba de calor de agua-bromuro de litio de doble efecto (Herold et al., 1996)

entrada a alta temperatura es aprovechado en dos etapas. Es decir, el vapor producido en el generador de alta temperatura por esta entrada es la fuente de calor para el generador de baja temperatura. La desorción se produce en dos etapas. Si comparamos la máquina de doble efecto con una de un solo efecto, la diferencia radica en que la entrada de calor a alta temperatura requiere mayor temperatura, ya que tanto la salida de calor como la entrada a baja temperatura se realizan en condiciones similares en ambas máquinas. Las mayores concentraciones en el fluido absorbente obtenidas en la máquina de doble efecto permiten un mayor aprovechamiento de la fuente de calor a baja temperatura, de ahí que sus COP sean mayores.

Las opciones básicas para la distribución de la disolución en el interior de una má-

quina de doble efecto son dos: configuración en serie y en paralelo. Desde el punto de vista termodinámico y de transferencia de calor, la configuración del flujo en paralelo (v. Fig. 5.4c) es más eficiente que la configuración en serie (v. Fig. 5.4a y 5.4b) (Herold et al., 1996). En ella, la concentración de la disolución en ambos generadores es esencialmente la misma, tanto la entrada como la salida. El rendimiento del ciclo es muy sensible al flujo másico de las disoluciones debido a las irreversibilidades que se producen en los intercambiadores de calor. Esto hace que aunque sea ligeramente ventajosa respecto a la configuración en serie, la contrapartida es una mayor complejidad en lo que respecta al control. La robustez de la configuración en serie, hace que sea más atractiva desde el punto de vista de operación. Entre las dos posibilidades expuestas en la Fig. 5.4 (esquema 1 y esquema 2) la configuración con mejor rendimiento es la del esquema 1, donde la disolución pobre en absorbente es bombeada al generador de alta temperatura, que tras una primera desorción, fluye hasta el generador de baja temperatura donde se produce una segunda desorción en la que se alcanza la alta concentración que será empleada para la absorción.

Existen más tipos de máquinas térmicas con tecnología de agua-bromuro de litio, e.g. efecto mitad, triple efecto..., pero cada una ellas tiene una aplicabilidad bastante limitada.

Como ya se ha comentado, la cristalización del bromuro de litio es uno de los principales problemas al trabajar con esta tecnología. La naturaleza de las disoluciones de sales hace que cuando la fracción másica excede el límite de solubilidad una parte precipite. Este límite es una función fuertemente dependiente de la temperatura y de la fracción másica. En la Fig. 5.5 se puede ver la curva de cristalización del bromuro de litio en función de la temperatura y la concentración. Este, al igual que otras sales, en estado sólido presenta estructura cristalina. La existencia de sitios de nucleación juega un papel importante en la formación de cristales, sin ellos la disolución puede exhibir un estado de supersaturación. Pero una vez que se presenta uno, el propio cristal favorece el crecimiento de más sitios de nucleación. En las bombas de calor con bromuro de litio, la consistencia de aguanieve del precipitado tiende a adherirse en el sistema de tuberías que si persiste acaba por interrumpir la circulación entre componentes (Wang et al., 2011; Herold et al., 1996).

Aunque existen numerosos estudios enfocados a evitar la aparición de cristales (Wang et al., 2011), éste sigue siendo uno de los limitantes de la tecnología. En el diseño de bombas de calor, el diagrama de Dühring resulta muy útil (v. Fig. 5.3b). En él, se representa el ciclo termodinámico en una gráfica cuyos ejes son presiones y temperaturas. Las líneas diagonales pertenecen a puntos con la misma fracción másica. La curva de cristalización corta la gráfica, que debe tener todo el ciclo a la izquierda de esta.

La cristalización no es el único factor a tener en cuenta al diseñar una bomba de calor con esta tecnología. El bromuro de litio es un material altamente corrosivo con numerosos metales en presencia de oxígeno, entre los que se incluye el acero y el cobre, materiales típicos en su construcción. Sin embargo, el funcionamiento de una bomba

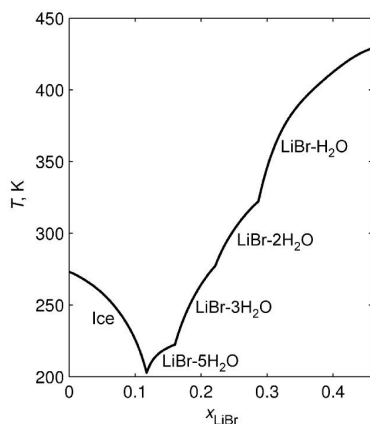


Figura 5.5: Curva del equilibrio sólido-líquido para la disolución agua-bromuro de litio en función de la temperatura y la fracción molar (Pátek y Klomfar, 2006b)

de calor requiere un entorno hermético sin otra presencia gaseosa que vapor de agua. Por ello, la presencia de oxígeno es muy baja ya que todo el aire debe ser expulsado mediante un sistema de vacío. Para minimizar los efectos de la corrosión a largo plazo, es conveniente llevar un control del pH y el uso de inhibidores.

La capacidad que tiene el bromuro de litio de oxidar materiales depende en gran medida de su acidez. Se puede combatir la oxidación incrementando el número de radicales hidroxilo, ya que estos tienden a oxidar el material directamente en la superficie provocando la pasivación del material. Sin embargo, con el tiempo la alcalinidad tiende a provocar la formación de hidrógeno en estado gaseoso, con lo que en cualquier caso, lo preferible es mantener lo más cerca de la neutralidad el pH de la disolución. Existen compuestos para controlar el pH que pueden ser añadidos como aditivos en baja concentración y que no alteran significativamente las propiedades termodinámicas de la disolución, como el ácido hidrobromico (HBr) o el nitrato de litio (LiNO_3) (Herold et al., 1996; Jian et al., 2010). Este último además tiene la ventaja de que incrementa la solubilidad del bromuro de litio, aumentando su rango de operación.

También se pueden añadir inhibidores de corrosión que proveen una reducción adicional de los ratios de corrosión. En este sentido se han propuesto y probado una gran cantidad de ellos como el cromato de litio (Li_2CrO_4), el molibdato de litio (Li_2MoO_4) y hidróxido de litio (LiOH) (Herold et al., 1996). El primero es muy tóxico y ha dejado de usarse, y el segundo aunque menos efectivo, lo ha sustituido en numerosas aplicaciones. Esos inhibidores reducen la corrosión, pasivizando los materiales.

La corrosión aumenta con la temperatura. Para ciclos que alcancen altas temperaturas, e.g. máquinas de doble efecto, los métodos antes planteados son insuficientes. Este tipo de máquinas requieren materiales especiales para preservarse a largo plazo. Los tubos de los componentes suelen ser los elementos más propensos a la degradación ya que es donde se alcanzan las máximas temperaturas. La opción más habitual es sustituir

los de cobre por unos de cobre-níquel ya que esta aleación es muy resistente a corrosión a altas temperaturas. Su precio es considerablemente superior, por lo que los costes de la máquina se ven incrementados.

Para tener un rendimiento aceptable, una bomba de calor debe ser hermética en todos sus componentes. Las presiones en el interior típicamente son subatmosféricas. Dado que esencialmente solo hay vapor de agua en los compartimentos, las temperaturas de operación del evaporador y condensador son las que determinan las presiones de trabajo. Las menores presiones de la máquina se dan en el evaporador y en el absorbedor. El hecho de que el volumen específico del agua a esa presión sea elevado implica que las velocidades del vapor sean elevadas, y por tanto, hay grandes caídas de presión entre componentes. La naturaleza logarítmica de las curvas de la presión de vapor hace que la temperatura sea muy sensible a las variaciones en la presión. Una solución para minimizar la caída de presión entre componentes es confinar ambos bajo una misma carcasa, de tal forma que la sección transversal por la que circula el vapor sea muy grande y que la longitud que separa las superficies de evaporación y absorción sea la menor posible.

Aunque sea hermética, la bomba de calor no está libre de la presencia de gases no absorbibles. A pesar de los esfuerzos por evitar la corrosión, a largo plazo es inevitable. Este proceso, aunque lento en el mejor de los casos, produce hidrógeno de una forma constante. El hidrógeno es un gas esencialmente inerte, cuya solubilidad a esas temperaturas es muy baja en ambos líquidos (Herold et al., 1996). Por tanto, existe una tendencia a largo plazo a acumularse en el interior de la bomba. Dado su influencia en el rendimiento, como mantenimiento este debe ser expulsado. Los métodos más habituales son: un mecanismo de purgas o un vaciado periódico.

La baja presión en el recinto del evaporador-absorbedor hace que los fenómenos relacionados con elevación no sean despreciables. El peso de la columna de líquido ejerce una presión del orden de magnitud de la presión reinante. La sensibilidad de la temperatura de saturación en ese rango de presiones hace que los evaporadores de tubos sumergidos sean inviables por su bajo rendimiento. La diferencia en la temperatura de saturación entre la superficie del líquido y el fondo del evaporador puede ser de varios grados. Por ello, el diseño habitual del evaporador es el de película descendente de tubos horizontales, ya que el espesor de la película es del orden de magnitud del milímetro y el efecto de la elevación sí es despreciable.

El diseño del absorbedor también es habitualmente de película descendente de tubos horizontales, el motivo es por su compacidad. Es el componente que requiere una mayor área de transferencia de calor en la máquina. La ya comentada caída de presión en el tránsito del evaporador y absorbedor obliga a maximizar el área de flujo. Además, los coeficientes de transferencia de calor y masa son menores que los correspondientes en los otros componentes. En parte, la culpa es de la relativa ineficiencia de los procesos de transferencia de masa en el líquido. Una técnica eficiente para mejorar esta transferencia es la adición de aditivos tensoactivos en la disolución. El octanol (2-etil-1-hexanol) puede ser usado con este fin. En teoría, la mejora de la transferencia de calor puede

llegar a doblarse, pero en la práctica, los efectos del sistema con la caída de presión o la presencia de gases no absorbibles limitan la efectividad hasta ganancias más discretas (Herold et al., 1996).

Las bombas de calor que emplean la tecnología de absorción son sistemas que tienen una gran inercia térmica, una característica que las diferencia de las de compresión de vapor. Esta, se hace especialmente relevante en el arranque y durante la operación a carga parcial de las máquinas. Para el estudio de las máquinas en estas situaciones y para entender su comportamiento frente a perturbaciones, el modelado dinámico es una herramienta de gran utilidad (Li et al., 2014).

En los últimos años se han presentado trabajos muy interesantes relacionados con el M&S dinámica de bombas de calor de absorción. Jeong et al. (1998) desarrollaron un modelo dinámico de una bomba de calor de un solo efecto de agua-bromuro de litio diseñada para recuperar la energía perdida por otro proceso a 30-40 °C. El modelo tiene en cuenta la capacidad de almacenamiento de las masas de los fluidos en los distintos contenedores y la capacidad térmica de las carcassas, pero no la de los intercambiadores de calor. Los flujos máxicos de la disolución y del vapor son determinados en función de la diferencia de presiones entre los contenedores. Para las simulaciones, los coeficientes de transferencia de calor fueron asumidos constantes y el modelo fue validado experimentalmente con los datos de potencia entregada por el absorbedor y el condensador.

En el trabajo de Fu et al. (2006) se presenta una librería de modelado orientado a objetos para sistemas de refrigeración por absorción. Los componentes que modelan los contenedores concentran los balances de masa y energía por especie química. La transferencia de calor se calcula con coeficientes de transferencia de calor globales por contenedor. Está implementada en Modelica y las temperaturas de salida fueron validadas con datos experimentales en las que se aprecia una perturbación del estado estacionario como respuesta a una variación de la temperatura de entrada de la refrigeración.

El modelo dinámico presentado por Kohlenbach y Ziegler (2008a) también es para una bomba de calor de un solo efecto de agua-bromuro de litio. En él, se presta especial atención al almacenamiento de masa y calor y al retardo en el transporte de la disolución entre contenedores. Las propiedades termodinámicas de los fluidos son consideradas constantes y el modelo no hace un cálculo en detalle de las entalpías. El modelo es muy preciso respecto a la forma de la respuesta frente a variaciones de las entradas pero poco preciso respecto a los valores numéricos en la validación (Kohlenbach y Ziegler, 2008b). El trabajo incluye un análisis de sensibilidad de algunos parámetros internos que no son tenidos en cuenta en la validación.

Shin et al. (2009) presentaron un modelo dinámico de una bomba de calor de doble efecto de agua-bromuro de litio. Con una metodología de modelado orientada a objetos en Microsoft Visual C++, el modelo resultante fue compuesto a partir de modelos básicos basados en primeros principios: intercambiadores de calor de tubos y carcassas, intercambiadores de calor sensible y elementos de transporte de fluidos como válvulas y tubos en 'U'. Los intercambiadores de calor de tubos y carcassas representan los componentes principales de la bomba (absorbedor, generador, evaporador y condensador).

En ellos, mientras que en el lado de la carcasa se producen los cambios de fase (ya sea la disolución absorbente o del refrigerante) en el interior de los tubos se produce una variación del calor sensible. El modelo fue validado con datos experimentales y aunque mostró bastante precisión para los estados estacionarios, en los transitorios el error en las temperaturas en algunos puntos fue de más de 10 °C en el generador y el absorbedor.

El modelo dinámico de una bomba de calor de agua-bromuro de litio presentado por Myat et al. (2011) fue diseñado para hacer un análisis entrópico del sistema. En él, aunque la transferencia de calor se hace a través de un coeficiente global para cada contenedor, éstos se calculan detalladamente a partir de los coeficientes de transferencia de calor locales de cada uno de los contenedores a partir de correlaciones empíricas. El modelo calcula perfiles de temperatura y concentraciones del fluido en el interior de la bomba. No fue validado experimentalmente.

El modelo dinámico de una bomba de calor de agua-bromuro de litio de un solo efecto presentado por Evola et al. (2013) también está basado en una metodología de orientación a objetos. Es un modelo de concentración de balances de masas y energía de cada fase para cada uno de los componentes. Se presta especial interés al modelado de la circulación del vapor entre componentes, en la que se definen cuatro volúmenes variables de vapor gobernados por la ley de los gases ideales. El volumen de gas es calculado a partir del volumen del líquido. Los coeficientes de transferencia de calor se consideran constantes y la capacidad térmica de los tubos y la carcasa es tenida en cuenta. El modelo fue validado experimentalmente con datos de la temperatura de salida para un caudal constante interno.

En este capítulo se describen los trabajos de M&S realizados para una bomba de calor de doble efecto. Este modelo se basa en la bomba de calor del sistema experimental de desalinización solar AQUASOL (v. Fig. 5.6) situada en el CIEMAT-Plataforma Solar de Almería (Alarcón-Padilla et al., 2008). Para su realización se ha seguido una metodología de modelado orientada a objetos. Se han identificado y modelado cada uno de los subprocesos relacionados con la transferencia de masa y calor en este tipo de instalaciones, formando una librería de componentes versátil para procesos de cambio de fase. Esta librería permite componer gráficamente en tres niveles de abstracción el modelo completo de la bomba de calor. La implementación se ha hecho con el lenguaje de modelado Modelica y la herramienta de simulación ha sido Dymola. El objetivo de este modelo es que sea capaz de reproducir la respuesta dinámica de la bomba de calor usando como entradas las naturales del sistema y poder ser usado para el diseño, prueba y validación de sistemas de control avanzado. Los modelos han sido calibrados y validados experimentalmente.

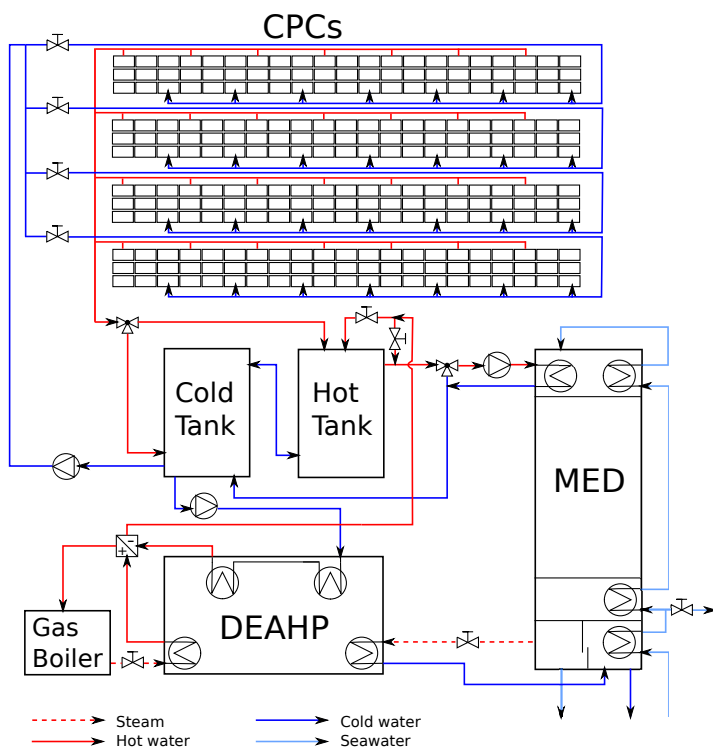


Figura 5.6: Diagrama de flujos del sistema experimental de desalinización solar AQUASOL

5.2. Descripción de la planta

La tecnología MED (*Multi-effect distillation*)¹ se basa en una serie de procesos de evaporación y condensación que se producen en el interior de unos elementos herméticos llamados efectos, los cuales, se disponen en una secuencia decreciente de presiones. Una de las vías para mejorar la eficiencia en plantas MED es mediante el uso de bombas de calor. El acoplamiento de estas en el proceso ha sido una solución empleada a nivel industrial desde principios de los 70. Estas bombas, de tecnología de compresión, consisten en el acoplamiento de un eyector de vapor en el último efecto. Las dos principales razones para sustituir la tecnología de compresión por la de absorción, es en primer lugar, porque las bombas de calor por absorción (doble efecto) han demostrado tener una mayor eficiencia, y en segundo lugar, porque mientras que en los sistemas de termocompresión convencional la operación a carga parcial supone una disminución de la eficiencia nominal, en las bombas de absorción apenas se observa esta reducción. Esto es una clara ventaja, más valiosa aún en el caso de los sistemas de energía solar dada la variabilidad de su principal fuente energética (Alarcón-Padilla, 2007). Además, las

¹Destilación multiefecto.

bombas de absorción pueden ser conectadas a un sistema de almacenamiento térmico.

En 2002 con el fin de cumplir con los objetivos del proyecto AQUASOL (Enhanced Zero Discharge Seawater Desalination using Hybrid Solar Technology) se inició una remodelación del sistema experimental de desalinización solar basado en la tecnología MED ya existente en el CIEMAT-Plataforma Solar de Almería, que a partir de entonces pasó a denominarse sistema AQUASOL². El proyecto se enfocó en tres aspectos fundamentales con los que se esperaba reducir el coste de producción de agua desalada en sistemas solares MED. Estos son (Alarcón-Padilla, 2007):

- Incorporación eficiente de la energía solar al proceso. Un campo de concentradores parabólicos complejos estáticos suministra a la planta energía a media temperatura (60-90 °C). Además se dispone de un sistema de almacenamiento térmico mediante un sistemas de dos tanques de agua y una caldera de gas que permite la operación de la planta 24 horas al día.
- Desarrollo de una nueva bomba de calor de absorción de doble efecto totalmente integrada en el proceso.
- Reducción a cero de cualquier vertido del proceso. Se desarrolló un secador solar avanzado para recuperar la sal contenida en la salmuera.

La configuración actual del sistema AQUASOL se muestra en la Fig. 5.6. El sistema es flexible respecto a la fuente energética y tres modos de operación son posibles (Palenzuela et al., 2014):

- Modo sólo solar: El campo de CPCs (*Concentradores parabólicos complejos*) provee toda la energía térmica del sistema. La planta MED es alimentada a través de los tanques.
- Modo sólo fósil: La caldera de gas propano a través de la bomba de calor proporciona toda la energía térmica del sistema. En este modo, la DEAHF (*Double effect absorption heat pump*) puede conectarse directamente a la planta MED o indirectamente a través de los tanques (Alarcón-Padilla et al., 2010).
- Modo híbrido: La energía térmica proviene de ambas fuentes, de la bomba de calor y del campo solar. La DEAHF permite la operación a carga parcial que puede variar del 30% al 100% estrangulando el flujo de vapor que circula entre la caldera y la bomba. En este modo, la alimentación de la planta MED se realiza a través de los tanques.

Recientemente, también se ha probado en esta instalación otro modo de operación (Ibarra et al., 2012). Con el objetivo de reducir el consumo de gas, la caldera fue reemplazada por un generador de vapor que se alimentaba térmicamente por un pequeño

²En el próximo capítulo se estudiará el modelado de una planta MED. Los detalles de esta tecnología se verán en ese capítulo.



(a) Perfil este (2006)



(b) Perfil oeste (2013)

Figura 5.7: DEAHP en la Plataforma Solar de Almería

campo solar de colectores cilindro parabólicos. Los primeros resultados mostraron grandes caídas de presión y temperatura en el vapor producido en el generador. El sistema tiene una gran inercia térmica y requiere una considerable cantidad de energía sólo para calentarse hasta los puntos nominales de operación.

La bomba de calor, construida bajo encargo por ENTROPIE, fue instalada en la Plataforma Solar de Almería en 2006 (v. Fig. 5.7). Esta, es una bomba de calor de absorción de doble efecto que usa como fluidos de trabajo agua-bromuro de litio. Aunque el diseño inicial de la DEAHP fue con una configuración de flujo en paralelo, dados los beneficios desde el punto de vista termodinámico como de transferencia de calor frente a la configuración en serie que se comentaron en la sección anterior, esta tuvo que modificarse. En la práctica, con dicha configuración resultó imposible la correcta regulación de los flujos de disolución entre los distintos contenedores, sobre todo en los periodos de arranque y parada (Alarcón-Padilla, 2007). La Fig. 5.8 muestra el diagrama de flujos actual. La configuración de flujos es en serie, donde la disolución discurre en un ciclo cerrado entre absorbedor, generador de alta temperatura y generador de baja temperatura.

Sobre el esquema habitual de una DEAHP como el que se muestra en la Fig. 5.4a, la del sistema AQUASOL cuenta con una serie de elementos que facilitan su operación. Los más destacables son:

- Dispone de tres bombas de impulsión: *P-01*, *P-02* y *P-03*. Las dos primeras, habituales en DEAHP comerciales, impulsan la disolución entre absorbedor y generador de alta temperatura (la primera) y entre generador de baja temperatura y absorbedor (la segunda). Estas dos bombas fueron dotadas de sus correspondientes variadores de frecuencia con el propósito de poder controlar la operación a carga parcial. La tercera, una mejora de la empresa ENTROPIE, succiona el agua de la parte inferior del evaporador y la rocía en la parte superior de dicho

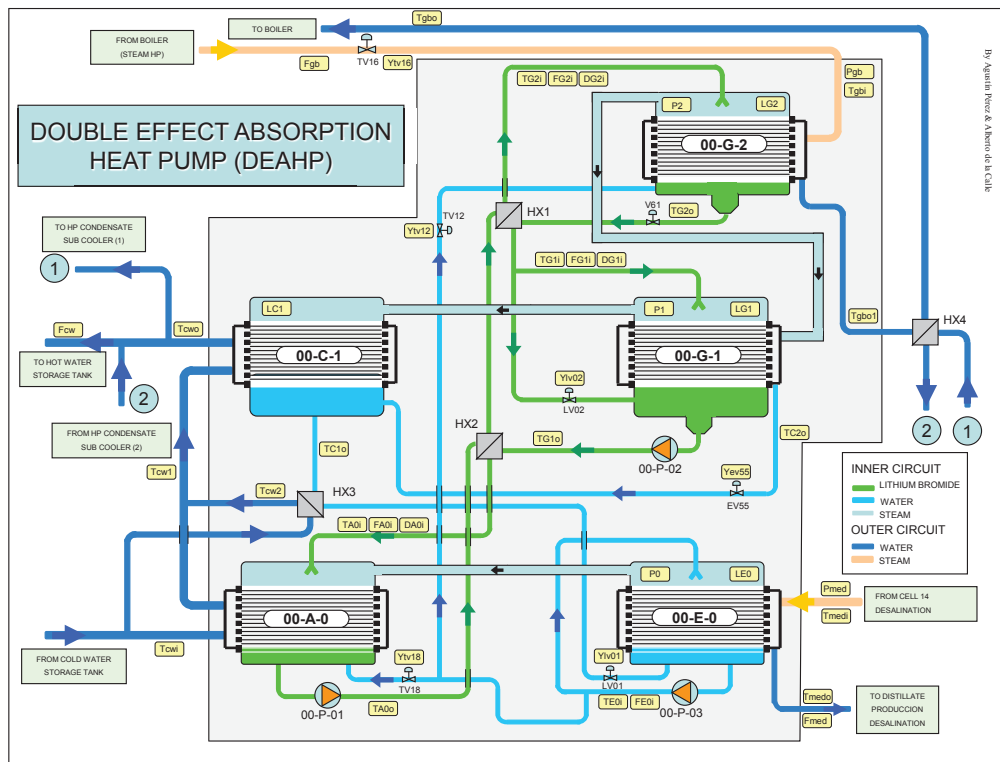


Figura 5.8: Diagrama de flujos de la DEAHp

evaporador. Según la empresa, esta bomba permite controlar perfectamente la distribución uniforme de agua sobre la superficie de los tubos del intercambiador de calor.

- Un hidroyector asociado a la bomba *P-01* permite extraer mediante un sistema de purgas los gases no condensables que se acumulan en el evaporador.
- La válvula automática *EV55* permite regular el flujo de agua que circula entre el condensador de alta temperatura integrado en el generador de baja temperatura y el condensador de baja temperatura. Un correcto uso de esta válvula permite mejorar la operación de la bomba (Palenzuela et al., 2014).
- El intercambiador de calor *HX3* situado en en la tubería que une el condensador y el evaporador permite extraer parte del calor sensible del condensado disminuyendo la cantidad de vapor producido por flash en el evaporador.

La DEAHp se adapta a las características técnicas de la planta MED para recuperar la energía térmica del vapor saturado de baja presión, y por tanto baja temperatura, generado en el último efecto. Una tubería de gran diámetro permite la circulación directa desde el último efecto al evaporador (E0) de la DEAHp. El vapor, cuya temperatura

nominal ronda los 35 °C, condensa en el interior del haz tubular de E0, cediendo su calor latente y parte del sensible al agua que circula por la cara exterior de los tubos. Esta agua evapora y circula hasta el absorbedor (A0). El agua que no evapora cae a un pequeño depósito de donde es extraída por la bomba *P-03* para volver al haz tubular de E0. En A0, el vapor es absorbido por una disolución concentrada en bromuro de litio que como consecuencia cede el calor latente a una corriente de agua de refrigeración que circula por el interior de un haz tubular. Una vez que la disolución ha absorbido el vapor, esta se diluye y es impulsada por la bomba *P-01* hasta el generador de alta temperatura (G2), previo paso por los dos intercambiadores de calor sensible, *HX1* y *HX2*.

En G2 se recibe la entrada de calor de alta temperatura, que en este caso es proporcionada por una caldera de gas propano. En condiciones nominales, la caldera genera vapor saturado a 180 °C que circula desde esta hasta el interior del haz tubular de G2 donde es condensado. Para controlar la carga de la DEAHP se instaló la válvula automática *TV16* cuya caída de presión modula la circulación del vapor. Para asegurar que en G2 se condense todo el vapor, a la salida del haz tubular se instaló una trampa de vapor que disipa la energía del condensado y el vapor, si lo hay, hasta condiciones de saturación a presión ambiente. El condensado regresa a la caldera previo paso del intercambiador de calor sensible *HX4* completando así un ciclo cerrado. En el interior de G2 se produce una primera desorción a alta temperatura de la disolución. Tanto el vapor como la disolución circulan hasta el generador de baja temperatura (G1).

La disolución procedente de G2 fluye hasta G1 por acción del gradiente de presiones entre ambos contenedores. En su paso hacia G1 esta se encuentra con la válvula manual *V61*, totalmente abierta en operación, y con el intercambiador de calor sensible *HX1* que reduce su temperatura. En G1, se produce la segunda desorción, esta vez a baja temperatura, gracias a la condensación en el interior del haz tubular del vapor de alta temperatura procedente de G2. Este condensado tiende a acumularse en las cotas bajas del haz tubular y cuando la válvula automática *EV55* se abre circula hasta el depósito del condensador de baja temperatura (C1) impulsada por la diferencia de presiones existente. Durante el arranque, esta válvula se cierra para permitir que aumente la diferencia de presiones entre G2 y G1; ya que de estar abierta, podría haber una circulación directa de vapor entre contenedores. El vapor generado en G1 y el que se produce por flash debido a la entrada del condensado caliente de G1, es condensado en C1. El calor latente de la condensación se cede a la corriente de agua de refrigeración. El condensado abandona C1, previo paso por el pequeño intercambiador de calor sensible *HX3*, hacia E0 controlado por la válvula automática *LV01*. La disolución, ya concentrada en bromuro de litio, es extraída de G1 por *P-02* y tras su paso por el intercambiador de calor sensible *HX2* donde pierde algo de temperatura, regresa al absorbedor completando el ciclo.

La corriente de agua de refrigeración, que en acoplamiento indirecto proviene del tanque frío y va parar al tanque caliente y en el acoplamiento directo proviene de la salida fría de la planta MED y va a parar a la entrada, en condiciones nominales entra en la bomba a 63.5 °C y sale a 66.5 °C. Sus aportaciones de calor son principalmente en

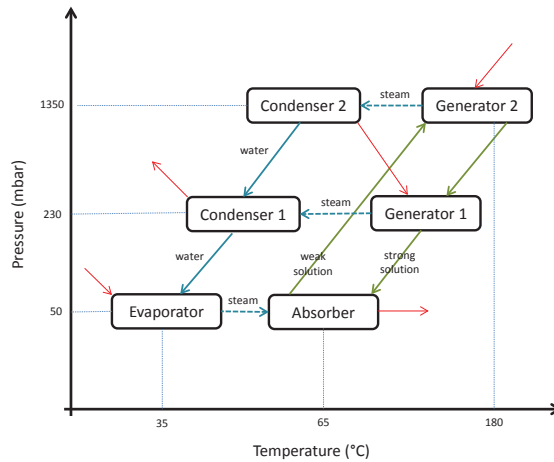


Figura 5.9: Ciclo termodinámico de la DEAHP

A0 y C1, como ya se ha comentado, pero también hay otras dos pequeñas procedentes de *HX3* y *HX4*. Antes de entrar en A0, una pequeña fracción de la corriente se separa del caudal principal y va a parar a *HX3* para volver a unirse antes de su entrada en C1. Tras C1, otra pequeña fracción se separa del caudal principal para tras su paso por *HX4* volver a unirse.

Obviando la transferencia de calor en los intercambiadores de calor sensible, el ciclo termodinámico de la bomba en condiciones nominales puede observarse en la Fig. 5.9. Las flechas rojas representan el sentido de los principales flujos de calor que se dan en la instalación, de las cuales, solo la que va del condensador 2 y el generador 1 (que se encuentran en G1) se queda en el interior de la bomba. Los balances de energía del sistema en condiciones nominales están representados en la Fig. 5.10. La planta MED consume aproximadamente 190 kW a 65 °C, de los cuales son recuperables por la DEAHP unos 100 kW a 35 °C. La caldera de gas proporciona los otros 90 kW esta vez a 180 °C, para que sea la DEAHP la encargada de proporcionar toda la energía a la planta MED.

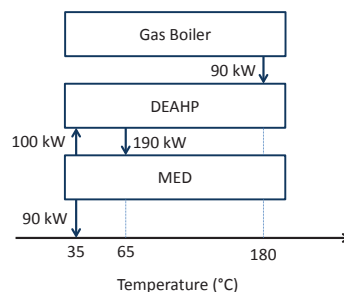


Figura 5.10: Balance energético de la DEAHP

5.2.1. Descripción interna de la bomba de calor

Algunos detalles de la estructura interna de la DEAHF, así como información relacionada con volúmenes, áreas, distancias, etc. es desconocida al no encontrarse entre la documentación entregada por la empresa constructora. La hermeticidad de la bomba impide que la carcasa de acero que la recubre sea abierta, ya que como se ha comentado es de gran importancia que esta siga perfectamente aislada del exterior. Sin embargo, sí se conoce la distribución interna de los haces tubulares. En la Fig. 5.11, se muestra una representación de la sección transversal de la DEAHF. En ella, se aprecia que los contenedores subatmosféricos quedan envueltos por la misma carcasa: A0-E0 y G1-C1. Como se explicó en la §5.1, esto se hace porque al maximizar el área transversal por la que circula el vapor y al reducir la longitud que separa las superficies de evaporación (o generación) y absorción (o condensación), la caída de presión entre ambos elementos se minimiza. Además, se aprecia que la tecnología de dichos contenedores es de película descendente, esto es, haces de tubos horizontales sobre los que circula una delgada película que cae por gravedad en toda la columna de tubos. En la parte superior de estos haces tubulares se encuentran los distribuidores, en este caso de tecnología *full cone nozzle*, que hacen un rociado con gotas de tamaño muy pequeño y bastante uniforme en todas direcciones. En la parte inferior, se encuentran los depósitos de cada uno de los contenedores.

A la izquierda de la figura, separado del conjunto principal de la bomba, se encuentra G2. Este contenedor, construido con tecnología de tubos sumergidos, se diferencia de

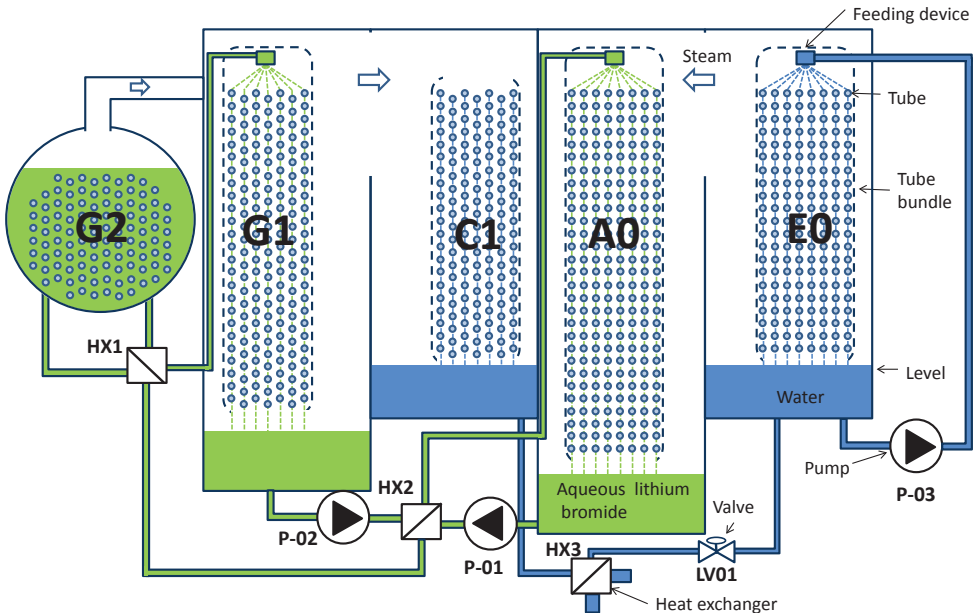


Figura 5.11: Sección transversal de la DEAHF

los otros porque en condiciones nominales su presión es supratmosférica. En él, durante operación, se acumula la mayor parte de la disolución absorbente de la bomba. Como contrapartida, la carcasa que lo recubre es mucho menor y la porción que ocupa el líquido no es despreciable respecto a la del vapor ya que las variaciones en el nivel de líquido afectan a la presión del contenedor. Las entradas y salidas de disolución en G2 se encuentran en su parte inferior, mientras que la salida de vapor se encuentra en su parte superior. Este vapor va a parar al interior de los tubos de G1.

La información relativa a los haces tubulares también es conocida. En la Tab. 5.2 se exponen algunos detalles. Todos los tubos están compuestos de la aleación Cu-Ni 90-10, material que además de ser buen conductor, es resistente frente a la oxidación. El diámetro de todos ellos es 14 mm y su espesor de 0,7 mm. La longitud depende del fluido que circula en el exterior, 2,9 m si es agua y 3 m si es bromuro de litio. La disposición depende del nivel de presión en el exterior, cuadrada para A0 y E0 ya que facilita el tránsito del vapor entre tubos y hexagonal compacta para el resto ya que ahorra volumen en los contenedores. Respecto al área de intercambio, A0 es el haz más grande ya que la absorción es el proceso de cambio de fase con peor coeficiente de transferencia de calor de los presentes en la bomba. En segundo lugar está el G1, en cuyos tubos debe condensarse el vapor procedente de G2. E0 y C1 prácticamente tienen el mismo área de intercambio y el último lugar lo ocupa G2, cuya tecnología es diferente al resto.

Los sentidos en los que circulan los fluidos en el interior de los haces tubulares es desconocido, aunque puede intuirse a partir de la documentación de la bomba. Se cree que el agua de refrigeración atraviesa A0 cuatro veces con la ayuda de tres *water boxes*, mientras que solo lo hace dos veces en C1. El vapor y el condensado hacen un recorrido de ida y vuelta en E0, G1 y G2.

Los intercambiadores de calor sensible se sitúan bajo la carcasa principal de la bomba. Son del tipo *plate & shell*, una tecnología que permite que los fluidos circulen en sentidos opuestos entre delgadas láminas de metal. Con esta tecnología se consiguen muy buenos ratios entre áreas de intercambio frente a volumen del dispositivo. El área de intercambio de los intercambiadores *HX1*, *HX2* y *HX3* es de 5 m².

Tabla 5.2: Detalles de los haces tubulares de la DEAHP

Contenedor	Nº de tubos	Nº columnas	Longitud (m)	Área (m ²)	Disposición ^a
A0	342	9	3,0	45,13	C
E0	190	8	2,9	24,23	C
C1	194	9	2,9	24,74	HC
G1	310	10	3,0	40,90	HC
G2	118	^b	3,0	15,57	HC

^aC: cuadrada, HC: hexagonal compacta

^bLa sección de este haz es circular, por ello, y porque los tubos están sumergidos, la alineación de las columnas es irrelevante

5.3. Modelado dinámico

La metodología de modelado orientada a objetos fue la empleada para la realización de este modelo. Con ella, se pudieron identificar y encapsular los principales fenómenos físicos que se producen en la instalación, y por tanto, cubrir sus dinámicas con el suficiente grado de detalle. Tres niveles de abstracción fueron suficientes para desarrollar el modelo de la planta. El nivel 1 cubre cada uno de los procesos de transferencia de masa y energía del sistema de forma aislada. El nivel 2 ensambla estos procesos de forma gráfica dándoles un sentido funcional. Por último, el nivel 3, también de una forma gráfica, compone el modelo completo de la planta con elementos de menor orden.

El modelo ha sido implementado en Modelica 3.2 ([Modelica Association, 2014](#)). Para aumentar su versatilidad, ha sido desarrollado completamente compatible con la MSL, de donde se han heredado los conectores de *Modelica.Thermal* y *Modelica.Fluid* ([Casella et al., 2006](#)). El diseño del modelo sigue la causalidad natural del sistema, ya que las entradas del modelo coinciden con las del sistema. Sin embargo, la implementación es acausal, y por tanto, si en un futuro requiere ser modificada como ocurrió con el modelo de la planta de generación de hidrógeno (v. §4.3.2.3), este hecho facilitaría el trabajo.

En mecánica de fluidos computacional, la forma de calcular las propiedades termodinámicas tiene una gran influencia en el error y/o en el tiempo de computación ([Kunick et al., 2008](#)). Existen numerosos problemas relacionados con los modelos dinámicos que son directamente causados por el esquema computacional aplicados a ellos. Respecto a los modelos descritos en esta sección, la formulación de las propiedades termodinámicas del agua y del vapor de [IAPWS \(1997\)](#) ha sido empleada cuando se trataba este fluido. La MSL en su apartado de medios dispone de una completa librería de propiedades termodinámicas de agua y vapor desarrollada con esta formulación. Para los modelos que tratan con la disolución de bromuro de litio, se ha desarrollado una completa librería de propiedades termodinámicas que se adecúa a las exigencias de precisión y esfuerzo computacional requeridos. Para más información consultar el apéndice [A](#).

5.3.1. Nivel 1

Este nivel es el jerárquicamente inferior. Pretende encapsular cada uno de los procesos de transferencia de masa o energía del sistema de una forma aislada. Su implementación está basada en ecuaciones y adicionalmente se define una interfaz con conectores de la MSL e iconos para su reutilización en diferentes modelos. En la [Fig. 5.12](#) se pueden observar estos iconos y conectores. Estos modelos constituyen la base sobre la que luego se irán construyendo modelos con un grado de complejidad mayor, pero que son resultado de las interacciones entre los procesos encapsulados aquí descritos.

Todos los modelos aquí expuestos se han recopilado en una librería de Modelica, y aunque fueron desarrollados con el fin capturar la dinámica de la DEAHP, su imple-

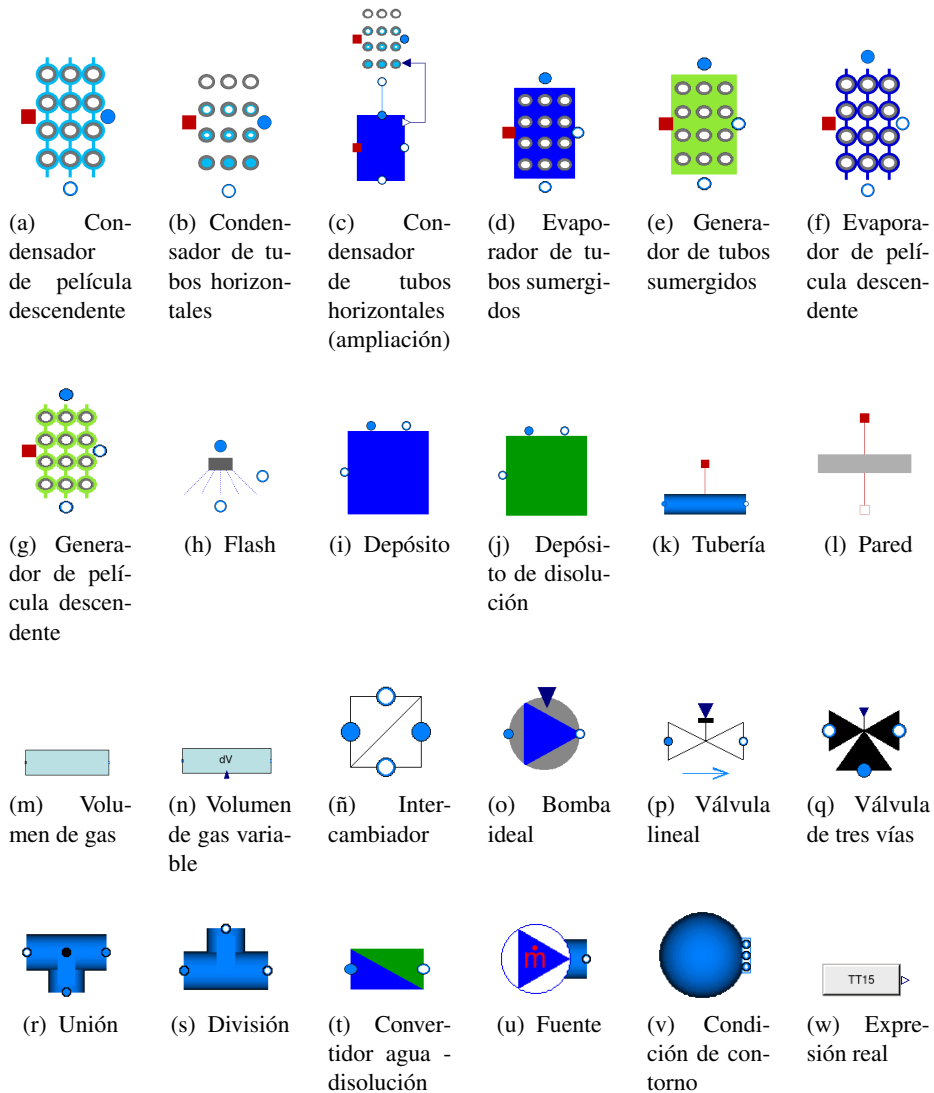


Figura 5.12: Modelos de nivel 1

mentación es lo suficientemente general como para que puedan usarse con otros fines. Esto se verá en el próximo capítulo.

5.3.1.1. Condensador de película descendente

Los condensadores de película descendente son sistemas compuestos por un haz de tubos horizontales cuya temperatura es menor que la temperatura de saturación del vapor que está confinado en el condensador. Como se explicó en la §3.7.1, la superficie

de estos tubos se recubre de una película de condensado que fluye por acción de la fuerza de la gravedad y cae sobre la columna de tubos, incrementándose según se condensa más vapor sobre la película. El espesor de la película determina los ratios de transferencia de masa y calor.

El modelo del condensador, cuyo icono puede verse en la Fig. 5.12a, determina de forma algebraica el caudal de condensación usando un solo CV. Para ello, se llevan a cabo las siguientes suposiciones:

- El único modo de condensación es por película descendente. Como se explicó en la §3.7.1, es el modo dominante.
- Solo hay vapor de agua en el recinto del condensador. El sistema de vacío sirve para asegurar esto. Los gases no condensables en el tiempo de operación pueden considerarse irrelevantes.
- Se asume la teoría de la condensación de Nusselt y la ley de la viscosidad de Newton. Bajo las condiciones de presión y temperatura dadas en el condensador, el agua se comporta como un fluido newtoniano. La anchura de la película permite suponer que el calor se transporta a través de ella solo por conducción.
- La película se distribuye uniformemente sobre todo el tubo, y desciende suavemente al siguiente tubo de la columna. Si no existen imperfecciones en la superficie del tubo y este se encuentra bien expuesto al vapor, se forma una película homogénea sobre él. La longitud y el diámetro de los tubos están diseñados para que con un caudal determinado la transferencia de calor sea la mejor posible sin que la diferencia de temperatura entre entrada y salida sea relevante en la anchura de la película. Cuanto mayor es la película (en los tubos inferiores) esta suposición se hace más cierta.
- La temperatura de la superficie de los tubos es uniforme para todo el haz de tubos. Los condensadores de este tipo están diseñados para que el fluido que circula por el interior de los tubos, ya sea líquido o vapor, no experimente una elevada diferencia de temperaturas entre la entrada y la salida. Al usarse una única temperatura, la temperatura media del tubo, el error producido en un lado del tubo se ve en parte compensado en el otro extremo. La misma compensación existe con la diferencia entre los tubos de entrada y los de salida.
- Se asume la temperatura de la película como la media entre la temperatura de saturación del vapor en la interfase líquido-vapor y la temperatura de la superficie del tubo en la interfase sólido-líquido. Al ser el espesor de la película tan pequeño, puede considerarse que la distribución de temperaturas es lineal entre ambas interfases.

Estas suposiciones hacen válida la expresión dada por la Eq. 3.121 para el coeficiente de transferencia de calor medio de todo el haz de tubos. Con ella, se puede calcular la

producción total de condensado dado por la Eq. 3.122, donde su temperatura es la temperatura de la película. El modelo no tiene ninguna variable derivada, el flujo másico y la temperatura están asignados algebraicamente. No existe acumulación de masa en el condensador. Los flujos másicos de entrada y salida son iguales y de signo opuesto.

Un punto crítico al modelar este proceso es el comienzo y el final de la condensación en los tubos. La variabilidad de la temperatura del tubo y de la presión reinante obliga a ajustar bien el modelo para que se tenga en cuenta que no siempre se condense vapor en el condensador, solo cuando se dan condiciones de saturación.

Lo más evidente sería modelarlo con una expresión condicional, i.e. un *if-else*, en la que la expresión de cruce fuese $(T_w - T_{sl}) > 0$ y donde el flujo másico se definiese por la Eq. 3.122 si la expresión es verdadera, y nulo en caso contrario. Este tipo de soluciones para un modelado estático es el más adecuado ya que es el más intuitivo y su carga computacional no es excesiva. Sin embargo, en un modelado dinámico cada vez que hay un cambio de valor en la expresión de cruce se produce un evento de estado y el integrador numérico se para y recalcula de nuevo la partición del modelo. El aumento de estos eventos conduce a un aumento de la carga computacional, y por tanto, de tiempo de simulación.

Evitar el uso de expresiones condicionales es una buena práctica. No siempre es posible, pero funciones máximo o mínimo ayudan ya que estas no generan eventos. Si a la expresión dada por la Eq. 3.122 se le añade una función máximo de la de la siguiente manera:

$$\dot{m}_{con} = \frac{N_{col}N_{row}\alpha A_{s,t} \text{máx}(0, T_{sl} - T_w)}{L^+}, \quad (5.3)$$

se obtiene el mismo resultado que usando la expresión condicional.

El problema está parcialmente resuelto, y es que algunas variables no están definidas fuera de la condensación. Una de las que da problemas es el coeficiente de transferencia de calor. Si se usa la Eq. 3.121 para calcularlo, cuando $T_{sl} - T_w > 0$ el entorno de simulación muestra un mensaje de error ya que la raíz cuarta no está definida para números negativos. El valor absoluto es útil para asegurar no hacer una operación prohibida. En este caso además, la expresión de cruce está en el denominador. Si $T_{sl} - T_w = 0$, la operación tampoco puede llevarse a cabo. Afortunadamente, al ser ambas temperaturas números reales en la práctica no se obtiene nunca este resultado.

La interfaz del modelo está definida por un conector *HeatPort* y dos conectores *FluidPort*, que pueden verse en la Fig. 5.12a. Estos conectores, integrados en la MSL, son la interfaz de comunicaciones ideal para sistemas termofluidos. Por el *HeatPort*, el modelo de evaporador se comunica con el haz de tubos; recibe la temperatura de la superficie de los tubos y transmite el flujo de calor producido en la condensación. El *FluidPort* de entrada al modelo (círculo relleno), se usa para comunicar el condensador con el volumen de gas. Con él, se recibe la presión y la entalpía específica del vapor, y transmite el flujo másico. El *FluidPort* de salida (círculo vacío) se comunica con el elemento que se encuentra bajo él, que en este caso es un pequeño depósito. Le transmite la presión, el flujo másico y la entalpía específica.

5.3.1.2. Condensador de haz de tubos horizontales

Cuando en un haz de tubos horizontales la condensación ocurre en el interior, la dinámica se complica respecto al de película descendente. Como se vio en la §3.7.1.2, la limitación de espacio fuerza a que factores antes obviados ahora tomen relevancia. Construir un modelo que cubra un amplio rango de operación es una tarea de una complejidad excesiva. Un mejor enfoque es limitar la operación del modelo a aquellos estados físicamente posibles, y a su vez, hacer uso de la máxima información posible que se disponga del elemento a modelar. Así pues, las principales suposiciones son:

- En esta tesis, la velocidad del vapor en los condensadores de tubos horizontales puede considerarse baja. El movimiento del vapor dentro de los tubos no es forzado y es efecto de la diferencia de presiones local que sucede al condensar vapor. La diferencia de los valores de las densidades de las fases líquido y vapor es el origen de esta diferencia de presiones. El sistema reacciona compensando presiones para alcanzar un equilibrio mecánico. Una buena aproximación es considerar estancado el vapor en el condensador. Así, una única presión es necesaria para representar todo el condensador.
- El vapor está compuesto solo de agua, y cualquier otro gas derivado de la evaporación es despreciado. El sistema de vacío asegura esto.
- Al estar a menor temperatura la superficie de los tubos que la de saturación del vapor, se produce condensación. Asumiendo que el vapor está estancado, el modo de condensación es por película descendente ya que es el modo dominante. Una película de condensado recubre la superficie interior del tubo y cae por gravedad a su parte inferior. El agua de la película se comporta como un fluido Newtoniano y se puede aplicar la teoría de la condensación de Nusselt.
- Se asume una temperatura media de la superficie de los tubos para todo el haz de tubos. Los condensadores a fin de lograr la mayor eficiencia, se diseñan para homogeneizar la temperatura de trabajo.
- La película recubre homogéneamente la superficie interior de los tubos. No hay imperfecciones en la superficie. La superficie cubierta por la acumulación de destilado en su parte inferior es considerada despreciable.
- El vapor es condensado a una temperatura inferior a su temperatura de saturación. Se asume como temperatura de la película, la media entre la temperatura de la superficie del tubo y la temperatura de saturación del vapor.
- El condensado es evacuado axialmente por un gradiente hidráulico, a bajas velocidades y en un régimen laminar. Al ser los tubos suficientemente largos, este condensado adquiere la temperatura de la superficie de los tubos.

En estas condiciones, el coeficiente de transferencia de calor medio de la película que recubre el haz de tubos puede calcularse con la Eq. 3.123. Haciendo uso de la Eq. 5.3, se obtiene el caudal másico condensado en los tubos. El calor transferido por la condensación puede calcularse con la siguiente expresión:

$$\dot{Q}_w = N_{col}N_{row}\alpha A_{s,t} \text{máx}(0, T_{sl} - T_w). \quad (5.4)$$

Una suposición necesaria, que añade robustez y un eficiente consumo computacional al modelo, es asumir que el vapor no logra cruzar el evaporador. Lo único que sale por el condensador es líquido, como si de una trampa de vapor se tratase. Este condensado a la temperatura de la superficie de los tubos, tampoco se acumula. Todo lo que se condensa sale. El balance de masas expresa este hecho:

$$0 = \dot{m}_{con} - \dot{m}_{out}. \quad (5.5)$$

El balance de energía debe reflejar la pérdida de parte del calor sensible del condensado para que este alcance un equilibrio termodinámico.

$$\dot{Q}_{w2} = \dot{m}_{con}h_f - \dot{m}_{out}h_w. \quad (5.6)$$

Una interfaz con un conector *HeatPort* y dos conectores *FluidPort* permite la encapsulación de este modelo (v. Fig. 5.12b). Las dos aportaciones de calor del condensador, i.e la Eq. 5.4 y 5.6, se transmiten con un vector de *HeatPort* al haz de tubos y recibe su temperatura. El *FluidPort* de entrada se debe usar para la conexión a un volumen de gas que contenga vapor de agua. Por él se recibe la presión y la entalpía específica del vapor y se transmite el flujo másico. El *FluidPort* de salida se comunica con el elemento que se encuentra bajo él, le transmite la presión, el flujo másico y la entalpía específica del condensado.

Ampliación del condensador. Las restricciones del modelo del condensador de haz de tubos horizontales presentado son demasiado exigentes y limitan en demasía el rango operacional del condensador. A la salida del condensador del generador de baja temperatura (G1) existe una válvula que en operación normal abre y cierra para controlar la presión del generador de alta temperatura (G2). Por tanto, la suposición de que no se acumula condensado en el interior de los tubos no se cumple ya que parece evidente que si esta válvula está cerrada el condensado circulará por el condensador en gradiente hidráulico hasta que se encuentre con la válvula acumulándose ahí.

Para solventar este hecho, se introduce un modelo de un depósito del mismo volumen que el condensador. Este está conectado al modelo del condensador en su salida (cf. Fig. 5.12c).

El coeficiente de área mojada aparente, F_A , da una idea de cuán lleno está el condensador y qué superficie de este puede ser usada para condensar. Calcular este coeficiente analíticamente es una tarea de una complejidad excesiva ya que habría que saber la distribución del gradiente hidráulico en el condensador. Una buena aproximación es

emplear en su lugar el coeficiente de volumen mojado aparente, F_V , que es la fracción de volumen que ocupa la masa del condensado entre el volumen total de condensador.

$$F_A = \frac{A_{wet}}{A_T} \approx F_V = \frac{V_{wet}}{V_T} = \frac{m}{\rho V_T}. \quad (5.7)$$

Este coeficiente se transmite al modelo del condensador para que se limite el área de condensación a la disponible en las ecuaciones Eq. 5.3 y 5.4. Este ajuste permite, por un lado que bajo ningún concepto el condensador se desborde de condensado, y por otro que la capacidad de condensación disminuya en la medida en la que va llenándose de líquido.

El balance másico de condensado en el condensador se calcula con la siguiente expresión:

$$\dot{m} = \dot{m}_{in} - \dot{m}_l, \quad (5.8)$$

donde la variación de la masa, m , depende del condensado que entra \dot{m}_{in} y el que sale \dot{m}_l . El balance energético de esta masa de agua será:

$$\begin{aligned} H &= mh_l, \\ \dot{H} &= \dot{Q}_w + \dot{m}_{in}h_{in} - \dot{m}_lh_l + \frac{m}{\rho}\dot{p}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

La entalpía de la masa de agua, h_l , varía en función de la aportación energética de la entrada, $\dot{m}_{in}h_{in}$, el trabajo de expansión, $\frac{m}{\rho}\dot{p}$, y el intercambio de calor con la pared de tubería, \dot{Q}_w . Este último se calcula mediante la ley de enfriamiento de Newton:

$$\dot{Q}_w = A_{wet}\alpha_l(T_w - T_l), \quad (5.10)$$

que para simplificar, el coeficiente de transferencia de calor entre el líquido y la pared, α_l , se asume constante y cuyo valor se calibra.

El condensador no tiene una trampa de vapor al final, sino que más bien se trata de un embudo donde se recoge todo el condensado. Si existe acumulación de condensado, este tiene prioridad en la salida ya que su densidad es mayor. Cuando la apertura de la válvula permite que el caudal que sale del condensador sea mayor que el caudal de producción de condensado, entonces puede llegarse a una situación en la que el vapor logre atravesar el condensador. Este hecho tiene una gran influencia en la presión del vapor que hay en C1-G1, y por tanto no puede obviarse.

Si la situación se maneja con una expresión condicional, el modelo presenta problemas en la inicialización ya que la transición entre estados no es suave. Una solución muy práctica es suavizar esta transición haciendo uso del coeficiente de volumen mojado. Se define el coeficiente límite como:

$$F_{V,lim} = \text{mín}(1, y \cdot F_V), \quad (5.11)$$

donde y es un factor multiplicativo usado para fijar un límite en el volumen del condensador a partir del cual el vapor alcanza el final del condensador y empieza a atravesarlo.

Por ejemplo, si $y = 20$ el vapor comenzará a atravesar el condensador cuando su volumen de condensado sea menor que el 5%.

La proporción de líquido y vapor que sale del condensador se calcula en relación al coeficiente límite:

$$\dot{m}_l = F_{V,lim} \dot{m}_{out}, \quad (5.12)$$

$$\dot{m}_v = (1 - F_{V,lim}) \dot{m}_{out}, \quad (5.13)$$

donde el caudal de salida del condensador, \dot{m}_{out} , viene fijado por la válvula. La entalpía de este caudal se calcula de acuerdo a esta proporcionalidad:

$$h_{out} = F_{V,lim} h_l + (1 - F_{lim}) h_{sv}, \quad (5.14)$$

que varía entre la entalpía del líquido y la del vapor, que está en saturación.

La interfaz tiene un conector *RealOutput*, un conector *HeatPort* y tres conectores *FluidPort*. El puerto *RealOutput* sirve para transmitir al condensador el coeficiente de área mojada aparente. Un parámetro permite la aparición de una entrada *RealInput* en el condensador. Uno de los dos conectores *FluidPort* de entrada está pensado para que se conecte directamente con la salida del condensador. Por él, se recibe el flujo másico de entrada y su entalpía específica. El otro conector *FluidPort* de entrada, se debe conectar a un volumen de gas. Por este último, se recibe la presión y la entalpía específica del vapor, y se transmite en el caso de que $F_{V,lim}$ sea menor que 1 el flujo másico de vapor que atraviesa el condensador. El conector *FluidPort* de salida transmite presión y entalpía específica y recibe flujo másico, por tanto el elemento al que esté conectado, i.e. una válvula o una bomba, debe calcular el flujo másico.

5.3.1.3. Evaporador de tubos sumergidos

Un evaporador de tubos sumergidos es un sistema diseñado para llevar a ebullición una gran masa de líquido. Este se encuentra confinado en un depósito en el que está inmerso un haz de tubos horizontales. La superficie de los tubos se encuentra a una temperatura superior que la de saturación del líquido y cuando la masa de líquido alcanza la temperatura de saturación, el aporte calórico de los tubos hace bullir el líquido.

Las siguientes suposiciones se tienen en cuenta para realizar el modelo del evaporador:

- El líquido esta compuesto sólo de agua. Aunque el modelo está diseñado para este medio, sus resultados podrían extrapolarse a cualquier otro líquido monoespecie que presente un cambio de fase.
- El vapor del recinto es de la misma especie que la del líquido. El sistema de purgas asegura que solo haya agua en estado gaseoso dentro de la bomba.
- La masa de líquido nunca deja al descubierto el haz de tubos. La operación normal de un evaporador de este tipo requiere que los tubos estén cubiertos para maximizar la superficie de intercambio, y por tanto, la transferencia de calor.

- El vapor no se condensa en este elemento. Aunque las variaciones de presión permitirían una condensación en el mismo recinto, éstas suelen evitarse para que solo se produzcan en el elemento condensador.
- La masa de agua se considera en equilibrio termodinámico, y por tanto, se desprecian los gradientes de temperatura en ella. Las propiedades termodinámicas intensivas son las mismas en cualquier punto del evaporador. Así mismo, la temperatura de la superficie de los tubos se va a considerar uniforme.
- La ebullición es saturada. Sólo cuando la masa entera de líquido alcanza propiedades de saturación se produce cambio de fase. El aporte energético de los tubos fuera de la saturación se usa exclusivamente para aumentar la temperatura del líquido.
- Aunque existe un flujo de líquido que entra y sale del evaporador, su velocidad es baja y se puede asumir que la ebullición se produce en condiciones de estanqueidad.
- El punto de operación del evaporador se encuentra en el régimen de ebullición nucleada. Como se explicó en la §3.7.2.1, el cambio de regímenes es un punto débil en el modelado dinámico de este tipo de sistemas: ni es una transición suave, ni se puede definir un punto de transición para cualquier estado. Se asume que el evaporador se encuentra en este régimen independientemente de la diferencia de temperaturas entre el líquido y la superficie de los tubos.

En estas condiciones, con la Eq. 3.128 se puede calcular el coeficiente de transferencia de calor entre el líquido y la pared de los tubos. El flujo de calor de los tubos al líquido se calcula como:

$$\dot{Q}_w = N_{col}N_{row}\alpha A_{s,t} \text{máx}(0, T_w - T). \quad (5.15)$$

El balance másico del evaporador es:

$$\dot{m} = \dot{m}_{in} - \dot{m}_{ev} - \dot{m}_{out}, \quad (5.16)$$

donde la variación de la masa del evaporador, m , depende del flujo que entra \dot{m}_{in} , que sale \dot{m}_{out} y el que se evapora \dot{m}_{ev} . El balance energético del evaporador puede expresarse según la Eq. 3.33 como:

$$\begin{aligned} H &= mh, \\ \dot{H} &= \dot{Q}_w + \dot{m}_{in}h_{in} - \dot{m}_{ev}h_{sv} - \dot{m}_{out}h + \frac{m}{\rho}\dot{p}. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Con este balance, el rango de operación del evaporador es muy amplio. Permite trabajar al evaporador incluso fuera de las condiciones de saturación. Lo habitual en este tipo de instalaciones es que en todo momento exista un equilibrio termodinámico entre

fases, pero si la aportación al flujo de calor procedente del exterior es baja y la entrada de fluido es fría en comparación con la masa del evaporador puede que el evaporador se aleje de las condiciones de operación.

En este caso, el uso de una expresión condicional para el cálculo de flujo másico de evaporación es obligatorio. Si la entalpía específica del evaporador es menor que la entalpía de saturación a la presión dada, entonces no hay ebullición. En caso contrario, el flujo másico se calcula de acuerdo a la Eq. 3.104 como:

$$\dot{m}_{ev} = \frac{1}{h_{sv} - h_{sl}} \left(\dot{Q}_w - \dot{m}_{in}(h_{sl} - h_{in}) + m\dot{p} \left(\frac{1}{\rho} - \frac{\partial h_{sl}}{\partial p} \right) \right). \quad (5.18)$$

A pesar de que la expresión dada por la Eq. 5.18 asegura transiciones suaves entre regiones, sin saturación y con saturación, lo cierto es que en algunas ocasiones se han observado problemas de chattering, esto es transiciones abruptas y repetitivas (Bonilla et al., 2012a). Este problema penaliza el esfuerzo computacional llegando en ocasiones a hacer inviable la simulación. El origen de este tipo de fenómeno puramente computacional y ligado al modelado dinámico de fluidos se debe a pequeños errores computacionales en el cálculo de las propiedades termodinámicas. Si el problema está en la tolerancia del integrador puede solventarse disminuyéndola, aunque lo más común suele ser que el cálculo de las propiedades termodinámicas presente pequeñas discontinuidades entre fases, como ocurre en las regiones del agua en el estándar industrial (IAPWS, 1997).

Una solución práctica y fácil de implementar, que no resuelve el problema pero reduce su impacto llegando incluso a evitarlo en algunas simulaciones, es establecer una histéresis en la expresión condicional. La nueva expresión condicional será $(h < h_{sl} + eps)$ donde eps es un número que determina la tolerancia del cambio de región. Cada vez que se cruza de una región a otra el signo de eps cambia. Tampoco es necesario que este sea un número muy alto ya que podría llegar a desvirtuar el resultado del modelo. Valores de $eps = \pm 10^{-2} \text{ J} \cdot \text{Kg}^{-1}$ han demostrado una buena respuesta en las simulaciones.

La Fig. 5.12d muestra la interfaz del modelo, un *HeatPort* y tres *FluidPort* son los conectores usados para comunicar el modelo. El *HeatPort* se conecta con la pared del haz de tubos al cual se le transmite el flujo calor demandado en el evaporador y recibe su temperatura. El *FluidPort* situado en su parte superior es el de entrada de líquido. Por él, se recibe un flujo másico de entrada y una entalpía específica. El *FluidPort* situado en el lateral se usa para la comunicación con el volumen de gas. Por él, recibe la presión y la entalpía específica del vapor y le transmite un flujo másico de evaporación. El conector *FluidPort* situado en su parte inferior es el de salida de líquido. Por él, se transmite una presión y una entalpía específica, y debe recibir un flujo másico de salida.

Generador de tubos sumergidos. El modelo del evaporador está diseñado para que el fluido de la fase líquida y de la fase vapor sean el mismo. En un generador, la fase líquida está constituida por una disolución de al menos dos componentes de los cuales sólo uno

es susceptible de pasar a la fase vapor, y este hecho debe reflejarse en la ecuaciones. Transformar el modelo de un evaporador de tubos sumergidos en un generador de tubos sumergidos requiere de nuevas suposiciones:

- La masa de líquido del CV está en equilibrio termodinámico. Esto implica que también existe un equilibrio químico, y por tanto, toda la masa de líquido tiene la misma concentración.
- La fase vapor sólo está constituida por el disolvente, no existen trazas de soluto en el vapor. Si el soluto es una sal, como el LiBr, su presión de vapor es muy elevada y se puede despreciar este cambio de fase.

La variable de fracción másica w , definida como la masa del soluto entre la masa total, va a ser una variable de estado más del sistema.

$$w = \frac{m_{sol}}{m}. \quad (5.19)$$

El cálculo de la fracción másica, requiere por un lado del balance másico total de la disolución (v. Eq. 5.16) y por el otro del balance másico del soluto:

$$\dot{m}_{sol} = \dot{m}_{in}w_{in} - \dot{m}_{out}w. \quad (5.20)$$

Si se despeja m_{sol} de la Eq. 5.19 y se deriva, entonces:

$$\dot{m}_{sol} = \dot{m}w + m\dot{w} = \dot{m}_{in}w - \dot{m}_{ev}w - \dot{m}_{out}w + m\dot{w}. \quad (5.21)$$

Usando esta expresión en la Eq. 5.20 se puede expresar explícitamente la variación de la fracción másica con el tiempo en función de las variables de estado:

$$m\dot{w} = \dot{m}_{in}(w_{in} - w) + \dot{m}_{ev}w. \quad (5.22)$$

Las ecuaciones del generador son las mismas que la expresadas para el evaporador, y las propiedades termodinámicas se determinan con la entalpía, presión y fracción másica. El flujo másico de evaporación se calcula de acuerdo a la expresión condicional ($h < h_{sl} + eps$), donde ahora h_{sl} es la entalpía de saturación de la disolución. El cálculo de esta entalpía de saturación se debe hacer con la presión y con la fracción másica. Sin embargo, es difícil encontrar en la literatura expresiones de la entalpía de saturación de disoluciones en función de estas dos variables. Lo habitual es encontrarse una expresión de la presión de vapor del disolvente en función de su temperatura y fracción másica. Su función inversa permite calcular la temperatura de saturación en función de la presión y la fracción másica. Con esta temperatura de saturación, entonces sí se puede calcular la entalpía de saturación. Cuando la expresión condicional es falsa, entonces el flujo másico se calcula como:

$$\dot{m}_{ev} = \frac{1}{h_{sv} - h_{sl}} \left(\dot{Q}_w - \dot{m}_{in}(h_{sl} - h_{in}) + m\dot{p} \left(\frac{1}{\rho} - \frac{\partial h_{sl}}{\partial p} \right) - m\dot{w} \frac{\partial h_{sl}}{\partial w} \right), \quad (5.23)$$

donde se ha tenido en cuenta la variación de fracción másica en la Eq. 3.104, y las derivadas parciales de la entalpía de saturación se calculan según las expresiones dadas en la Eq. 3.108.

La interfaz del modelo del generador es la misma que la del evaporador (v. Fig. 5.12e). Sin embargo, es importante destacar que el conector *FluidPort* también transmite fracciones másicas como variables tipo *stream* (Franke et al., 2009). Por tanto, en el caso de los conectores de entrada y salida de la disolución esta variable es recibida y transmitida respectivamente.

5.3.1.4. Evaporador de película descendente

El evaporador de película descendente es un sistema compuesto por un haz de tubos horizontales sobre los que se rocía un líquido. Se forma entonces una película de líquido sobre la superficie que fluye por acción de la fuerza de la gravedad y cae sobre la columna de tubos, disminuyendo según se produce la evaporación. El espesor de la película determina los ratios de transferencia de masa y calor.

Las principales suposiciones que se han tomado para hacer el modelo son:

- El rocío se distribuye uniformemente sobre la primera fila de tubos. La aparición de huecos secos y otras perturbaciones relacionadas con una mala distribución tienen un efecto negativo sobre dicha transferencia.
- El espesor de la película es uniforme a lo largo de todo el tubo. Un espesor medio compensa la diferencia angular debido a la gravedad.
- La temperatura de la superficie de los tubos es uniforme para todo el haz de tubos. Al igual que los condensadores, el fluido que circula por el interior de los tubos no experimenta una elevada diferencia de temperaturas entre la entrada y la salida.
- Se asumen unas propiedades termodinámicas uniformes para toda la película.

A continuación se presentan dos diseños diferentes del modelo de evaporador de película descendente, uno para hacer un análisis pormenorizado de la dinámica del evaporador y otro con un grado de simplicidad mayor para usarse en el modelado de plantas con este tipo de evaporadores. La convergencia de ambos modelos se demostró en el trabajo de de la Calle et al. (2013b).

Diseño detallado. Como ya se ha comentado previamente, el espesor de la película es un factor determinante para calcular los ratios de transferencia de masa y calor. Cada tubo de la columna de tubos tiene un espesor diferente ya que este se va reduciendo en la medida en la que evapora el líquido, siendo mucho menor en los tubos inferiores que en los superiores. Para un modelado detallado es necesario saber el espesor de la película en cada una de las filas. Siguiendo una metodología de modelado orientado a objetos es posible establecer una jerarquía de modelos, donde el nivel inferior lo ocupa

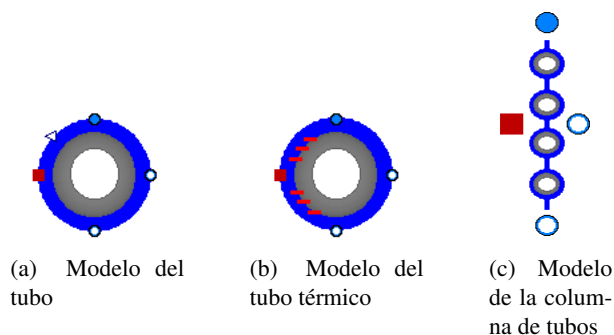


Figura 5.13: Modelos intermedios del evaporador de película descendente (diseño detallado)

el modelo del tubo que reproduce la dinámica de la película alrededor de un tubo, que es usado en el modelo del tubo térmico que le añade el cálculo de la transferencia de calor a la película, que a su vez es llamado iterativamente para modelar la columna de tubos y que finalmente en el nivel superior estos resultados son extrapolados para obtener la dinámica completa del haz de tubos.

El modelo del tubo es un modelo de balances de masa y energía para la película. Se trata a la película de líquido como un sólo CV en equilibrio termodinámico y que posee unas propiedades termodinámicas uniformes. La masa que queda pegada al tubo puede calcularse de acuerdo al flujo másico que proviene del tubo anterior (o del rocío en el primer tubo) \dot{m}_{in} , al flujo másico que se pierde con la evaporación \dot{m}_{ev} y al flujo másico que cae por acción de la fuerza de la gravedad \dot{m}_{out} . La variación de la energía en la película depende de las entradas y salidas de flujo, el trabajo de expansión y el flujo de calor proveniente de la superficie del tubo. Estos balances son los mismos que los expresados por las Eq. 5.16 y 5.17 en el modelo del evaporador de tubos sumergidos (v. §5.3.1.3).

El cálculo del flujo de evaporación presenta los mismos problemas que el del evaporador de tubos sumergidos. Para modelarlo, se empleó la misma técnica de histéresis en la expresión condicional, y la Eq. 5.18 fue la escogida para calcular el flujo en condiciones de evaporación.

El flujo másico que cae de la película puede calcularse analíticamente si se considera que el líquido que la forma se comporta como un fluido newtoniano, y que la fuerza de la gravedad es la única que actúa sobre ella. La distribución de velocidades para una película moviéndose sobre un tubo horizontal fue calculada en la §3.7.1.1. La Eq. 3.112 expresaba el flujo másico por unidad de longitud de cada uno de los dos lados del tubo en función de la posición angular. Si se integra esta expresión a todo rango angular, se obtiene el flujo másico por unidad de longitud medio para cada uno de los lados del

tubo:

$$\Gamma = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \Gamma_\theta d\theta = \frac{2\rho_f(\rho_f - \rho_v)g\delta^3}{3\eta\pi}. \quad (5.24)$$

El flujo másico de caída se calcula según:

$$\dot{m}_{out} = 2\Gamma, \quad (5.25)$$

donde Γ se calcula de acuerdo a la Eq. 5.24. El espesor de la película puede obtenerse con la definición de la densidad, ya que:

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{m}{\pi l(r + \delta)^2 - \pi l r^2}. \quad (5.26)$$

Despejando el espesor de la película:

$$\delta = -r + \sqrt{r^2 + \frac{m}{\pi\rho l}}, \quad (5.27)$$

donde la masa ha sido calculada con el balance másico. Evidentemente, este cálculo introduce un lazo algebraico en el sistema de ecuaciones, pero el entorno de simulación es capaz de resolverlo.

Un efecto de la película a modelar es la aparición de huecos secos. Cuando el flujo másico de entrada a la película es bajo empiezan a aparecer una serie de huecos secos que perjudican la transferencia de calor. Existen correlaciones experimentales para determinar cuándo aparece este fenómeno y cuál es su impacto de acuerdo al coeficiente de área aparente (v. §3.7.2.3). Para evitar el uso de una expresión condicional como en la Eq. 3.129, se puede calcular F_A como:

$$F_A = \min\left(1, \frac{Re_{top}}{Re_{onset}}\right), \quad (5.28)$$

donde Re_{top} se calcula con el flujo másico de entrada al tubo y sus propiedades termodinámicas y Re_{onset} de acuerdo a la Eq. 3.130. Para simplificar, se asume que este efecto sólo tiene carácter longitudinal; el coeficiente se multiplica a l en todas las expresiones donde aparezca explícitamente la longitud del tubo.

Para permitir probar diferentes correlaciones, un modelo parametrizable lleva a cabo el cálculo del coeficiente de transferencia de calor. Este modelo permite elegir entre un coeficiente constante o usar diferentes correlaciones empíricas basadas en el número de Nusselt. Si se despeja de las Eq. 3.67 y 3.68, se puede calcular el coeficiente de transferencia de calor con el número de Nusselt:

$$\alpha = kNu \left(\frac{g\rho^2}{\eta^2}\right)^{1/3}. \quad (5.29)$$

La interfaz del modelo, cuyo icono se muestra en la Fig. 5.13a, está compuesta por un conector *RealOutput*, un conector *HeatPort* y tres conectores *FluidPort*. Por el

RealOutput se transmite el coeficiente de transferencia de calor. Por el conector *HeatPort* se recibe el flujo de calor y se transmite la temperatura de la película. De los tres conectores *FluidPort*, uno es para entrada de líquido, otro para la salida del vapor y un tercero para la salida del líquido. Por el de entrada, se recibe flujo másico y entalpía específica; por el del vapor, se recibe presión y se transmite flujo másico y entalpía específica; y por el de salida, se transmite flujo másico y entalpía específica.

El cálculo de la transferencia de calor entre la película y la superficie del tubo se hace en el modelo del tubo térmico (v. Fig. 5.13b). En él, se emplea un modelo de convección térmica (incluido en la MSL) para calcular el flujo de calor que se da entre dos puntos a temperaturas diferentes. En uno de estos puntos se sitúa el modelo del tubo que transmite la temperatura de la película, y en el otro se sitúa un conector *HeatPort* por el que se recibirá la temperatura de la superficie del tubo. El modelo es transparente respecto a los fluidos, una interfaz con tres *FluidPort* propaga las entradas y salidas del modelo del tubo.

Un vector de tubos térmicos conectados en serie componen el modelo de la columna de tubos (v. Fig. 5.13c). Excepto el primer y el último tubo, cuya entrada y salida respectivamente se conectan directamente a la interfaz, cada uno de los tubos de la columna se conectan en serie de tal forma que la salida del tubo de arriba se conecta con la entrada del tubo de abajo. Los conectores *FluidPort* de salida del vapor se conectan todos al mismo conector de la interfaz donde comparten presión y los flujos másicos se suman. Al igual pasa con el *HeatPort*, todos los tubos se conectan al mismo conector de la interfaz compartiendo la temperatura de la superficie de los tubos y sumando todos los flujos de calor.

El modelo completo del evaporador, mostrado en la Fig. 5.12f, asume que la dinámica de todas las columnas es la misma, y por tanto, extrapola los resultados de una columna de tubos al resto. Esto se hace mediante unos amplificadores diseñados para tal fin que escalan los resultados de las variables tipo flujo, es decir, los flujos másicos y el flujo de calor. La interfaz está compuesta por un *HeatPort*, por donde se recibe la temperatura de la superficie de los tubos y transmite el flujo de calor total, y por tres *FluidPort*, que al igual que en los otros submodelos modelan los flujos de entrada y salida del líquido y el vapor. Por el *FluidPort* superior se recibe el flujo másico y entalpía específica del flujo de líquido de entrada. Por el *FluidPort* lateral se recibe la presión desde el recinto del gas, y se transmite el flujo másico y entalpía específica de evaporación. El *FluidPort* inferior transmite el flujo másico y entalpía específica de la película al salir del evaporador.

Diseño simplificado. El diseño detallado del modelo del evaporador no es adecuado para aplicaciones que requieran tiempos bajos de simulación. Su complejidad incrementa en la medida en la que lo hace el número de tubos de la columna, si éstos son muchos y se usan varios evaporadores en la misma simulación, como exige un modelo completo de la DEAHP, su ejecución se hace inviable.

La necesidad de obtener un modelo cuyo esfuerzo computacional sea menor e inde-

pendiente del número de tubos hizo obligado el desarrollo de un nuevo. La experiencia adquirida con del modelo del condensador (v. §5.3.1.1) fue la base para un nuevo diseño, ya que este es un modelo algebraico y su complejidad no aumenta con el número de tubos.

El diseño simplificado del modelo del evaporador asume:

- La masa de la película de líquido es tan pequeña que puede ser despreciada en las ecuaciones.
- La diferencia entre la transferencia de calor de los tubos superiores y de los tubos inferiores es pequeña y se compensa, por lo que se puede aceptar un coeficiente de transferencia medio para todo el haz de tubos.

Con estas suposiciones, el balance másico del evaporador es:

$$0 = \dot{m}_{in} - \dot{m}_{ev} - \dot{m}_{out}, \quad (5.30)$$

y el balance energético del evaporador es:

$$0 = \dot{Q}_w - \dot{m}_{in}(h - h_{in}) - \dot{m}_{ev}L. \quad (5.31)$$

Las Eq. 5.30 y 5.31 son el resultado de despreciar la masa m y su derivada explícitamente en las Eq. 5.16 y 5.17. Esto no afecta a la entalpía específica que junto con la presión determina las propiedades termodinámicas de la película. Es importante remarcar que en este caso, los balances másico y energético son para todo el haz de tubos, y no para un solo tubo como ocurría en el diseño detallado del modelo.

Al ser tan reducido el balance de energías, el cálculo del flujo de evaporación se simplifica. No se hace necesario la expresión condicional y con una función máximo es suficiente:

$$\dot{m}_{ev} = \text{máx} \left(0, \frac{(\dot{Q}_w - \dot{m}_{in}(h_{sl} - h_{in}))}{L} \right). \quad (5.32)$$

El cálculo del flujo de calor se hace en el mismo modelo a través de la Eq. 5.15, y al igual que con el diseño detallado, un modelo parametrizable permite calcular el coeficiente de transferencia de calor con diferentes correlaciones.

El modelo queda encapsulado con la misma interfaz que el diseño detallado (v. Fig. 5.12f).

Generador de película descendente (diseño simplificado). Cuando el fluido está constituido por una disolución y es el disolvente el que pasa a la fase vapor se deben tener en cuenta nuevas variables en la evaporación. Este caso es parecido al del generador de tubos sumergidos, la transformación del modelo requiere de nuevas suposiciones:

- Se asumen propiedades uniformes en la película. Se considera la misma concentración de soluto en toda la película (equilibrio termodinámico).

- El vapor sólo está compuesto de disolvente. En la evaporación todo el soluto se queda en la película.

Este modelo también es un modelo algebraico. Todas las ecuaciones del diseño simplificado del evaporador son válidas para el generador, sin embargo, para el cálculo de las propiedades termodinámicas es necesaria la fracción másica de la película. Al haber despreciado la masa en todas las ecuaciones, no se puede calcular la fracción másica de acuerdo a la Eq. 5.19. Para ello, se usa la siguiente expresión obtenida a partir de la Eq. 5.22:

$$w = \frac{\dot{m}_{in} w_{in}}{\dot{m}_{in} - \dot{m}_{ev}}. \quad (5.33)$$

En el cálculo del balance energético y del flujo másico de evaporación, dados por las Eq. 5.31 y 5.32, el calor latente es definido como la resta entre la entalpía de saturación del vapor y la entalpía de saturación de la disolución a esa presión y a la fracción másica calculada.

La encapsulación del modelo del generador puede verse en la Fig. 5.12g. Los conectores y sus funcionalidades son idénticos al del evaporador, a excepción de que los conectores *FluidPort* de la disolución (superior e inferior) también propagan fracciones másicas. En el caso del conector superior, la fracción másica se recibe; en el caso del conector inferior, la fracción másica se transmite.

Generador/Absorbedor de película descendente (diseño simplificado). Si la disolución además tiene la capacidad de absorción, el modelo debe poder admitir que el vapor pueda entrar o salir de él. La absorción no es ni más ni menos que un cambio de fase vapor-líquido, y al igual que la condensación, se produce cuando la presión de vapor es superior a la presión del recinto. Desde el punto de vista termodinámico, puede entenderse como la respuesta del sistema para que el conjunto alcance un equilibrio termodinámico de fases. Así pues, si la presión del recinto es mayor que la presión de vapor de la película, el sistema absorberá vapor hasta igualar dichas presiones, pero si es menor el sistema cederá vapor hasta igualar las presiones.

Este modelo asume todas las suposiciones que le preceden, las del evaporador de película, las del diseño simplificado y las del generador de película delgada, y se le añade una nueva suposición:

- En todo momento existe un equilibrio termodinámico de fases. Se admite que la respuesta del sistema es tan rápida que la película siempre está en condiciones de saturación.

La interfase líquido-vapor se satura casi instantáneamente. Si no existiese un proceso difusivo, la absorción de vapor sería despreciable al ser este un proceso superficial. Desde la interfase líquido-vapor se establece un gradiente de concentraciones hacia el interior de la película permitiendo que la absorción sea un proceso continuo al obligar que la interfase esté siempre saturada de disolvente. A este gradiente de concentraciones se le añade un gradiente de temperaturas, que depende de la energía recibida por el

cambio de fase. La cantidad de vapor absorbida depende de la velocidad de difusión en la película, y la temperatura de la película depende de esta absorción. Por tanto ambos procesos, de transferencia de masa y de calor, están ligados como se comentó en la §3.8.

Dado que las propiedades termodinámicas de la película dependen de dos variables (condiciones de saturación), si se consiguen fijar se podrán calcular el resto. La presión viene impuesta por la masa de vapor del recinto. Si se conoce el coeficiente de transferencia de calor de la película, con un balance energético se puede calcular la temperatura, y por tanto la concentración queda fijada a un valor.

Evidentemente para que este cálculo sea posible, se debe saber cuál es el coeficiente de transferencia de calor. Siguiendo con la misma filosofía que el resto de modelos de evaporador de película descendente, un modelo parametrizable permite usar diferentes correlaciones empíricas tanto de la bibliografía como propias.

Las ecuaciones del modelo varían en función de si se está produciendo absorción o desorción. En el primer caso, la absorción, se cumple que $T_w < T_{sl}$ y las ecuaciones del modelo son (balance másico, balance energético, flujo de calor absorbido y flujo másico de absorción):

$$0 = \dot{m}_{in} + \dot{m}_{ev} - \dot{m}_{out}, \quad (5.34)$$

$$0 = -\dot{Q}_w - \dot{m}_{in}(h - h_{in}) + \dot{m}_{ev}L, \quad (5.35)$$

$$\dot{Q}_w = N_{col}N_{row}\alpha A_{s,t}(T_{sl} - T_w), \quad (5.36)$$

$$\dot{m}_{ev} = \frac{(\dot{Q}_w + \dot{m}_{in}(h_{sl} - h_{in}))}{L}. \quad (5.37)$$

En el segundo caso, la desorción, se cumple que $T_w \geq T_{sl}$ y las ecuaciones del modelo son (balance másico, balance energético, flujo de calor cedido y flujo másico de desorción):

$$0 = \dot{m}_{in} - \dot{m}_{ev} - \dot{m}_{out}, \quad (5.38)$$

$$0 = \dot{Q}_w - \dot{m}_{in}(h - h_{in}) - \dot{m}_{ev}L, \quad (5.39)$$

$$\dot{Q}_w = N_{col}N_{row}\alpha A_{s,t}(T_w - T_{sl}), \quad (5.40)$$

$$\dot{m}_{ev} = \frac{(\dot{Q}_w - \dot{m}_{in}(h_{sl} - h_{in}))}{L}. \quad (5.41)$$

Afortunadamente, Modelica impone un convenio de signos para las variables tipo flujo (i.e. flujo de calor, flujo másico): positivo si el flujo entra y negativo si sale. Hasta ahora no se ha seguido dicho convenio en la formulación expresada en el presente documento a pesar de que la implementación necesariamente ha sido con él. Este caso es un buen ejemplo para mostrar sus ventajas. Si se sigue dicho convenio, las ecuaciones antes formuladas en dos bloques en función de una expresión condicional (i.e. Eq. 5.34-5.37

y Eq. 5.38-5.41), ahora se pueden expresar en un único bloque.

$$0 = \dot{m}_{in} + \dot{m}_{ev} + \dot{m}_{out}, \quad (5.42)$$

$$0 = \dot{Q}_w + \dot{m}_{in}(h - h_{in}) + \dot{m}_{ev}L, \quad (5.43)$$

$$\dot{Q}_w = N_{col}N_{row}\alpha A_{s,t}(T_w - T_{sl}), \quad (5.44)$$

$$\dot{m}_{ev} = -\frac{(\dot{Q}_w - \dot{m}_{in}(h_{sl} - h_{in}))}{L}, \quad (5.45)$$

donde el flujo de calor intercambiado con la pared toma un valor positivo si la temperatura de la película es menor que la superficie de los tubos (desorción), y negativo si es mayor (absorción) y el flujo másico de cambio de fase toma un valor positivo si el vapor entra al sistema (absorción) o negativo si sale (desorción).

La encapsulación de este modelo es idéntica la del generador de película descendente (v. Fig. 5.12g).

5.3.1.5. Flash

Cuando una masa de líquido entra en un recinto presurizado, es posible que se produzca una evaporación súbita. Con esta evaporación se iguala la presión de vapor del líquido con la presión del recinto si esta es menor. El resultado es que la temperatura del líquido entrante se enfría hasta su temperatura de saturación a esa presión. Este fenómeno suele producirse en los evaporadores de película descendente en el momento que se forma el rocío si éste líquido proviene de un recinto a mayor presión.

Para modelar este fenómeno se asume:

- La evaporación se produce en el mismo momento en el que entra el líquido al recipiente, por tanto se desprecia que esta pueda darse en etapas previas, e.g. la tubería de entrada.
- No hay transferencia de calor entre el líquido y el vapor. Todo el calor latente de la vaporización se emplea en reducir la temperatura del líquido. El vapor se calienta al aumentar su presión.
- Si el líquido es una disolución, sólo evapora el disolvente. Todo el soluto se queda en con la fase líquida.

El balance másico se calcula igual que en el evaporador de película descendente según la Eq. 5.30. El flujo másico de evaporación viene determinado por la Eq. 3.134 si la presión de vapor es mayor que la del recinto. Si la presión de vapor es menor, entonces el modelo tiene que ser transparente para el flujo de entrada. La función máximo evita tener que poner expresiones condicionales:

$$\dot{m}_{ev} = \frac{\text{máx}(0, \dot{m}_{in}(h_{in} - h_{sl}))}{h_{sv} - h_{sl}}. \quad (5.46)$$

En el caso de que el líquido sea una disolución, la fracción másica de salida del líquido puede calcularse de acuerdo a la Eq. 5.33.

La encapsulación se muestra en la Fig. 5.12h. La comunicación con el resto de modelos se hace a través de tres conectores *FluidPort*. Por el superior entra el líquido, y por tanto, se recibe el flujo másico, la entalpía específica, y en el caso de que sea una disolución también la fracción másica. El lateral se conecta con el volumen de gas; por él, se recibe la presión y se transmite el flujo másico y la entalpía específica. Por el inferior sale el líquido, se usa para transmitir flujo másico, entalpía específica y, en el caso de que el líquido sea una disolución, la fracción másica.

5.3.1.6. Depósito

Casi en cualquier sistema en la industria de refrigeración existe un elemento de depósito para acumular líquido. En la DEAHP hay uno en cada contenedor salvo en el generador de alta temperatura (G2). El modelo del depósito asume:

- No existe transferencia de calor con la pared metálica del depósito. Teóricamente está aislado térmicamente.
- No hay transferencia de calor entre el líquido y el vapor. Si se asume que solo hay vapor del mismo compuesto que el líquido, la diferencia de temperaturas entre líquido y vapor no es muy grande, y el coeficiente de transferencia de calor en las condiciones que se dan en el recinto es pequeño.
- Se asumen propiedades termodinámicas uniformes para toda la masa de líquido. Se desprecia el gradiente hidráulico por el peso de la columna de líquido, la presión del líquido es la misma en cualquier punto.
- Sólo se produce vapor por efecto flash cuando la masa entera de líquido está en condiciones de saturación. La evaporación en régimen subenfriado se asume como transferencia de calor entre entradas y depósito.
- Se desprecia la condensación del vapor en este elemento, esta sólo se considera en los elementos de condensación.

El balance másico del depósito es el mismo que el dado por la Eq. 5.16. El balance energético es:

$$\begin{aligned}
 H &= mh, \\
 \dot{H} &= \dot{m}_{in}h_{in} - \dot{m}_{ev}h_{sv} - \dot{m}_{out}h + \frac{m}{\rho}\dot{p}.
 \end{aligned}
 \tag{5.47}$$

El flujo másico de evaporación se calcula de acuerdo a la expresión condicional ($h < h_{sl} + eps$), donde al igual que en la §5.3.1.3 *eps* determina la tolerancia de la histeresis. Si la expresión es verdadera entonces el flujo es cero, si es falsa el flujo se calcula

de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\dot{m}_{ev} = \frac{1}{h_{sv} - h_{sl}} \left(-\dot{m}_{in}(h_{sl} - h_{in}) + m\dot{p} \left(\frac{1}{\rho} - \frac{\partial h_{sl}}{\partial p} \right) \right). \quad (5.48)$$

En la Fig. 5.12i se muestra el icono del modelo. Tres conectores *FluidPort* permiten hacer la comunicación con el resto de modelos. Siguiendo con el patrón de los otros modelos, el conector superior es el de entrada. Por él se recibe un flujo másico y una entalpía específica. El conector lateral es el de salida del vapor, por él se recibe la presión y se transmite un flujo másico y una entalpía específica. El conector inferior es el que permite la salida de líquido del depósito, por él se recibe un flujo másico y se transmite una entalpía específica. Este conector se debe conectar a un elemento tipo válvula o bomba que determine cuál debe ser el caudal de salida.

Depósito de disolución Si el líquido almacenado en el depósito pertenece a una disolución, entonces se deben tener en cuenta nuevas hipótesis.

- Se asume la misma concentración de soluto en todo el volumen, la mezcla de la entrada en la masa de líquido es instantánea.
- Únicamente evapora el disolvente, todo el soluto se queda en la masa de líquido.

El balance másico y el balance energético vienen expresados por las ecuaciones Eq. 5.16 y 5.47. Con la Eq. 5.22 se puede calcular la variación de la fracción másica con el tiempo. Al igual que en el caso anterior, la expresión condicional ($h < h_{sl} + eps$) debe usarse para asegurar la evaporación flash en el depósito. En el caso de que sea falsa, el flujo másico de evaporación se calcula según:

$$\dot{m}_{ev} = \frac{1}{h_{sv} - h_{sl}} \left(-\dot{m}_{in}(h_{sl} - h_{in}) + m\dot{p} \left(\frac{1}{\rho} - \frac{\partial h_{sl}}{\partial p} \right) - m\dot{w} \frac{\partial h_{sl}}{\partial w} \right), \quad (5.49)$$

La Fig. 5.12j muestra la encapsulación del modelo. Igual que el modelo del depósito, tres conectores *FluidPort* son la interfaz de comunicaciones. Por el conector superior entra el líquido, se recibe por él flujo másico, entalpía específica y fracción másica. El lateral es el escape de vapor, por él se recibe presión y se transmite flujo másico y entalpía específica. El inferior es de salida de la disolución, por él se transmite presión, entalpía específica y fracción másica.

5.3.1.7. Tubería

El fenómeno de la transferencia de calor a un líquido que fluye en el interior de una tubería es un fenómeno ampliamente estudiado por su importancia en la industria. Existen numerosas librerías de Modelica que incluyen modelos de tuberías que han sido probados con buenos resultados como Modelica.Fluid de la MSL (Modelica Association, 2014) o la librería MBMs (Bonilla et al., 2015). Tras una primera composición del

modelo completo usando los modelos de tubería anteriormente mencionados, se pudo comprobar que estos excedían la complejidad requerida y que el esfuerzo computacional era fuertemente penalizado. Por este motivo se decidió desarrollar un nuevo modelo de tubería que redujese ese esfuerzo a costa de perder parte de la precisión.

El nuevo modelo de tubería es un modelo de parámetros concentrados con un solo CV. Se asume que:

- La masa del líquido de la tubería tiene las mismas propiedades termodinámicas. Se considera que existe equilibrio termodinámico dentro de la tubería: misma presión, misma temperatura, misma fracción másica.
- No existe acumulación de masa dentro de la tubería. Las tuberías no son tan largas como para que la dilatación tenga un efecto apreciable.
- No se considera la caída de presión en la tubería. Se desprecia la fricción del líquido con la pared de la tubería. La presión de entrada es la presión de salida.
- La fracción másica se transmite de la entrada a la salida.
- Las propiedades termodinámicas se evalúan con la entalpía específica media. En el balance de energías se utiliza esta entalpía.
- El fluido se desplaza en un régimen turbulento. El único mecanismo de transferencia de calor que se considera es la convección entre la pared del tubo con el líquido.
- En un haz de tubos los resultados de una tubería se extrapolan al resto de tuberías. Todos los tubos del haz son idénticos.

La entalpía específica media se calcula como:

$$h_{av} = \frac{h_{in} + h_{out}}{2}. \quad (5.50)$$

El balance de masas expresa que no se acumula masa dentro de las tuberías.

$$0 = \dot{m}_{in} - \dot{m}_{out}. \quad (5.51)$$

El balance de energía es:

$$\frac{\rho_{av} V}{2} (\dot{h}_{in} + \dot{h}_{out}) = \dot{Q}_w + \dot{m}_{in} h_{in} - \dot{m}_{out} h_{out}. \quad (5.52)$$

La fracción másica se transmite:

$$0 = \dot{w}_{in} - \dot{w}_{out}. \quad (5.53)$$

La transferencia de calor, que se calcula con la ley de enfriamiento de Newton, se puede expresar de la siguiente forma si todos los tubos del haz son iguales:

$$\dot{Q}_w = N_{col}N_{row}\alpha A_w (T_w - T_{av}), \quad (5.54)$$

donde el coeficiente de transferencia se calcula con la correlación de [Dittus y Boelter \(1985\)](#) del número de Nusselt :

$$Nu = 0,023Re^{0,8}Pr^{0,4}. \quad (5.55)$$

El número de Reynolds es determinado considerando el número de tuberías paralelas, N_{par} :

$$Re = \frac{4\dot{m}_{in}}{\pi D_i \mu_{av} N_{par}}, \quad (5.56)$$

Si se despeja de la definición del número de Nusselt (v. Eq. 3.67) y se asume que la longitud característica es el diámetro interno, entonces, el coeficiente de transferencia de calor es determinado por:

$$\alpha = \frac{kNu}{D_i}. \quad (5.57)$$

Una de las dificultades de este modelo está en el manejo de su causalidad computacional. Este, se utiliza principalmente para calcular la entalpía específica de salida del flujo, y para ello, requiere como entrada la entalpía específica de entrada. En la Eq. 5.52 puede verse que la entalpía específica de entrada es una de las variables derivadas. Si esta coincide con una de las entradas globales del modelo (las que se leen por un archivo de datos), el entorno de simulación no es capaz de hacer esta operación, como ya se comentó en la §4.3.2.3. En esa sección también se trataron las posibles soluciones, en este caso, la aplicada aquí es la derivación fuera de línea.

La interfaz del modelo es mostrada en la Fig. 5.12k. Está compuesta por un conector *HeatPort* y dos conectores *FluidPort*. Por el *HeatPort* se recibe la temperatura de la tubería (o tuberías) y se transmite el flujo total de calor. Cada uno de los dos *FluidPort* marcan los extremos de la tubería (o tuberías). El de la izquierda es usado como entrada del fluido, y por él se recibe flujo másico, entalpía específica y fracción másica. La otra se usa como la salida del fluido. Por ella se recibe presión, y se transmite flujo másico, entalpía específica y fracción másica. Cuando la entalpía de entrada del modelo proviene de un fichero de datos, un parámetro booleano posibilita que la derivada de la entalpía específica de entrada pueda ser recibida a través de un conector *RealInput*.

5.3.1.8. Pared

La pared del tubo es el elemento que permite la transferencia de calor entre la cara interior y exterior. Los tubos son metálicos y están diseñados para facilitar la transferencia de calor entre ambos fluidos.

Las hipótesis consideradas para la realización de este modelo son:

- Se desprecia la conducción en el tubo. El espesor del tubo es muy delgado y la conductividad térmica muy alta.
- Se asumen propiedades termodinámicas uniformes. La temperatura del tubo es la misma para cualquier punto del tubo.
- Los resultados de un tubo se extrapolan para todo el haz de tubos.

La temperatura de la pared del tubo o haz de tubos se calcula de acuerdo al siguiente balance energético:

$$\dot{Q}_{outer,w} - \dot{Q}_{inner,w} = m_w c_{p,w} \dot{T}_w, \quad (5.58)$$

donde $\dot{Q}_{outer,w}$ es el calor que proviene de la parte exterior del tubo y $\dot{Q}_{inner,w}$ el de la parte interior. La masa m_w representa la masa total del tubo o haz de tubos.

La Fig. 5.121 representa la encapsulación del modelo. Este tiene dos conectores *HeatPort* por los que se reciben los flujos de calor de ambos lados del haz de tubos y por los que se trasmite la temperatura.

5.3.1.9. Volumen de gas

El vapor generado por los diferentes procesos del sistema rellena el volumen disponible en los recintos. La cantidad de vapor acumulado en el recinto determina la presión, que a su vez es la requerida por todos los procesos.

Las hipótesis asumidas por el modelo son:

- Propiedades termodinámicas uniformes para la masa de vapor. Se asume equilibrio termodinámico del sistema que implica una distribución uniforme del vapor en el recinto y una única temperatura para todo el vapor.
- Se asume la ecuación de los gases ideales como ecuación de estado. El rango de presiones y temperaturas alcanzables en este sistema es bajo y el error producido por la simplificación de los gases ideales es despreciable.
- El vapor solo está compuesto por un elemento, agua. Los sistemas de vacío retiran los gases no condensables antes de la operación y se asume que los elementos evaporadores sólo producen vapor de agua.
- Se desprecia la transferencia de calor entre el vapor y el resto de elementos del recinto. La convección en el vapor tiene un coeficiente de transferencia de calor muy bajo respecto a los de cambios de fase.
- Se asumen condiciones de saturación para el vapor. Al no haber transferencia de calor en el vapor y estar este mismo en condiciones de saturación a la entrada, en ningún punto puede haber vapor sobrecalentado.

- Se asume un volumen constante de vapor. El volumen despejado es mucho mayor que el que ocupa la fase líquida, y por tanto, se desprecia la influencia de las variaciones de esta en el volumen de la fase vapor.

En condiciones de saturación, la temperatura del vapor es una función exclusiva de la presión. Para determinar el estado termodinámico se emplea la ley de los gases ideales (v. Eq. 3.38). Para facilitar el manejo de las ecuaciones, esta ecuación se expresa de la siguiente forma:

$$pV = mKT, \quad (5.59)$$

donde K es la constante másica de los gases ideales³. Ambas ecuaciones, la temperatura de saturación y la ley de los gases ideales, enlazan la temperatura y la presión generando un lazo algebraico. El entorno de simulación lo resuelve eficientemente.

La masa del vapor es determinada por el siguiente balance másico:

$$\dot{m} = \dot{m}_{in} - \dot{m}_{out}, \quad (5.60)$$

donde \dot{m}_{in} y \dot{m}_{out} son la suma de todos los flujos másicos de entrada y salida, respectivamente. Es precisamente esta última ecuación la que fija la masa del gas como una variable de estado.

Hasta ahora, siempre se ha hablado de la presión, y no de la masa del gas, como una de las variables estado del sistema. Esto es porque la masa es una variable extensiva y complica el cálculo del resto de propiedades termodinámicas. La Eq. 5.60 muestra que numéricamente interesa que sea la masa una variable de estado por ser explícitamente la variable a integrar. Sin embargo, la relación entre la masa y la presión dada por la Eq. 5.59 permite obtener una expresión para el cálculo explícito de la derivada de la presión con el tiempo.

Mediante una manipulación matemática de la Eq. 5.59, el entorno de simulación es capaz de obtener la relación masa y presión antes mencionada. Para ello, primero la deriva respecto al tiempo obteniendo:

$$\dot{p}V = \dot{m}KT + mK\dot{T}. \quad (5.61)$$

La temperatura del vapor es una función explícita de la presión, y su derivada puede calcularse como:

$$\dot{T} = \frac{\partial T}{\partial p} \dot{p}. \quad (5.62)$$

Sustituyendo esta expresión en la Eq. 5.61:

$$\dot{p}V = \dot{m}KT + mK \frac{\partial T}{\partial p} \dot{p}. \quad (5.63)$$

Y reordenando:

$$\dot{p} = \frac{KT}{V - mK \frac{\partial T}{\partial p}} \dot{m}. \quad (5.64)$$

³ $K = \frac{R}{M}$, donde R es la constante universal de los gases ideales y M el peso molecular de la sustancia.

Con la Eq. 5.64 queda probado que el cálculo de la derivada es directo.

El encapsulado de este modelo se muestra en la Fig. 5.12m. Los dos conectores *FluidPort* tienen la misma funcionalidad, por ellos se recibe el flujo másico y se transmite la presión y la entalpía específica.

Volumen variable En un evaporador (o generador) de tubos sumergidos, el volumen de la fase líquida es del orden de magnitud del volumen de la fase vapor. Por tanto, la hipótesis del anterior modelo de que el volumen de gas es constante no se puede mantener. Para estos casos, se ha implementado otro modelo en el que esta hipótesis se ha eliminado. En él, el volumen de la fase vapor es variable y se calcula como la resta entre el volumen total del recinto, que es una cantidad constante, menos el volumen dado por su fase líquida.

$$V_v = V_T - V_l, \quad (5.65)$$

donde V_v es el volumen de la fase vapor, V_T el volumen total y V_l el volumen de la fase líquida. Para que el entorno de simulación pueda resolver la Eq. 5.59, la implementación de la Eq. 5.65 en el modelo debe ser diferencial:

$$\dot{V}_v = -\dot{V}_l, \quad (5.66)$$

donde como condición inicial debe imponerse la Eq. 5.65. La derivada temporal \dot{V}_l debe ser una entrada del modelo y debe calcularse en el modelo de la fase líquida como:

$$V_l = \frac{m_l}{\rho_l}. \quad (5.67)$$

La relación entre la masa y la presión ahora es mucho más complicada que en el caso anterior. El entorno de simulación la calcula de la siguiente forma. Primero, deriva la Eq. 5.59 considerando que el volumen del gas es variable:

$$\dot{p}V_v + p\dot{V}_v = \dot{m}_vKT_v + m_vK\dot{T}_v = \dot{m}_vKT_v + m_vK\frac{\partial T_v}{\partial p}\dot{p}. \quad (5.68)$$

Si se sustituye en la Eq. 5.66 la derivada de la Eq. 5.67 se obtiene:

$$\dot{V}_v = -\dot{V}_l = -\frac{\dot{m}_l\rho_l - m_l\dot{\rho}_l}{m_l^2}. \quad (5.69)$$

Al no ser una variable de estado la densidad, esta debe expresarse en función de variables de estado:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_l &= \frac{\partial \rho_l}{\partial T_l}\dot{T}_l + \frac{\partial \rho_l}{\partial w_l}\dot{w}_l = \frac{\partial \rho_l}{\partial T_l} \left(\frac{\partial T_l}{\partial h_l}\dot{h}_l + \frac{\partial T_l}{\partial w_l}\dot{w}_l \right) + \frac{\partial \rho_l}{\partial w_l}\dot{w}_l = \\ &= \frac{\partial \rho_l}{\partial T_l} \frac{\partial T_l}{\partial h_l}\dot{h}_l + \left(\frac{\partial \rho_l}{\partial T_l} \frac{\partial T_l}{\partial w_l} + \frac{\partial \rho_l}{\partial w_l} \right) \dot{w}_l. \end{aligned} \quad (5.70)$$

Sustituyendo esta ecuación en la Eq. 5.69 se obtiene la siguiente expresión:

$$\dot{V}_v = -\dot{V}_l = -\frac{\dot{m}_l \rho_l - m_l \left(\frac{\partial \rho_l}{\partial T_l} \frac{\partial T_l}{\partial h_l} \dot{h}_l + \left(\frac{\partial \rho_l}{\partial T_l} \frac{\partial T_l}{\partial w_l} + \frac{\partial \rho_l}{\partial w_l} \right) \dot{w}_l \right)}{m_l^2}. \quad (5.71)$$

Ahora, ya se puede resolver la derivada de la presión partiendo de la Eq. 5.68:

$$\dot{p} = \frac{\dot{m}_v K T_v + p \left(\frac{\dot{m}_l \rho_l - m_l \left(\frac{\partial \rho_l}{\partial T_l} \frac{\partial T_l}{\partial h_l} \dot{h}_l + \left(\frac{\partial \rho_l}{\partial T_l} \frac{\partial T_l}{\partial w_l} + \frac{\partial \rho_l}{\partial w_l} \right) \dot{w}_l \right)}{m_l^2} \right)}{V_v - m_v K \frac{\partial T_v}{\partial p}}. \quad (5.72)$$

Se puede apreciar que el cálculo ya no es directo como ocurría cuando el volumen era constante. La derivada de la presión depende de las derivadas de las masas del gas y del líquido, de la derivada de la entalpía específica del líquido y de la derivada de su fracción másica. Este cálculo es un lazo algebraico que el entorno de simulación debe resolver. La estructura modular que tiene el modelo no permite a este acceder a las variables de estado del líquido, salvo que estos se conecten por un conector. Por ello, es necesario transmitir la derivada del volumen del líquido al modelo del volumen de gas. Esto se hace mediante un sistema de conectores *RealOutput-RealInput*. El volumen del gas, se calcula entonces a partir de esta derivada según la Eq. 5.66, lo que crea un problema de índice superior que el entorno es capaz de manejar.

La interfaz del modelo del volumen variable de gas (v. Fig. 5.12n) es igual que el del volumen de gas al que se le es añadido un conector *RealInput* por el que se obtiene la derivada del volumen del líquido.

5.3.1.10. Intercambiador de calor

Un intercambiador de calor es un dispositivo cuya función principal es la transferencia de calor de un fluido a otro. En la industria existe una gran variedad de tipos. Respecto al modelado, los intercambiadores han sido uno de los elementos más intensivamente estudiados. Librerías como la Modelica.Fluid poseen modelos de este dispositivo. Sin embargo, el detalle con el que se presentan excede el necesario para esta tesis.

El modelo de intercambiador aquí presentado es un modelo algebraico centrado en un punto de operación. Para su realización se han asumido las siguientes hipótesis:

- No hay cambio de fase en el interior del intercambiador. Se asume que los dos fluidos que intervienen en el intercambiador son líquidos y nunca llegan a condiciones de saturación. Si el fluido es una disolución, la fracción másica de entrada es la misma que la de salida.
- Todo el calor que cede un fluido lo recupera el otro. Se desprecian las pérdidas de calor con las paredes del intercambiador y su capacidad calorífica.

- No hay caída de presión en el intercambiador. Se desprecia la fricción de los líquidos con las paredes del intercambiador.
- Se desprecia la acumulación de masa de los fluidos en el intercambiador. Se asumen incompresibles y se desprecia la dilatación, el flujo másico de entrada es el mismo que el de salida.
- Se asumen propiedades termodinámicas uniformes para cada uno de los fluidos. La temperatura de cada fluido es la temperatura media entre la entrada y la salida.
- El coeficiente de transferencia de calor global es constante. Se asume que el intercambiador trabaja en un rango limitado cerca del punto de operación.

El modelo se usa para calcular la temperatura de salida de ambos fluidos dando por conocida las de entrada. El sistema de ecuaciones dado por las Eq. 3.83 y 3.84 permiten hacer este cálculo. Sin embargo, este cálculo tiene problemas a la hora de manejar flujos másicos nulos. Para evitar esto, se pueden reordenar las ecuaciones como:

$$T_{1,out} = T_{1,in} - \eta_{he,1}(T_{1,in} - T_{2,in}), \quad (5.73)$$

$$T_{2,out} = T_{2,in} + \eta_{he,2}(T_{1,in} - T_{1,out}), \quad (5.74)$$

donde $\eta_{he,1}$ y $\eta_{he,2}$ son dos factores adimensionales que toman los siguientes valores en el caso de que los flujos másicos (\dot{m}_1 y \dot{m}_2) sean distintos de cero:

$$\eta_{he,1} = \frac{1 - e^{\theta_{he}}}{1 - \frac{\dot{m}_1 c_{p,1}}{\dot{m}_2 c_{p,2}} e^{\theta_{he}}}, \quad (5.75)$$

$$\eta_{he,2} = \frac{\dot{m}_1 c_{p,1}}{\dot{m}_2 c_{p,2}}. \quad (5.76)$$

La Eq. 3.82 proporciona el valor del factor θ_{he} . Si los flujos másicos son cero, entonces $\eta_{he,1}$, $\eta_{he,2}$ y θ_{he} toman valor cero.

En la Fig. 5.12ñ se puede ver el icono del modelo. Cuatro conectores *FluidPort* son los utilizados para comunicar al modelo con el exterior. Dos son de entrada y dos de salida. Por los de entradas se recibe presión, flujo másico, entalpía específica y fracción másica. Por los de salida se transmite presión, flujo másico, entalpía específica y fracción másica.

5.3.1.11. Otros modelos

Aunque no forman parte del objeto de estudio de esta tesis, los dispositivos destinados a regular los flujos internos entre los distintos contenedores de la DEAHF son necesarios para el funcionamiento de la misma, y por tanto, deben ser modelados. Estos han sido idealizados ya que se asume que:

- Las propiedades termodinámicas del fluido que entran son las mismas que las que salen. Se desprecian las pérdidas de calor en estos dispositivos y la composición se mantiene.
- No acumulan masa y se desprecia cualquier efecto sobre los flujos másicos. Son dispositivos ideales, la suma de los flujos de entrada es igual a suma de los flujos de salida.

Bomba ideal Tras cada una de las bombas que recirculan los fluidos en la DEAHP hay un caudalímetro que mide su flujo másico. Obviando su funcionamiento físico, se asume que las bombas son controladas por flujo másico de forma ideal. El modelo de la bomba (v. Fig. 5.12o), impulsa el fluido entre sus dos conectores *FluidPort* con un flujo másico impuesto por la señal recibida en el conector *RealInput*.

Válvula lineal ideal El modelo de esta válvula (v. Fig. 5.12p) pertenece a la librería Modelica.Fluid de la MSL y calcula el flujo másico a partir de una aproximación lineal de su caída de presión dada por la Eq. 3.37. Para regular la apertura de la válvula que determina el caudal másico que pasa a través de los dos conectores *FluidPort* que delimitan la válvula, se emplea un conector *RealInput*. Los valores nominales del caudal y de la diferencia de presiones son parámetros del modelo que deben calibrarse.

Válvula ideal de tres vías Esta válvula se emplea para dividir el flujo entre dos líneas de corriente. El modelo de la válvula (v. Fig. 5.12q) tiene tres conectores *FluidPort*, uno de entrada y dos de salida. Con un conector *RealInput* se regula la apertura de la válvula. La división del flujo se hace de acuerdo al siguiente sistema de ecuaciones:

$$\dot{m}_{out,1} = y\dot{m}_{in}, \quad \dot{m}_{out,2} = (1 - y)\dot{m}_{in}. \quad (5.77)$$

Unión El modelo de la unión (v. Fig. 5.12r) también pertenece a la Modelica.Fluid. Consiste en un modelo de unión de dos líneas de corriente, donde, un volumen de control establece balances dinámicos. Este volumen se determina paramétricamente.

División ideal La división ideal (v. Fig. 5.12s) es un modelo que divide el flujo de una línea de corriente en dos. Al igual que en el modelo de la válvula de tres vías, el flujo es dividido con una razón de proporcionalidad que en este caso es un parámetro.

Convertidor disolvente-disolución Este modelo (v. Fig. 5.12t) es necesario para transformar una corriente de disolvente (agua) en una de disolución (bromuro de litio y agua). La fracción másica de la disolución es igual a 0, ya que todo el fluido es disolvente.

Condiciones de contorno Con el objetivo de poder aislar el sistema, deben existir modelos para imponer los límites de las líneas de corriente. Existen dos tipos de modelos de condiciones de contorno: el llamado modelo de fuente (v. Fig. 5.12u), que impone flujo másico, entalpía específica y fracción másica; y el propiamente llamado modelo de condición de contorno (v. Fig. 5.12v), que determina presión, entalpía específica y fracción másica. Ambos modelos pertenecen a la librería Modelica.Fluid.

RealExpresion Este modelo (v. Fig. 5.12w) perteneciente a la MSL, permite el uso de cualquier expresión real como una salida *RealOutput*. En este caso, se usa para conectar las entradas del archivo de datos con las entradas del modelo de forma gráfica.

5.3.2. Nivel 2

Este nivel está compuesto por cada uno de los modelos de los contenedores que forman la DEAHP. En ellos, se encapsulan los principales fenómenos físicos que tienen lugar en su interior. Estos, que ya fueron descritos y modelados en la §5.3.1, se representan gráficamente por los iconos expuestos en la Fig. 5.12. El modelado en este nivel se realiza de una forma gráfica estableciendo las relaciones entre los distintos fenómenos, esto es, las comunicaciones entre los modelos de nivel 1. Los modelos de este nivel también quedan encapsulados mediante un envoltorio similar, como se muestra en la Fig. 5.14, para que puedan formar parte de un nivel superior pudiendo así establecer una jerarquía de modelado.

5.3.2.1. Evaporador (E0)

El modelo del evaporador E0, representado como un modelo compacto en la Fig. 5.14a, encapsula la disposición de los modelos de los fenómenos físicos que tienen lugar en él, como muestra la Fig. 5.15a. Este modelo se compone por los modelos de flash, evaporador de película descendente, pared, condensador de tubos horizontales y depósito. En todos ellos, el fluido de trabajo es agua. El vapor de agua procedente de la última celda de la planta MED circula hasta E0 por el conector *sI_a* impulsado por la diferencia de presiones que se produce al condensarse el vapor en el condensador de tubos horizontales. Una vez condensado, el agua líquida abandona E0 por *wI_b*. El calor latente liberado en la condensación y parte del calor sensible del agua condensada se transfiere a la pared de los tubos, que a su vez es cedido al evaporador de película descendente para se produzca la generación de vapor a baja presión. Una línea de agua líquida entra internamente a E0 por *w2_a* donde es rociada sobre los tubos del evaporador de película descendente. Este agua al entrar en el recinto del evaporador puede sufrir una evaporación flash antes de que el rocío toque los tubos. Una vez formada la película, esta desciende sobre los tubos y la parte de agua que no ha evaporado cae sobre un pequeño depósito. Además del agua que recibe del evaporador, en el depósito también puede entrar agua procedente de C1. Esta línea de agua entra al modelo por *wI_a* a una temperatura superior que la de saturación a la presión reinante en E0, y por tanto

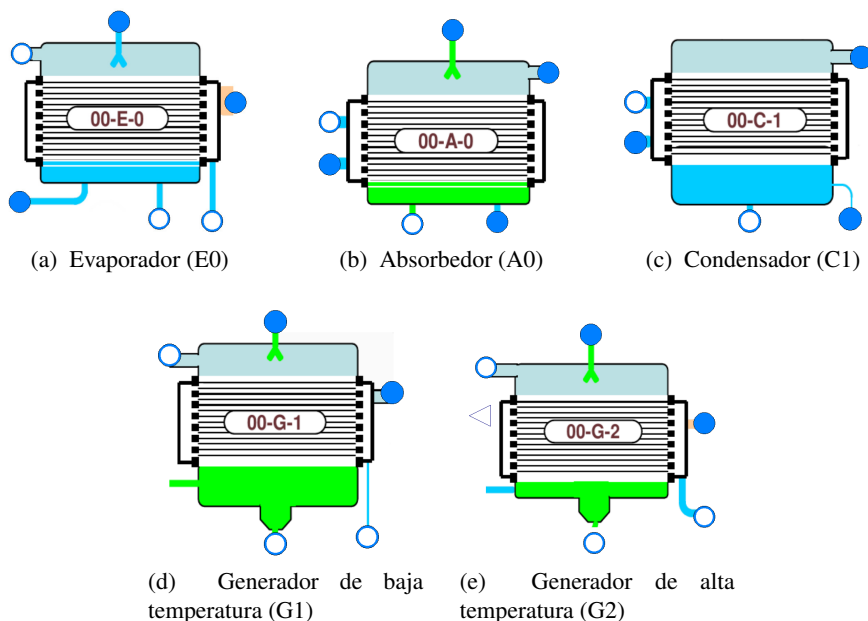


Figura 5.14: Modelos de nivel 2

se puede producir evaporación súbita en el modelo del depósito. El vapor producido por flash tanto en el espacio del haz de tubos como en el depósito junto que el vapor generado en la superficie de los tubos abandona el contenedor por *sl_b*.

5.3.2.2. Absorbedor (A0)

La Fig. 5.14b muestra el icono del modelo del absorbedor A0. Está compuesto por los modelos de nivel 1 de flash, absorbedor, pared, tubería, depósito y convertidor, cuya disposición se puede ver en la Fig. 5.15b. En él se mezclan los dos fluidos de trabajo, agua y bromuro de litio, y las líneas que los transportan se representan gráficamente por los colores azul y verde, respectivamente. El bromuro de litio entra al modelo por *lb1_a*, donde primero pasa por una evaporación flash (si su temperatura al entrar es superior a la de saturación). Luego alcanza los tubos del absorbedor, donde se produce la absorción de parte del vapor del recinto. El calor generado por la absorción se cede a la pared de los tubos. Por el interior de los tubos circula agua entre los conectores *w1_a* y *w1_b*. La transferencia de calor entre la pared de los tubos y el fluido que circula por el interior, se calcula en el modelo de la tubería. Una vez producida la absorción, el bromuro de litio cae al depósito donde es almacenado. En algunas ocasiones, para evitar que el evaporador E0 se inunde de agua, se abre una válvula que permite la extracción de agua del depósito del evaporador E0 al absorbedor A0. Esta línea de agua entra al modelo por *w2_a*. Como esta agua va al depósito del absorbedor, el convertidor permite cambiar agua en bromuro de litio para que no haya incompatibilidades en el conector

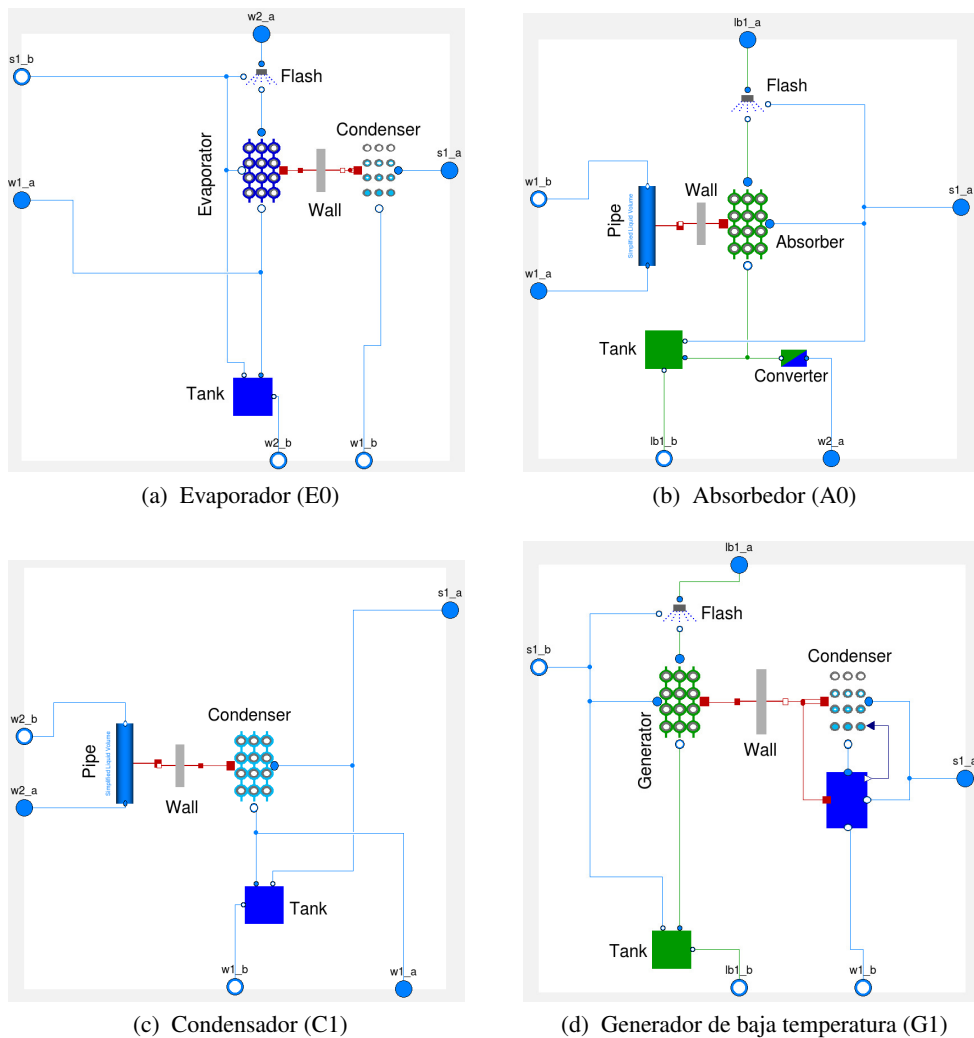
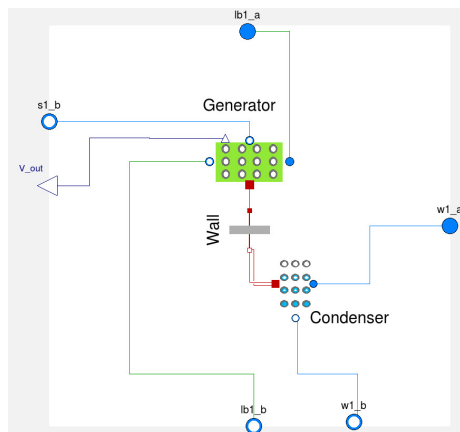


Figura 5.15: Encapsulación de los modelos de nivel 2 (I)

de entrada. El bromuro de litio, más débil en concentración, es extraído del depósito y abandona el modelo por $lb1_b$. Los modelos de flash, absorbedor y depósito se conectan al volumen de gas por el conector $s1_a$.

5.3.2.3. Condensador (C1)

El modelo de C1, mostrado en la Fig. 5.14c, encapsula la disposición de los submodelos representada en la Fig. 5.15c. Está formado por cuatro modelos de nivel 1: condensador de película descendente, pared, tubería y depósito. El vapor entra al modelo a través del conector $s1_a$ y condensa, utilizándose para este proceso el modelo



(a) Generador de alta temperatura (G2)

Figura 5.16: Encapsulación de los modelos de nivel 2 (II)

de condensador de película descendente. El calor latente liberado en la condensación se transfiere a la pared de los tubos que a su vez es transferido al fluido que circula por el interior de estos. Esta transferencia de calor se calcula en el modelo de la tubería. El fluido que circula es agua, que entra por $w2_a$ y sale por $w2_b$. El agua condensada en el condensador de película descendente cae al depósito donde es acumulada. Allí, se junta con el agua de condensación producida en G1, que entra por $w1_a$ y que al estar a mayor temperatura puede producir evaporación flash en el depósito. Este vapor sale del modelo por $s1_a$. El agua de condensación se extrae del depósito por $w1_b$.

5.3.2.4. Generador (G1)

El generador de baja temperatura G1, cuyo icono se muestra en la Fig. 5.14d, está formado por modelos de flash, generador de película descendente, depósito, pared, condensador de tubos horizontales y su ampliación, que se conectan según se ve en la Fig. 5.15d. Los fluidos de trabajo son bromuro de litio y agua. El primero, entra al generador G1 por $lb1_a$. Si su temperatura es superior a la de saturación entonces se produce evaporación flash. Cuando alcanza los tubos del generador forma una película que cae por el resto de tubos. En el generador se produce vapor con el calor que procede de la pared de los tubos. El bromuro de litio, más concentrado, cae a un pequeño depósito situado en la parte inferior por donde finalmente abandona el modelo por $lb1_b$. El vapor de baja temperatura obtenido en el generador, el flash o el depósito sale por $s1_b$. Por otro lado, en el interior de los tubos se condensa vapor a alta temperatura procedente de G2. Éste entra por $s1_a$, condensa en el modelo de condensador y si la válvula a la salida está cerrada se acumula allí y sino abandona el modelo por $w1_b$.

5.3.2.5. Generador (G2)

El otro generador, el de alta temperatura, se muestra en la Fig. 5.14e. Internamente está compuesto por modelos de nivel 1: generador de tubos sumergidos, pared y condensador de tubos horizontales, cuya disposición se puede ver en la Fig. 5.15d. Trabaja con bromuro de litio y agua. El bromuro de litio entra al modelo por *lb1_a* y lo abandona por *lb1_b* tras su paso por el generador. El vapor generado abandona el generador por *sl_b*. El volumen del líquido en el generador y su derivada se transfiere al volumen de gas por *V_out*. En el interior de los tubos, el vapor procedente de la caldera entra por *sl_a*. El calor latente liberado en el condensador se transfiere a la pared de los tubos que a su vez cede el calor al generador. En condensado sale del modelo por *w1_b*.

5.3.3. Nivel 3

El nivel 3 es el nivel de modelado jerárquicamente superior. En él, se compone el modelo final de la DEAHP. Siguiendo una metodología de modelado orientada a objetos, se forma a partir de modelos de niveles inferiores. La abstracción obtenida al encapsular los modelos de niveles inferiores permite un modelado gráfico mediante conexiones de componentes.

En la Fig. 5.17 puede verse la disposición de los modelos y sus conexiones. Para facilitar la comprensión del mismo ha sido implementado con la misma forma que el esquema expuesto en la descripción de la planta (v. Fig. 5.8). El bloque principal del modelo está compuesto por los 5 modelos de nivel 2. Entre ellos se sitúan los tres modelos de volumen de gas, uno de ellos de volumen variable, que modelan la dinámica del vapor dentro de los recintos. Al igual que en la planta real, para manejar los flujos entre contenedores se utilizan los mecanismos de actuación, i.e. válvulas y bombas. Tres intercambiadores de calor transfieren calor sensible entre los flujos internos. El circuito externo de la bomba se compone con modelos que establecen las condiciones de contorno de los mismos, i.e. fuentes y sumideros. Las variables usadas como entradas se introducen en componentes *RealExpresion*.

Respecto al diagrama de la Fig. 5.8 hay conexiones que han sido obviadas. Las válvulas *TV12* y *LV02* abren vías para el mantenimiento de la instalación y no se emplean habitualmente en operación. Otro caso diferente son las válvulas *V61* y *TV18*. La primera, se mantiene abierta durante la operación. El modelo de dicha válvula permite hacer el cálculo de la cantidad de flujo que circula entre los dos generadores. La segunda válvula, se emplea para evitar que el depósito del evaporador se inunde. Aunque habitualmente no se abre, sí que sucede en algunas ocasiones y para garantizar modelar estas situaciones se ha tenido en cuenta.

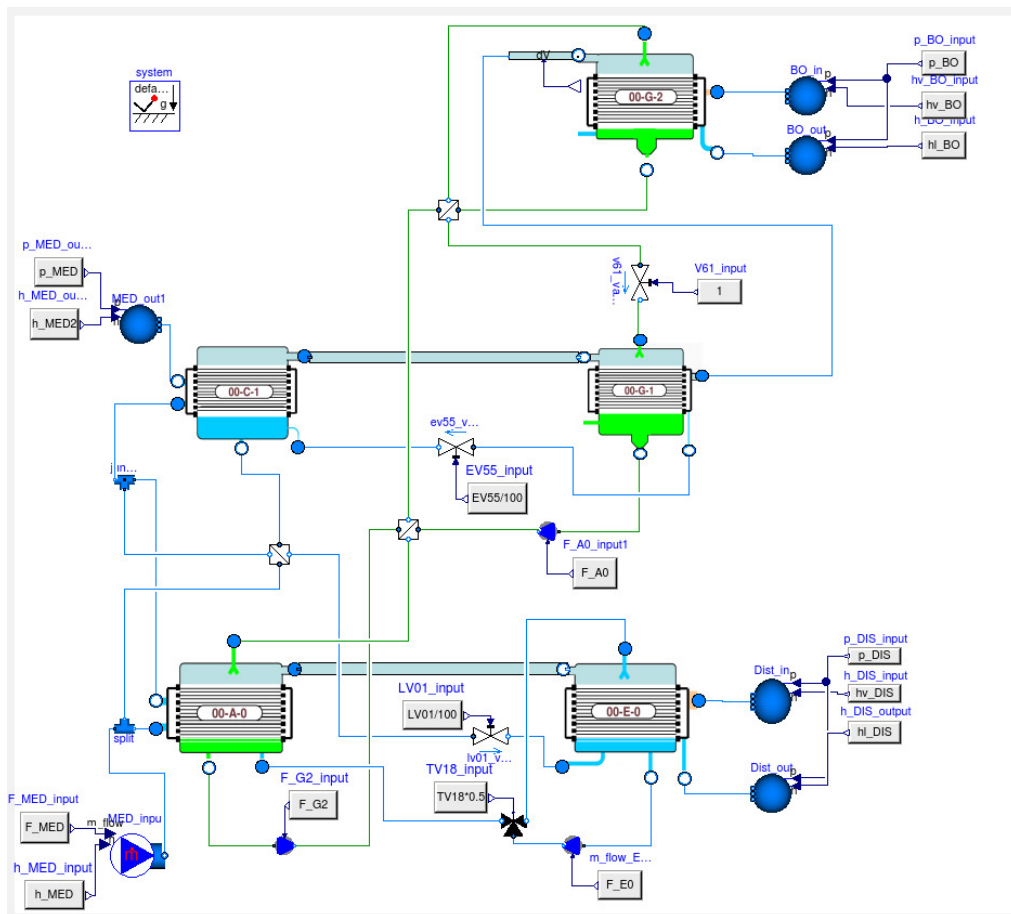


Figura 5.17: Composición final del modelo de la DEAHF

5.4. Simulación dinámica

Para la realización de los trabajos de simulación se hizo uso de la herramienta Dymola 2015 (Dassault Systemes, 2014). El integrador numérico fue DASSL cuya tolerancia (relativa y absoluta) fue 10^{-5} . La máquina usada para las simulaciones fue un ordenador portátil común con un procesador Intel i5 hyper-threading dual-core con 8 Gbytes de RAM.

La serie de experimentos para la calibración y la validación fue tomada de la campaña experimental del proyecto POWER. Para ello, se procedió a la instrumentación interna de la bomba con la instalación de cuatro caudalímetros, tres de ellos para la disolución de bromuro de litio y otro más para el agua. Estos trabajos están descritos en el apéndice B. Sin embargo, problemas con los datos experimentales, que también se comentan en dicho apéndice, afectaron a la calibración y la validación del modelo.

La nomenclatura para las medidas experimentales queda definida por los nombres

de la Fig. 5.8. Las medidas usadas como entradas al modelo completo de la DEAHP son:

- Flujo másico de entrada del agua de refrigeración (F_{cw}).
- Temperatura de entrada del agua de refrigeración (T_{cwi}).
- Presión del vapor de la caldera de gas (P_{gb}).
- Presión del vapor de la última celda de la MED (P_{med}).
- Flujo másico de disolución entre A0 y G2 impulsado por $P-01$ ($FG2i$).
- Flujo másico de disolución entre G1 y A0 impulsado por $P-02$ ($FA0i$).
- Flujo másico de recirculación de agua en E0 impulsado por $P-03$ ($FE0i$).
- Apertura de la válvula $EV55$ (Y_{ev55}).
- Apertura de la válvula $LV01$ (Y_{lv01}).
- Apertura de la válvula $TV18$ (Y_{tv18}).

De las cuales, se requiere la derivada de temperatura de entrada del agua de refrigeración. La técnica del cálculo fuera de línea explicada en la §4.3.2.3 fue la opción escogida.

Aunque todas y cada una de las variables calculadas en el modelo pueden ser salidas, lo cierto es que las más relevantes son aquellas que definen las interacciones entre la bomba y el exterior. En este caso las principales salidas son:

- Temperatura de salida del agua de refrigeración (T_{cwo}).
- Flujo másico de condensación a la salida de G2 (F_{gb}).
- Flujo másico de condensación a la salida de E0 (F_{med}).
- Flujos de calor consumidos a alta y baja temperatura (Q_{gb} y Q_{med}), entregado (Q_{cw}) y el COP (COP)⁴.

El resto de variables, no menos importantes, son consideradas variables observables de etapas intermedias. Entre ellas destacan:

- Temperatura del agua de refrigeración a la salida de A0 (T_{cw1}).
- Los tres niveles de presión (P_2 , P_1 y P_0).

⁴Estas variables son medidas indirectas, función de los flujos másicos y temperaturas antes y después de su paso por la DEAHP.

- Las temperaturas de entrada de la disolución en los contenedores (TG2i, TG1i y TA0i).
- Las fracciones másicas de entrada de la disolución en contenedores (WG2i, WG1i y WA0i)⁵.
- Los niveles de cada uno de los contenedores (LTG2, LTC2, LTG1, LTC1, LTE0 y LTA0)⁶.

Los datos experimentales tuvieron que ser filtrados para poder eliminar el ruido de las señales. Para ello, se empleó un filtro pasa bajo con una frecuencia de corte de $4 \cdot 10^{-2}$ Hz. Para la mayoría de las variables este filtro fue suficiente, sin embargo, en otras esta frecuencia de corte tuvo que ampliarse hasta 10^{-2} Hz.

El modelo es un sistema DAEs de índice superior compuesto por 1464 incógnitas y 1464 ecuaciones, de las cuales, 38 variables aparecen en su forma diferencial. Tras la transformación y simplificación realizada por Dymola, el modelo se reduce a 615 variables dependientes del tiempo y 154 parámetros. Este modelo tiene 27 variables de estado:

- La masa de todos los depósitos, incluido el del condensador integrado en G1 (6).
- La entalpía específica de dichos depósitos (6).
- La fracción másica de soluto en los depósitos de A0, G1 y G2 (3).
- La temperatura de la pared en cada uno de los haces tubulares (5).
- La masa del volumen de vapor en los 3 recintos estancos (3).
- El volumen del vapor en G2 (1).
- La entalpía específica de salida de las tuberías en A0 y C1 (2).
- La entalpía específica en la unión de corrientes de agua de refrigeración a la entrada de C1 (1).

5.4.1. Calibración

La calibración de este tipo de modelos donde el rango de estabilidad del sistema es tan pequeño, es un proceso muy importante porque ayuda a encontrar los estados de estabilidad pero a la vez complicado porque estos son pocos y la búsqueda de parámetros adecuados se hace tediosa. Al hacer frente a una calibración de modelos dinámicos

⁵Aunque la medida directa es la densidad (DG2i, DG1i y DA0i), la fracción másica función de la densidad y la temperatura es más relevante para el modelo.

⁶A pesar de no disponer de medidor de nivel para A0 (LTA0) o para el condensador en el interior de G1 (LTC2), estas variables, sí son accesibles mediante simulación y proporcionan una información relevante para el control de los niveles.

con este grado de complejidad, una buena idea es aprovecharse de su modularidad y hacer una calibración parcial antes de afrontar la calibración del modelo completo. La gran instrumentalización de la DEAHP permite que las variables medidas de etapas intermedias sean variables de referencia.

En este caso, se escogieron los modelos de nivel 2 y los intercambiadores de calor sensible para formar modelos de calibración parcial. El procedimiento de configuración para la calibración ha sido el mismo en todos los casos. Primero, se identificaron las entradas del modelo con las variables medidas y se impusieron estas como condiciones de contorno del modelo. Luego, se identificaron las salidas con las variables medidas y se impuso como función objetivo el error absoluto entre las medidas y las simulaciones en cada una de estas salidas. La calibración parcial se realizó usando la versión gratuita de la Modelica Optimization library (Pfeiffer, 2012) que permite la aplicación del método de optimización heurístico multiobjetivo Downhill Simplex⁷ sobre modelos directamente en Dymola.

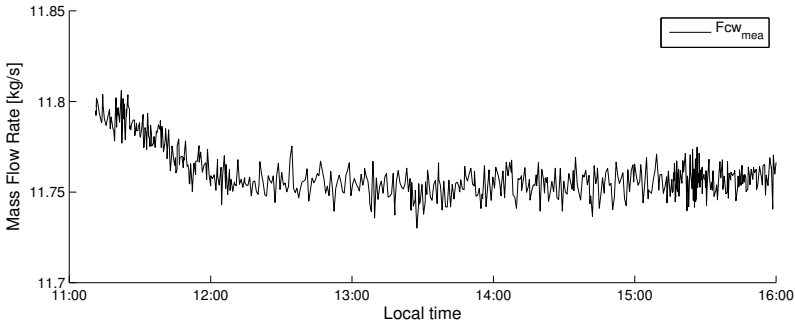
Una vez calibrados, los cinco modelos de nivel 2 fueron primero ensamblados por parejas según niveles de presión, para finalmente componer el modelo completo. En este proceso fue necesario reajustar algunos parámetros para asegurar un pequeño rango de estabilidad global del modelo completo.

La calibración se llevó a cabo tomando como referencia los datos recopilados en el experimento del día 26 de mayo de 2014. Como ya se ha comentado, algunos problemas con los datos experimentales han afectado a la calibración del modelo. Este es el caso de los flujos másicos internos, ya que la dinámica interna de la bomba depende en gran medida de ellos. Estos flujos son entradas al modelo, y por tanto, necesarios para su simulación. Como solución a este problema, se generaron virtualmente los flujos a partir de valores esperados coherentes con el resto de medidas. Evidentemente, esto afecta a la respuesta del modelo trasladando la incertidumbre que se tiene de estas entradas virtuales a las salidas.

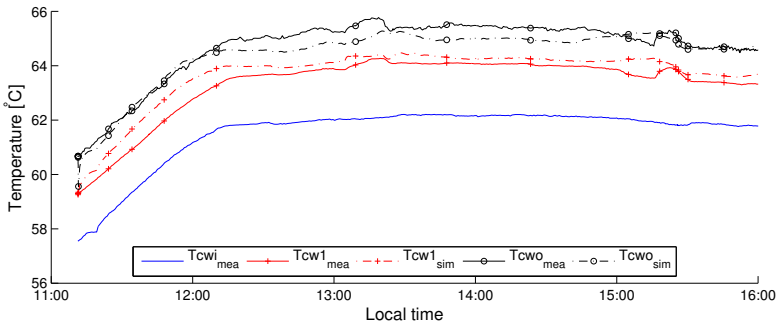
Otra variable de entrada que tuvo que modificarse fue la apertura de la válvula *LV01*. Esta es controlada por el autómatas de la DEAHP que realiza una apertura todo o nada dependiendo del nivel en C1. Como consecuencia, el flujo másico entre C1 y E0 es intermitente. Esta situación aunque admitida por el modelo ralentiza seriamente las simulaciones. Es por ello, por lo que una de las medidas para acelerar las simulaciones fue filtrar esta señal con una frecuencia de corte de 10^{-3} Hz. Con ello se consiguió que el flujo entre C1 y E0 fuese continuo y suave, pero que la masa neta desplazada fuese la misma. Esta modificación, en principio no debería afectar a la dinámica del modelo.

Las Fig. 5.18, 5.19 y 5.20 muestran las entradas y algunas salidas de la simulación del modelo de la DEAHP una vez calibrado. En la Fig. 5.18b, se muestran las temperaturas simuladas del agua de refrigeración. Esta buena concordancia entre datos experimentales y simulaciones se ve reflejada en el hecho de que las simulaciones se

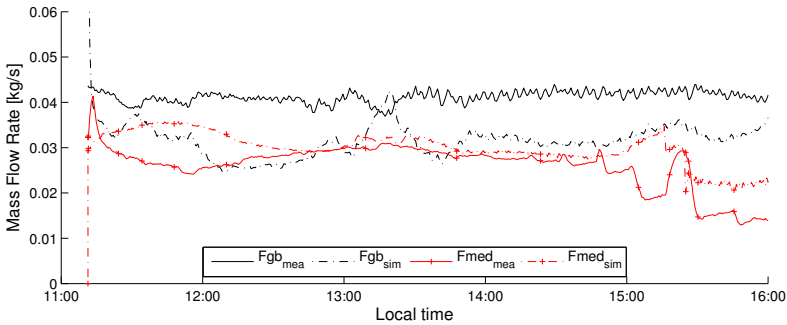
⁷También conocido como método Nelder-Mead (Conn et al., 2009). Es un método libre de derivadas muy útil cuando la función no es suave o cuando es difícil obtener la derivada numérica de la función con la precisión necesaria.



(a) Flujo másico de entrada del agua de refrigeración



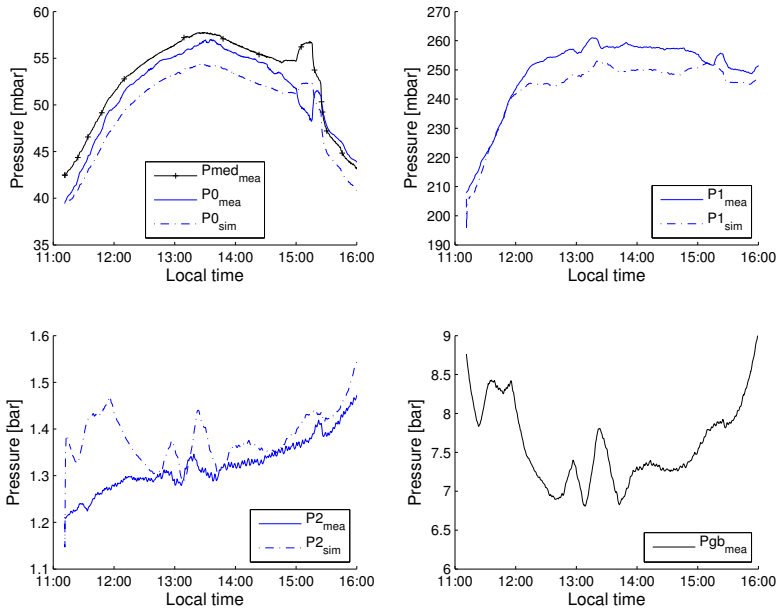
(b) Temperatura entrada, intermedia y de salida del agua de refrigeración



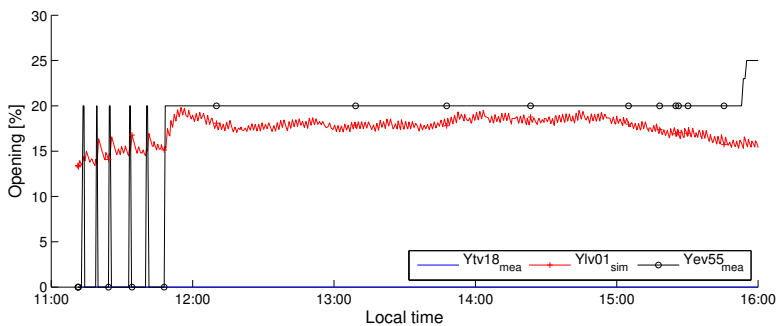
(c) Caudales de condensación

Figura 5.18: Entradas y salidas del modelo, calibración (I)

encuentran dentro del margen de incertidumbre de las medidas que es $\pm 0.85 \text{ }^\circ\text{C}$. Existe una pequeña diferencia en el amortiguamiento de T_{cw1} visible en la rampa ascendente de temperaturas al comienzo de la simulación. Esta diferencia se explica por la capacidad térmica del recubrimiento del termopar que toma esa medida. En la Fig. 5.18c se representa otra de las principales salidas del modelo, los flujos másicos de condensación a la salida de G2 y E0. En este caso, la discrepancia entre medidas y simulación



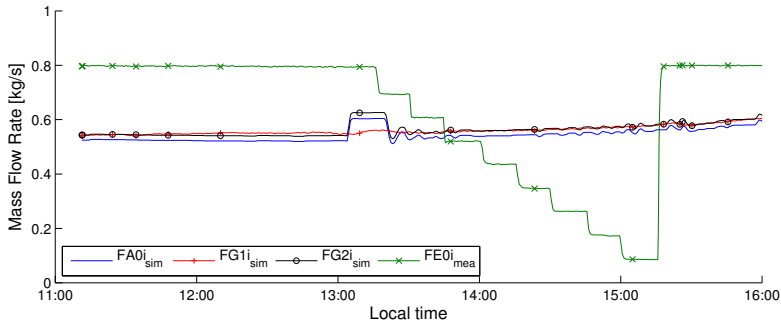
(a) Presiones externas e internas



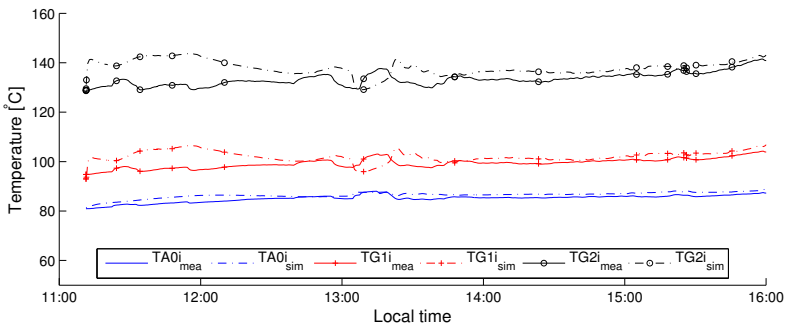
(b) Apertura de las válvulas

Figura 5.19: Entradas y salidas del modelo, calibración (II)

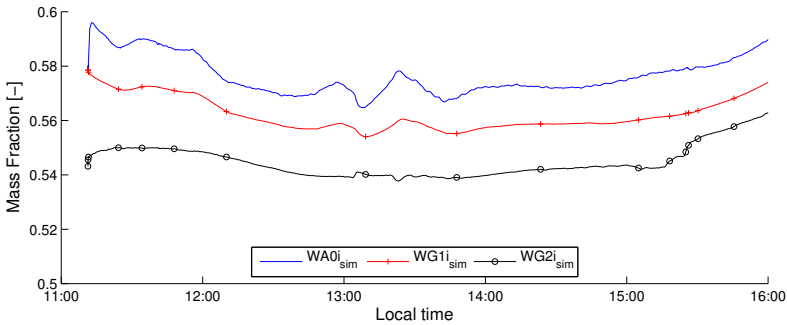
es mayor. Parte del error entre ambas puede atribuirse a efectos que no han sido capturados por el modelo. La distancia entre el sitio donde se genera el vapor (última celda de la planta MED) y donde se condensa (interior de los tubos de E0) es bastante grande y aunque las tuberías que encauzan el vapor son de sección grande, es posible que la caída de presión afecte a la correcta circulación del vapor. Por otro lado, la expulsión del condensado en el caso de E0 es un problema dada la baja presión existente en la tubería de salida cuya sección, además es grande. Para facilitar esta circulación se ha instalado una bomba que impulsa el condensado, la cual está excluida del modelo. En



(a) Flujo másico de entrada de la disolución



(b) Temperatura de entrada de la disolución



(c) Fracción másica de entrada de la disolución

Figura 5.20: Entradas y salidas del modelo, calibración (III)

la salida de G2 el problema es diferente. Como el condensado se vuelve a meter en la caldera es necesario que este entre a presión atmosférica. Por ello se instaló una trampa de vapor a la salida del condensador de G2 que reduce la temperatura de salida hasta la de saturación a presión atmosférica y es posible que afecte al caudal.

En la Fig. 5.19a se representan todas las presiones relacionadas con la bomba. En la esquina superior derecha se hallan las presiones interior y exterior de E0. Un efecto

interesante que se produce y que no ha sido capturado adecuadamente es la reducción de la generación de vapor en E0 por la aparición de huecos secos en la película del haz de tubos. Estos aparecen cuando se reduce el flujo de agua de rocío en el evaporador (v. FE0i en Fig. 5.20a) por debajo de su punto de *dryout*, hecho que sucede aproximadamente sobre las 15:00. En ese punto, la presión P0 se ve drásticamente reducida porque la generación de vapor es menor que la absorción a esa presión. Al haber menor evaporación, la condensación dentro del tubo se reduce y como la planta MED continúa produciendo vapor su presión aumenta, como refleja Pmed. En la simulación esto no ocurre, sino que se mantiene la transferencia de calor entre ambas caras del haz, por ello por lo que se observa un aumento la presión simulada. La simulación de la presión intermedia P1 representada en la figura de la esquina superior derecha parece que se adecúa con lo medido dentro del margen de error del sensor de presión (± 8 mbar). Se ha observado que esta presión depende en gran medida de la dinámica de la válvula EV55. La dinámica de la presión P2 (v. esquina inferior izquierda) no se captura correctamente, ya que como puede observarse la simulada se ve afectada por la variabilidad de la presión de la caldera (v. Pgb en la esquina inferior derecha). Lo más probable es que la capacidad térmica de la carcasa metálica, que no está modelada, afecte a esta presión atenuando las perturbaciones de la presión de entrada.

El error producido en las presiones se transmite a las temperaturas de los fluidos que circulan en el interior de la bomba. En la Fig. 5.20b, se ve que la temperatura de la disolución a la entrada de G2 se sobrecalienta en el intercambiador. Esto se debe a que como la diferencia de presiones entre G2 y G1 es mayor que la real, el flujo másico que circula libremente entre ambos contenedores también es mayor al real y por tanto mayor cantidad de energía intercambiada en HX1. Cuando las presiones simuladas se acercan más a las medidas, también lo hacen las temperaturas de los flujos. En la Fig. 5.20c se representan las concentraciones de la disolución a la entrada de los contenedores. Se puede ver que estas concentraciones son coherentes con lo esperado de ellas. Al no tener una medida de los valores iniciales de concentración, éstas se estimaron. Como consecuencia se produce un reajuste de las mismas en los instantes iniciales de la simulación.

La lista de parámetros del modelo se muestra dividida entre parámetros asignados según datos del fabricante e hipótesis de modelado (v. Tab. 5.3) o parámetros calibrados según datos experimentales (v. Tab. 5.4). A su vez, cada uno se divide en tres tablas: estructura principal, intercambiadores de calor y válvulas. De la tabla de los parámetros asignados de la estructura principal se puede destacar en primer lugar, que el número de tubos de algunos contenedores no coincide con los descritos en la Tab. 5.2. Esto se debe a que la forma irregular de algunos de ellos no permite tener estructuras cuadradas que son las que han sido modeladas. Sin embargo, el error cometido por la aproximación de estos haces a estructuras cuadradas puede ser compensado por otros parámetros calibrables. El diámetro interno D_i , el diámetro externo D_o y la longitud l de los tubos son datos extraídos de la documentación, mientras que el calor específico $c_{p,w}$ y la densidad ρ_w de los mismos son valores de la ficha técnica del fabricante. El porcentaje de

Tabla 5.3: Parámetros del modelo (Asignados)

Parámetros de la estructura principal

Parámetro	E0	A0	C1	G1	G2
N_{col}	24	38	22	31	12
N_{row}	8	9	9	10	10
D_i [mm]	12.6	12.6	12.6	12.6	12.6
D_o [mm]	14	14	14	14	14
l [m]	2.9	3	2.9	3	3
$c_{p,w}$ [$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$]	377	377	377	377	377
ρ_w [$kg \cdot m^{-3}$]	8900	8900	8900	8900	8900
y [%]	-	80	-	-	-

Parámetros de los intercambiadores de calor

Parámetro	HX1	HX2	HX3
A_s [m^2]	5	5	5

Parámetros de la válvulas

Parámetro	EV55	LV01	V61
Δp_{nom} [bar]	1	0.2	1

agua de refrigeración que entra al haz tubular de A0 (y) se asigna a un valor constante estimado. Respecto a los intercambiadores, todos poseen el mismo área de intercambio según la documentación. La diferencias de presión nominal en las válvulas fue asignado considerando las presiones habituales del interior de la bomba.

En cuanto a los parámetros calibrados, se puede observar que el parámetro de cruce *cross* (número de veces que cruza el fluido de un lado a otro del contenedor en el interior del haz tubular) coincide con la predicción realizada en la §5.2.1. El volumen total de los depósitos V_{tank} es un parámetro que se calibra dada la falta de documentación del mismo. Al no tener datos experimentales de los flujos, este parámetro es muy complicado de calibrar ya que para ello hay que basarse en los datos relativos de los niveles. Para el depósito de G2, la calibración es más exacta ya que los datos aproximados de las dimensiones del contenedor ayudan a limitar los rangos posibles. Los coeficientes de transferencia de calor asociados a la evaporación idealmente podrían calcularse en base a correlaciones experimentales ya comprobadas en la literatura, como es el caso de la de G2. Pero el limitado rango de aplicabilidad de las existentes obliga en muchos casos a generar correlaciones propias, como se ha hecho en E0. La falta de datos experimentales en A0 y G1 obligó a imponer valores constantes de estos coeficientes buscando la robustez del modelo. El intercambio de calor entre el condensado acumulado en el interior de G1 y la superficie de los tubos (dado por el coeficiente α_{tank}) también es un parámetro difícil de calibrar dada la falta de sensibilidad respecto a una variación de las entradas. Un caso diferente son los coeficientes de transferencia de calor de los intercambiadores de calor, su sensibilidad permitió una calibración muy exacta. Respecto a

Tabla 5.4: Parámetros del modelo (Calibrados)

Parámetros de la estructura principal					
Parámetro	E0	A0	C1	G1	G2
$cross$	2	4	2	2	2
V_{tank} [m ³]	0.15	0.35	0.15	0.35	0.3043
α_{ev} [W · m ⁻² · K ⁻¹]	* ^a	1200	-	4000	* ^b
α_{tank} [W · m ⁻² · K ⁻¹]	-	-	-	1000	-

Parámetros de los intercambiadores de calor			
Parámetro	HX1	HX2	HX3
α_{he} [W · m ⁻² · K ⁻¹]	694.76	213.40	133.72

Parámetros de la válvulas			
Parámetro	EV55	LV01	V61
\dot{m}_{nom} [kg · s ⁻¹]	0.10	0.19	0.48

^aEste coeficiente de transferencia de calor es variable y se calcula de acuerdo al número de Nusselt dado por la Eq. 3.131 cuyos coeficientes han sido calibrados adquiriendo los siguientes valores: $c_1=0.9$, $c_2=0.095$ y $c_3=-1.2$.

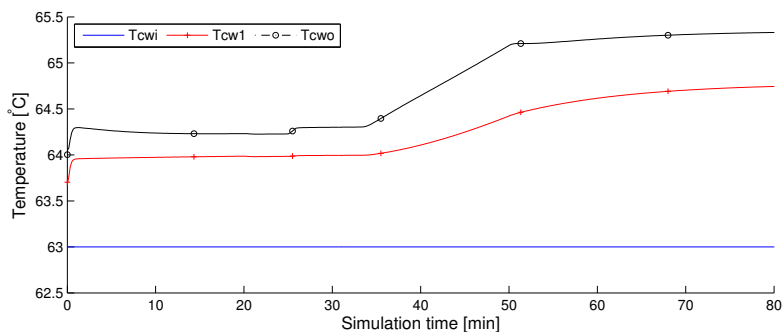
^bEste coeficiente de transferencia de calor se calcula de acuerdo a la correlación dada por la Eq. 3.128 cuyas constantes tomadas de la Tab. 3.1 adquieren los siguientes valores: $C_R=0.0121$ y $n_R=1$.

los parámetros de las válvulas, se observó que tienen una influencia muy grande en la estabilidad de la bomba. Por ello, fueron los últimos en calibrarse ya que una pequeña modificación de alguno de los anteriores obligaba a un posterior reajuste de estos.

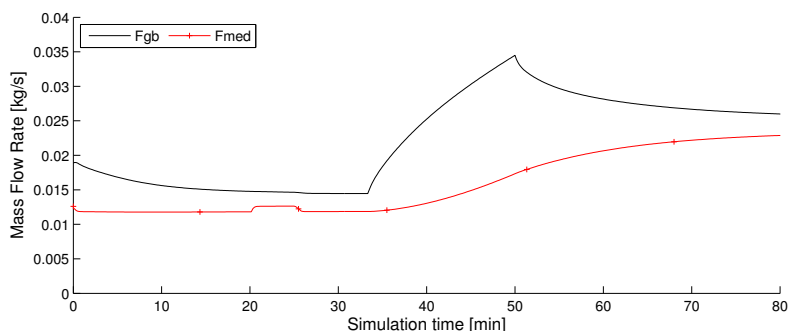
5.4.2. Validación

Para verificar la integridad del modelo y la validez física de los resultados, se diseñó un experimento de simulación en el que se presentan algunos problemas que son retos para el modelado. Este consistió en mantener constantes las siguientes entradas del modelo: $F_{cw} = 11.7$ L/s, $T_{cwi} = 63$ °C, $P_{med} = 50$ mbar, $Y_{lv01} = 12\%$, $Y_{tv10} = 0\%$. La presión de vapor de la caldera de gas varía en el tiempo desde 6 a 8 bar como muestra la Fig. 5.22a. Para mantener la estabilidad de la DEAHP los flujos másicos de disolución impulsados por las bombas se igualaron al flujo másico originado por la diferencia de presiones entre G2 y G1. La válvula *EV55* se regula para mantener los niveles como puede verse en la Fig. 5.22b.

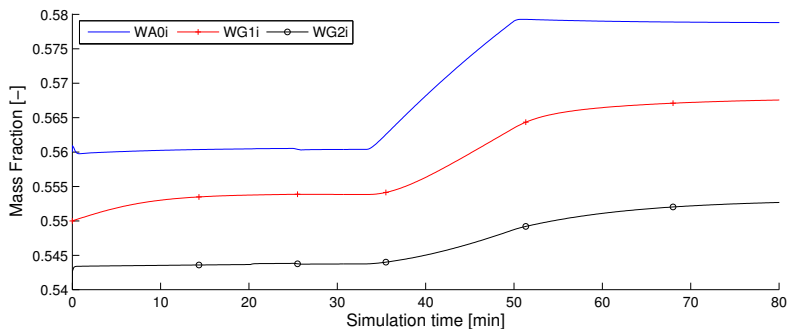
Inicializar un modelo como este es una tarea compleja. El entrelazamiento de los estados a través de sus ecuaciones diferenciales impide en la práctica inicializarlos desde condiciones estacionarias directamente. Si a eso se le añade que los ciclos en el interior de la bomba son cerrados y las propiedades termodinámicas son tan poco flexibles, el rango de valores posibles para inicializar el sistema es muy pequeño. En este caso, el ajuste de la inicialización se realizó desde un valor cualquiera que inicializase, i.e. desde



(a) Temperatura entrada, intermedia y de salida del agua de refrigeración



(b) Caudales de condensación

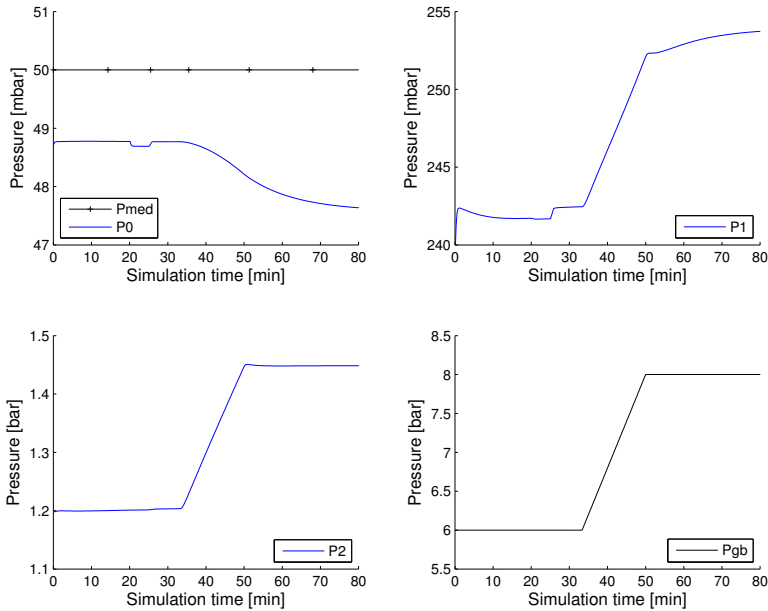


(c) Flujo másico de entrada

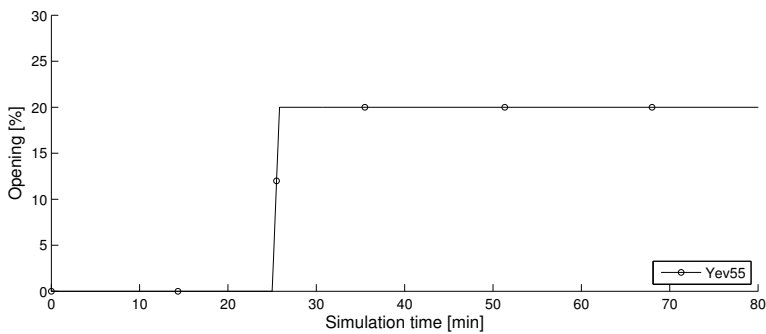
Figura 5.21: Entradas y salidas del modelo, validación (I)

las condiciones iniciales dadas en el ejemplo de la calibración, y se fue ajustando poco a poco hasta conseguir las condiciones más próximas a las deseadas.

El tiempo de computación para realizar la simulación de 5000 s fue de 6.37 s. La simulación presentó 4 eventos de estado. Para la integración numérica del modelo se requirió del máximo orden de integración usado por DASSL (5) y una tolerancia de 10^{-5} .



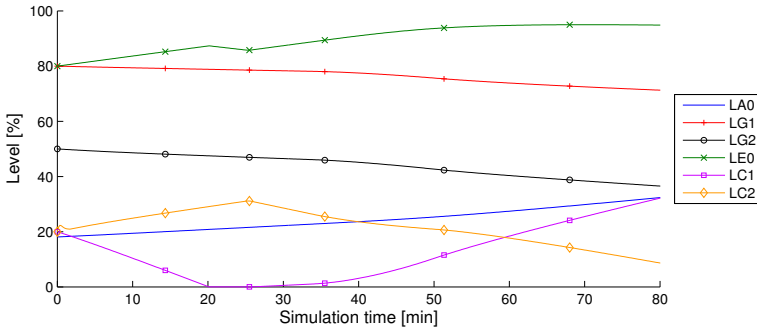
(a) Presiones externas e internas



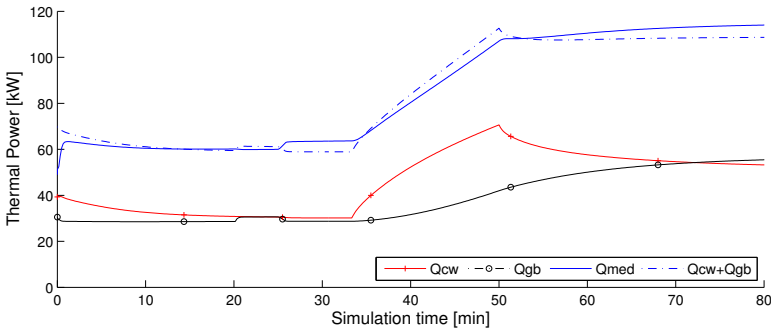
(b) Apertura de las válvulas

Figura 5.22: Entradas y salidas del modelo, validación (II)

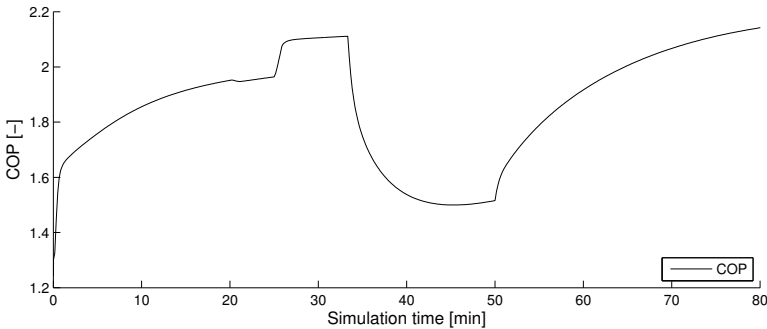
La corriente de agua de refrigeración entra al modelo con un flujo másico y a una temperatura constantes, pero como se puede observar en la Fig. 5.21a la temperatura de salida evoluciona desde unos 64.3 °C hasta unos 65.3 °C. La mayor parte de esta subida de temperatura es asumida por el absorbedor, cuya diferencia entre entrada y salida evoluciona desde aproximadamente 1 °C, hasta 1.7 °C. Fijándose en el flujo másico de condensado (v. Fig. 5.21b), el de baja temperatura (F_{med}) prácticamente se duplica mientras que el de alta temperatura (F_{gb}) no incrementa en la misma proporción una vez alcanzado el estacionario. La evolución de las concentraciones puede verse en la



(a) Evolución de los niveles internos



(b) Flujos externos de calor



(c) Evolución del rendimiento

Figura 5.23: Entradas y salidas del modelo, validación (III)

Fig. 5.21c. La variación de la presión de la caldera provoca que la concentración entre la entrada y la salida del absorbedor cambie de 54.4% y 56% al 55.2% y 57.9%.

Respecto a las presiones, la evolución de todas ellas se visualiza en la Fig. 5.22a, donde puede observarse que mientras que P1 y P2 aumenta debido a la mayor generación, P0 disminuye debido a la mayor absorción. La Fig. 5.23a muestra la evolución de los niveles en el interior de la DEAHp. La válvula LV01 abierta en una posición fija

del 12% provoca que, como *EV55* está cerrada, el nivel en C1 disminuya hasta hacerse cero. La válvula *LV01* se modela de tal forma que permite sólo el paso de líquido. Esto añade robustez al modelo porque en situaciones como esta nunca existe una conexión directa de vapor entre ambos recipientes, algo problemático, y además el nivel no se reduce por debajo de cero. Cuando se corta el flujo de condensado entre C1 y E0, se corta también la producción de vapor generado por flash en E0. Esta situación se visualiza en P0 (v. Fig. 5.22a). Cuando se abre *EV55*, vuelve a aumentar el nivel y empieza a circular caudal hacia E0. La apertura de la válvula también provoca que una parte del condensado procedente del interior de los tubos de G1 se evapore en forma de flash. Este efecto se puede ver en la figura de P1 (v. Fig. 5.22a).

La Fig. 5.23b permite entender mejor la dinámica de la bomba de calor desde un punto de vista de las energías. En primer lugar, puede verse que las inercias térmicas de las grandes masas de fluidos en el interior de la bomba hacen que las curvas de flujos de calor consumido y cedido discrepen ligeramente. Si se observa la evolución de los flujos de calor, se puede apreciar que la interacción de la bomba frente a una modificación energética del sistema es mucho más rápida con la fuente de calor de alta temperatura que con la de baja. La diferencia de tiempos de respuesta hace que el sistema absorba primero las perturbaciones externas con la fuente de alta temperatura, para luego, con el paso del tiempo volver a alcanzar el equilibrio con la de baja temperatura. Este mismo concepto puede verse en la Fig. 5.23c donde se representa el COP instantáneo de la máquina. El rendimiento de una bomba de calor de absorción es independiente de la temperatura de sus fuentes de calor. Esto se debe, como se comentó en la §5.1, a la irreversibilidad de los procesos que tienen lugar en su interior. Aunque es difícil extraer esta conclusión de la gráfica, ya que los tiempos de simulación en igualdad de condiciones son cortos, si proyectamos la tendencia estacionaria cuando la bomba alcanza el equilibrio se puede observar que el valor del COP tiende a valores entre 2 y 2.2 en ambos casos. Con ello se corrobora, uno de los motivos para usar DEAHp en procesos MED: el rendimiento nominal a carga parcial de las bombas de calor de absorción apenas varía. Otro detalle interesante que se puede extraer de la gráfica es que una correcta regulación interna de sus flujos permite una mejora del rendimiento, como cuando se abre la válvula *EV55*. Esto se debe a que los procesos irreversibles responsables del rendimiento se ven influidos por este tipo de acciones. Esta misma conclusión fue demostrada por Palenzuela et al. (2014), donde se pudo mejorar el rendimiento de una DEAHp únicamente regulando de una forma más eficiente los flujos internos.

5.5. Resumen

El trabajo para la realización del modelado y simulación de una bomba de calor de doble efecto ha sido presentado en este capítulo. En primer lugar se introduce el concepto de bomba de calor desde un punto de vista general, para luego concretar el tipo de bomba de calor concreto que se modela. Se realiza una breve revisión de los últimos avances en modelado dinámico de bombas de calor de absorción. La planta

real en la que se ha basado el modelo es explicada más adelante. El modelo basado en la metodología de modelado orientado a objetos se detalla a continuación. Este ha sido desarrollado mediante tres niveles de abstracción y cuyas entradas son las entradas naturales de la planta. Los trabajos de simulación muestran unos resultados dentro de lo esperable.

5.6. Contribuciones científicas relacionadas

Las contribuciones científicas de esta tesis doctoral relacionadas con el capítulo son enumeradas y brevemente comentadas en la siguiente lista.

1. A. DE LA CALLE, L. ROCA, J. BONILLA & L. J. YEBRA. “Modelado y simulación de un evaporador de tubos sumergidos”. Poster en *XXXII Jornadas de Automática*. Sevilla. España. (2011).

En este trabajo se presenta un primer estudio acerca del modelado dinámico de la evaporación con tubos sumergidos. En él se presenta y se resuelve el problema de *chattering* cuando la presión es variable y el fluido es agua.

2. A. DE LA CALLE, J. L. YEBRA & S. DORMIDO. “Modeling of a falling film evaporator”. Poster en *9th International Modelica Conference* (pp. 941-948). Munich, Alemania. (2012). DOI: [10.3384/ecp12076941](https://doi.org/10.3384/ecp12076941)

En este trabajo se presenta un evaporador de película descendente con un gran nivel de detalle. El modelo orientado a objetos, se compone de múltiples submodelos que heredan unos de otros aumentando la complejidad desde el modelo de una película fluyendo por la superficie exterior del tubo al de la dinámica de todo el haz tubular.

3. A. DE LA CALLE, L. J. YEBRA & S. DORMIDO. “Dynamic Modeling and Simulation Study of Falling Film Evaporation and Condensation”. Presentación oral en *8th EUROSIM Congress on Modelling and Simulation* (pp. 427-432). Cardiff, Reino Unido. (2013). DOI: [10.1109/EUROSIM.2013.79](https://doi.org/10.1109/EUROSIM.2013.79)

En este trabajo se presenta un estudio realizado sobre el modelado de la evaporación y condensación de película descendente. Para ello, se presenta un modelo de condensador, se corrige y mejora el modelo presentado en el anterior congreso y se presenta un modelo de evaporador simplificado. Se compone un sistema que conecta condensador y evaporador a través de un volumen de gas y se comparan ambos modelos de evaporador. Los resultados demuestran que el nuevo modelo de evaporador prácticamente tiene la misma respuesta, y es mucho más eficiente computacionalmente.

4. P. Palenzuela, L. Roca, G. Zaragoza, D. Alarcón-Padilla, L. García & A. DE LA CALLE. “Operational improvements to increase the efficiency of an absorption

heat pump connected to a Multi-Effect Distillation unit”. *Applied Thermal Engineering*, 63(1), 84-96, 2014. DOI: [10.1016/j.applthermaleng.2013.10.050](https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2013.10.050)

En este artículo se identifican los principales problemas de operación de la DEAHP instalada en la Plataforma Solar de Almería y se proponen nuevas estrategias de operación para mejorar su rendimiento. Estas estrategias son probadas con éxito en la instalación.

Capítulo 6

Modelado y simulación de una planta de destilación multiefecto

*Como el agua clara
que baja del monte,
así quiero verte
de día y de noche.*

Camarón de la Isla
(Letra de Pepe de Lucía)

6.1. Introducción

El agua es una parte esencial de la vida. La falta de agua dulce en áreas de alto estrés hídrico es uno de los problemas más importante al que los investigadores se enfrentan. Tres cuartas partes de la Tierra están cubiertas de agua, pero de ella, el 97 % es salada. La desalinización de agua de mar es una de las posibles soluciones para las regiones costeras, pero ello requiere cantidades significativas de energía para lograr la separación de la sal del agua de mar. El acoplamiento de plantas de desalinización con las energías renovables es una vía para reducir el impacto ambiental de este proceso. La energía solar es una de las más prometedoras alternativas dada la frecuencia con la que se encuentran altos niveles de insolación en áreas de alto estrés hídrico (Kalogirou, 2005).

Las tecnologías de RO (*Reverse osmosis*)¹, MSF (*Multi-stage flash distillation*)² o MED acaparan más del 94 % de la capacidad de desalinización mundial (Li et al., 2013). Entre ellas, la MSF y la MED pueden ser acopladas con sistemas de captación de energía solar térmica, ya que la mayoría de sus consumos energéticos son cubiertos mediante energía térmica. Ambas tecnologías permiten ser acopladas en dos dispositivos separados, el captador solar y el destilador. La tecnología MED sigue siendo la

¹Ósmosis inversa.

²Destilación flash multietapa.

preferida en la mayoría de las plantas a gran escala alimentadas por energía solar térmica debido a su baja TBT (*Top brine temperature*), típicamente inferior a 80 °C, y sus bajos requerimientos de consumo de energía específicos (Ali et al., 2011).

El captador es un dispositivo que recoge el calor de la radiación solar y lo transfiere a un fluido. En las plantas MED operadas con energía solar, el fluido de trabajo suele ser agua o aceite sintético y habitualmente es almacenado en algún sistema de almacenamiento térmico (Qiblawey y Banat, 2008). El colector solar o el sistema de almacenamiento pueden ser directamente conectados con la unidad MED o indirectamente a través de un intercambiador de calor.

Hay muchos tipos de plantas MED, pero en todas ellas, el proceso de destilación es similar. Una planta está formada por un conjunto de elementos herméticos, llamados efectos, conectados entre sí. En cada uno de ellos tienen lugar una serie de procesos de evaporación y condensación en una secuencia decreciente de presiones y temperaturas. En el primer efecto, aquel con mayor presión, una fuente externa de calor lleva a cabo la primera evaporación del agua de mar que fluye dentro. El vapor generado por dicho efecto es usado como fuente de calor en el siguiente, por tanto, mientras que por un lado el vapor entrante es condensado, por el otro el agua de mar continúa bullendo y de este modo produciendo más vapor. Este proceso se repite en cada efecto (Li et al., 2013).

El M&S proporciona conocimientos sobre los fenómenos físicos que tienen lugar en el proceso y da información detallada sobre el comportamiento de la planta. Esta información puede aprovecharse para mejorar la eficiencia en un amplio rango de condiciones de operación y sin la necesidad de experimentación con una planta real. Algunas de las más recientes contribuciones en este área fueron hechas por Kouhikamali (2013) donde se estudió la influencia de diferentes combinaciones en el precalentamiento del agua de alimentación, por Joo y Kwak (2013) donde se incrementó la eficiencia mecánica y el beneficio económico de un sistema MED o por Palenzuela et al. (2013b) donde se evaluaron diferentes alternativas en la integración de procesos de desalinización (RO y MED) en los sistemas de enfriamiento de plantas termosolares de producción de electricidad. Las contribuciones hechas por El-Nashar (2000a,b) y Palenzuela et al. (2013a) merecen especial atención porque dichos autores pudieron validar sus respectivos modelos con datos experimentales.

La literatura relacionada con el modelado dinámico es escasa. Sin embargo, el interés por este tipo de modelado ha crecido recientemente. Kishore et al. (2010) presentó una versión preliminar de un simulador implementado modularmente en Visual Basic para el estado estacionario y dinámico de un sistema de desalinización por MED con compresión de vapor. El artículo muestra una simulación dinámica de un efecto.

Roca et al. (2012) desarrollaron e implementaron un modelo dinámico de una planta MED utilizando las correlaciones de transferencia de calor presentadas por Palenzuela et al. (2011). Este modelo es una versión mejorada de uno previo en el que los coeficientes de transferencia de calor eran considerados constantes (Roca et al., 2008). Fue desarrollado en el lenguaje de modelado orientado a objetos Modelica y su principal propósito era predecir la dinámica térmica del primer efecto y la producción de destila-

do. El modelo, que fue validado experimentalmente en su versión preliminar, usa como entradas las naturales del sistema, flujos másicos y temperaturas de entrada al sistema, pero además requiere de temperaturas intermedias y de salida del sistema.

Kim et al. (2013) presentaron un modelo de simulación para predecir el comportamiento transitorio en una planta MED alimentada por energía solar. El modelo, enfocado al análisis del comportamiento térmico a largo plazo y a la mejora del rendimiento del proceso, incluye un colector de tubo de vacío, un intercambiador de calor de láminas, un tanque de almacenamiento y una planta MED. Este modelo fue usado por Thu et al. (2014) para el estudio de una configuración adecuada para la hibridación de la AD (*Adsorption desalination*)³ y de los procesos MED.

Otro modelo dinámico para una planta MED fue presentado por Mazini et al. (2014). En este caso, el modelo implementado en Matlab/Simulink, permite hacer simulaciones de la respuesta de la planta frente a pequeñas perturbaciones en sus principales entradas. El modelo fue validado en el estado estacionario con datos experimentales, mostrando una desviación media del 20% en la producción de destilado.

En este capítulo se describen los trabajos de M&S realizados para una planta de destilación multiefecto. El modelo se basa en una de las instalaciones del CIEMAT-Plataforma Solar de Almería, el sistema experimental de desalinización solar AQUASOL (Alarcón-Padilla et al., 2008) el cual dispone de una unidad MED. El empleo de una metodología de modelado orientada a objetos ha permitido identificar y modelar cada uno de los subprocesos que tienen lugar en el sistema. La estructura modular de estos, permite la reutilización de gran parte del código desarrollado en el anterior capítulo ya que la física subyacente a estos subprocesos es la misma. La implementación se ha llevado a cabo con el lenguaje de modelado Modelica y la herramienta de simulación Dymola. El objetivo de este modelo es que permita estudiar el comportamiento de la planta en diferentes escenarios y diseñar estrategias de operación que mejoren la eficiencia. Es un modelo no lineal y basado en primeros principios. Está diseñado para que la causalidad sea la natural del sistema, donde las entradas de ambos coincidan, i.e. los flujos y temperatura de entrada de agua caliente y de agua de mar, y la temperatura ambiente. El modelo fue calibrado y validado con datos experimentales.

6.2. Descripción de la planta

En 1987, una unidad MED fabricada por ENTROPIE fue instalada en el CIEMAT-Plataforma Solar de Almería con el fin de probar y desarrollar el proceso MED acoplado con energía solar térmica. En el marco del proyecto europeo AQUASOL se llevó a cabo una profunda remodelación del sistema experimental de desalinización solar y este pasó a denominarse sistema AQUASOL. La configuración actual de este sistema fue descrito en la §5.2.

La unidad de destilación es una planta MED de 14 efectos con precalentadores y ali-

³Desalinización por adsorción.



Figura 6.1: Planta MED en la Plataforma Solar de Almería

mentación frontal (v. Fig. 6.1). Tiene una disposición vertical en la que el agua de mar desciende por gravedad desde el primer al último efecto logrando una producción nominal de destilado de $3 \text{ m}^3/\text{h}$. En 2005, la celda original del primer efecto que trabajaba con vapor saturado a baja presión ($70 \text{ }^\circ\text{C}$, 0.31 bar) fue reemplazada (Alarcón-Padilla y García-Rodríguez, 2007). La nueva celda permite trabajar directamente con un caudal de agua caliente proveniente de los tanques o de la DEAHP cuya temperatura puede variar entre $57\text{-}75 \text{ }^\circ\text{C}$, exhibiendo pequeñas desviaciones en el ratio de rendimiento global (Fernández-Izquierdo et al., 2012). Esta temperatura está controlada por una válvula de tres vías localizada entre los tanques y la planta MED. El caudal de entrada a la celda puede variar entre $7\text{-}12 \text{ L/s}$.

Salvo la primera y la última celda, el resto de celdas son idénticas. Cada celda está compuesta por dos haces de tubos horizontales, el efecto y el precalentador. Sobre el primero se produce la evaporación del agua de mar y sobre el segundo una parte del vapor es condensado. El efecto de la primera celda, también llamado calentador, está adaptado para que fluya agua líquida por el interior de los tubos en un régimen altamente turbulento (de la Calle et al., 2014). El precalentador de la última celda, también llamado condensador, es mucho mayor que el resto de precalentadores ya que debe condensar

todo el vapor que se produce en el último efecto. En la §6.2.1 se verán más detalles de la estructura interna de las celdas.

En la Fig. 6.2 se muestra el diagrama de flujos de la planta. Desde las piscinas se bombea una gran cantidad de agua de mar que entra en el interior del haz tubular del condensador, situado en la 14ª celda, y se produce la condensación del vapor generado en ese efecto. El caudal y la temperatura del agua de mar permiten preservar la presión interior de la celda, aunque no exista un sistema de control específico para tal fin. A la salida del condensador, parte de este agua de mar es rechazada y vuelve a las piscinas. Una válvula permite controlar la cantidad rechazada. La parte restante se emplea en la alimentación de la planta. Esta, que puede variar entre 6-8 m³/h, es calentada mientras fluye por el interior del haz tubular de los precalentadores de cada una de las celdas hasta que finalmente, en la 1ª celda es introducida dentro de la planta. Ahí, el agua de mar es rociada sobre el efecto donde se le transfiere parte del calor sensible del agua caliente empleada como fuente energética de la planta. Una parte de este agua de mar evapora, y la restante, que gana en concentración salina, cae por gravedad sobre el próximo efecto. El vapor producido en el efecto fluye hasta el precalentador, donde una parte se condensa sobre los tubos calentando el agua de mar que circula por su interior. El destilado y el vapor que no ha condensado fluye hasta el interior del haz tubular del siguiente efecto. Esta mezcla es usada para evaporar el agua de mar concentrada en sales que viene del primer efecto.

La disposición decreciente de presiones permite una eficiente transferencia de calor entre la mezcla (destilado y vapor) y el agua de mar proveniente del anterior efecto, ya que la diferencia de temperaturas de saturación de agua de mar y vapor no es excesiva. La caída de presión entre los efectos produce evaporación súbita del agua de mar al entrar en el efecto. Esta evaporación reduce su temperatura antes de que esta cubra la superficie de los tubos. Por este motivo el agua de mar siempre tiene menos temperatura que la mezcla que circula por dentro de los tubos del efecto.

El vapor condensado en cada efecto, en cada precalentador y el destilado producido en el condensador final componen la producción total de destilado de la planta. Parte del calor sensible del destilado es recuperado por la planta cuando fluye dentro de los haces tubulares de los efectos. Con el propósito de mejorar la eficiencia energética del proceso, el destilado acumulado en un efecto fluye al siguiente con la excepción de la 4ª, 7ª, 13ª y 14ª celdas como se muestra en la Fig. 6.2. En la 4ª celda, el destilado es dividido: una parte fluye hasta la entrada de la 7ª celda, la otra, se mezcla con la extracción de la salida y fluye hasta la entrada de la 10ª celda. De esta mezcla, una parte entra la 10ª celda y la otra se mezcla con la extracción de la salida que va a parar a la 13ª celda. Al igual que antes, una parte entra y la otra se mezcla con la extracción de la celda. Finalmente, la mezcla se une al destilado producido en el 14º efecto y entra en el condensador donde se recoge todo el destilado de la planta.

El agua de mar que se usa en esta planta desalinizadora proviene de pozos de agua salobre que hay en el desierto de Tabernas cuya salinidad es de aproximadamente 0.3326%. La planta es operada en circuito cerrado. Para almacenar todo el agua se

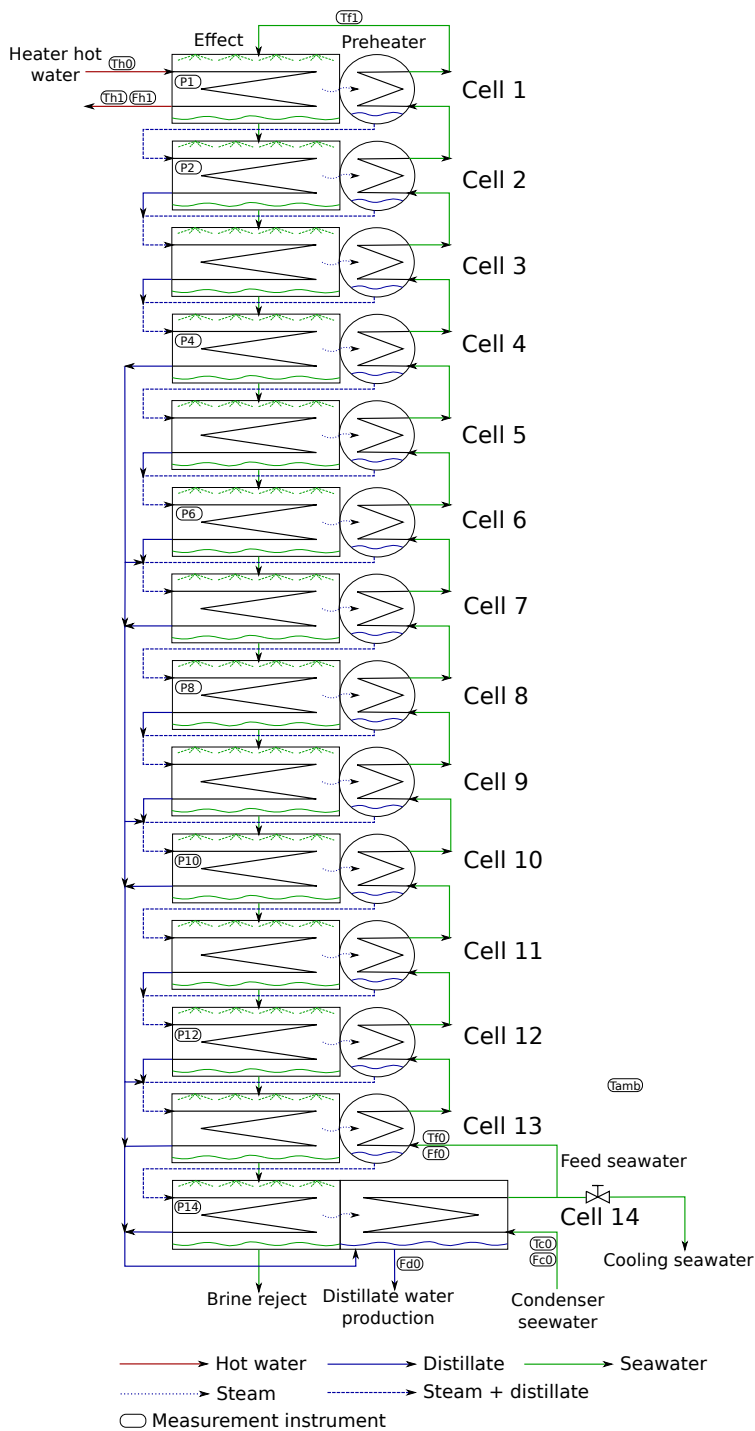


Figura 6.2: Diagrama de flujos de la planta MED del sistema AQUASOL

Tabla 6.1: Especificaciones de diseño de la planta MED instalada en la Plataforma Solar de Almería (Palenzuela et al., 2013a)

Número de efectos	14
Consumo energético de la fuente de calor	200 kW
Ratio de rendimiento	>9
Flujo de entrada de agua caliente	12 L/s
Flujo de entrada de agua de mar	8 m ³ /h
Salmuera rechazada	5 m ³ /h
Producción de destilado	3 m ³ /h
Temperatura de entrada del agua de mar	68°C
Temperatura del condensador	33°C
Sistema de vacío	Hidroeyectores (agua de mar a 3 bar)

emplean dos piscinas: una piscina pequeña que es usada para mezclar la salmuera y el destilado producido por la planta y otra grande que es usada para alimentar la planta. El agua de mar que es usada para refrigerar la planta y rechazada tras su paso por el condensador, es vertida en la piscina grande y parte del calor liberado por el condensador pasa al agua almacenada en la piscina incrementando su temperatura. Para evitar que la temperatura de agua de la piscina aumente, se instaló un sistema de refrigeración (*dry cooler*) que extrae agua de la piscina, la enfría y la vuelve a verter. Sin embargo, algunas veces resulta insuficiente (Palenzuela et al., 2013a). Este es uno de los motivos por los que es tan difícil alcanzar un estado estacionario duradero a pesar de los mecanismos de control que existen.

La planta MED posee un sistema de vacío que saca el aire y los gases no condensables generados durante el proceso. Este, consiste en dos hidroeyectores que están conectados a la 2^a, 7^a y 14^a celdas. El sistema retira los gases al comienzo del experimento, siendo vapor de agua el único gas restante dentro de las celdas. Los hidroeyectores forman un circuito cerrado junto con un pequeño depósito y una bomba eléctrica que impulsa agua de mar a través de los eyectores con una presión de 3 bar (Palenzuela et al., 2013a).

Las actuales especificaciones de diseño de la planta MED son mostradas en la Tab. 6.1. Todos los haces de tubos están fabricados con la aleación Cu-Ni 90-10 con 14 mm de diámetro exterior y 0.7 mm de espesor. Las áreas de intercambio de calor son:

- 1^{er} efecto: 24,26 m².
- 2^o-14^o efecto: 26,28 m².

- Precalentador: 5 m².
- Condensador: 18,3 m².

6.2.1. Descripción interna de las celdas

Como ya se ha comentado previamente, todas las celdas de la planta MED están compuestas por un efecto y un precalentador, dos haces de tubos horizontales sobre los que se producen fenómenos de evaporación y condensación respectivamente. Salvo la primera y la última celda, el resto son idénticas.

Una vista de la sección transversal de una de las celdas puede observarse en la Fig. 6.3b. El agua de mar entra a la celda por su parte superior, donde una bandeja perforada distribuye el agua uniformemente sobre la primera fila de tubos del efecto. Si la presión de saturación del agua de mar rociada es mayor que la presión de la celda, al entrar en ella se produce una evaporación súbita que reduce la temperatura del agua hasta igualarla con la de saturación a esa presión. Cuando el rocío de agua alcanza la primera fila del haz de tubos, se forma una película delgada que cubre toda la superficie. El agua de mar de la película desciende por gravedad y cae sobre el resto de tubos de la columna de tubos. El calor cedido por los tubos hace que se evapore parte del agua quedándose las sales en la película. Finalmente, cae sobre un colector que recoge todo el agua de mar, más concentrada en sales, y la conduce a la siguiente celda.

El vapor producido en el efecto fluye por toda la celda hasta alcanzar el precalentador. El deshumificador (una red metálica) evita que gotas de agua salada alcancen el haz de tubos del precalentador. Al estar la superficie de los tubos a menor temperatura que la de saturación, se forma una película delgada de agua sobre ellos. Esta, desciende por gravedad y cae sobre toda la columna de tubos incrementando su anchura cuanto más vapor de agua se va condensado sobre la película. Un colector recoge este destilado y lo une con el destilado que viene del interior del efecto, salvo las excepciones comentadas en la sección anterior.

En el interior de los tubos del efecto circula el destilado producido por la celda

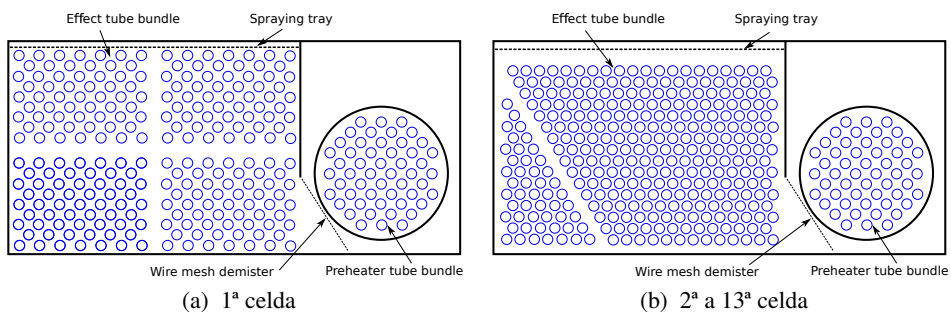


Figura 6.3: Vista de las secciones transversales de las celdas

anterior, precalentador y efecto (salvo las excepciones), y parte de su vapor. Como los tubos del efecto están a menor temperatura que la de saturación del vapor, se forma sobre la superficie interior una película delgada de condensado. El agua de esta película desciende por gravedad a la parte inferior donde se acumula y fluye en dirección axial hacia la salida del haz por un gradiente hidráulico perdiendo parte de su calor sensible. Solo el destilado consigue atravesar el efecto.

En el interior de los tubos del precalentador circula el agua de mar con la que luego será alimentada la planta, bombeada en contra del gradiente gravitatorio. Se aprovecha entonces, la configuración descendente de presiones de las celdas para reducir el consumo energético de la planta.

El efecto de la primera celda es ligeramente diferente al de una celda normal, como puede verse en la Fig. 6.3a. El proceso en el interior de la celda es idéntico al explicado anteriormente solo que con menor número de tubos en el haz. En el interior de los tubos circula agua procedente del tanque caliente o de la DEAHP en un régimen altamente turbulento. Tres *water boxes* permiten que el agua atraviese de un lado a otro la celda cuatro veces antes de salir, reduciendo su temperatura aproximadamente 3 °C en condiciones nominales. Debido a las limitaciones de espacio y potencia, el actual diseño del efecto introduce una caída de presión entre entrada y salida en condiciones nominales de aproximadamente 0.5 bar.

La última celda difiere de una celda normal, por su precalentador. Este es casi cuatro veces mayor que uno normal. Por su interior, circula una gran cantidad de agua de mar que es bombeada desde la piscina de alimentación. Su tamaño le permite un rango de caudales de operación que pueden ir desde los 8 m³/h cuando la temperatura del agua de mar es de 10 °C hasta 20 m³/h cuando la temperatura es de 25 °C (Fernández-Izquierdo et al., 2012).

6.3. Modelado dinámico

Con el objetivo de mejorar la eficiencia del proceso MED, se ha desarrollado un modelo dinámico basado en la planta experimental MED situada en la Plataforma Solar de Almería. Este, predice el comportamiento de la planta bajo todo su rango de condiciones de operación, y puede ser usado para probar diferentes condiciones de operación o desarrollar nuevas estrategias de control en la planta.

Para cumplir con los requisitos de precisión y esfuerzo computacional, el modelo siguió una metodología de modelado orientada a objetos. Esta metodología permite explotar la reutilización de código. La identificación y encapsulación de procesos de transferencia de masa y energía realizada en el anterior capítulo (cf. §5.3), es aprovechada prácticamente sin ningún cambio para componer el modelo de la planta. Éste, también está compuesto por tres niveles de abstracción. El nivel 1 lo componen los modelos de los procesos de transferencia de masa o energía del sistema que en su mayoría forman parte del nivel 1 del capítulo anterior. El nivel 2 ensambla estos procesos y les da un sentido funcional. El nivel 3 compone el modelo completo de la planta a partir de

modelos de menor orden.

Este modelo ha sido implementado en Modelica 3.2 (Modelica Association, 2014) y desarrollado completamente compatible con la MSL. La implementación de cada uno de los modelos es acausal, tal y como lo exige la orientación a objetos, sin embargo, la del modelo completo es causal para que sea la natural del sistema.

Como ya se comentó en la §5.3, el cálculo de las propiedades termodinámicas es uno de los talones de Aquiles del modelado dinámico de fluidos ya que es responsable en gran medida del error y del esfuerzo computacional de los modelos. Para los aquí descritos, se emplea la formulación industrial de las propiedades termodinámicas del agua y el vapor de la IAPWS (IAPWS, 1997), implementada en la librería Modelica Media. Para el agua de mar, se desarrolló una librería de propiedades termodinámicas con la formulación propuesta por Sharqawy et al. (2010) y las funciones inversas presentadas en el trabajo de de la Calle et al. (2014). Esta librería es explicada con más detalle en el apéndice A.

6.3.1. Nivel 1

Es el jerárquicamente inferior. Está compuesto por modelos que encapsulan procesos de transferencia de masa y/o energía del sistema de una forma aislada. La implementación de los modelos se basa en ecuaciones y una interfaz gráfica con conectores heredados de la MSL permite tratarlos como módulos independientes. A partir de estos modelos, se asientan los modelos de complejidad mayor que constituyen los niveles jerárquicos superiores, pero que no son más que la descripción de las interacciones entre los modelos aquí presentados.

En la Fig. 6.4 se pueden observar las interfaces de los modelos pertenecientes a este nivel. La implementación es, salvo algunos detalles que luego se comentarán, la misma que los presentados en la §5.3.1. Esta es una prueba más de la eficiencia de esta metodología de modelado frente al modelado causal.

Como resumen, las principales suposiciones que se consideran son:

- En el interior de las celdas solo hay vapor de agua. En el proceso de evaporación toda la sal, con una presión de vapor muy alta, se queda en fase líquida. Se desprecia la presencia de gases no condensables en el interior de las celdas. El sistema de vacío asegura esto.
- El vapor de agua es completamente condensado en los componentes destinados a ello (los haces tubulares que actúan como condensadores), la transferencia de calor entre el vapor y las paredes de la celda se desprecia.
- Aunque las pérdidas térmicas con el ambiente son consideradas, la capacidad térmica de la estructura metálica de la planta es despreciada.
- Los fluidos en el interior de la planta MED se encuentran en equilibrio termodinámico. Esto permite asumir CV homogéneos.

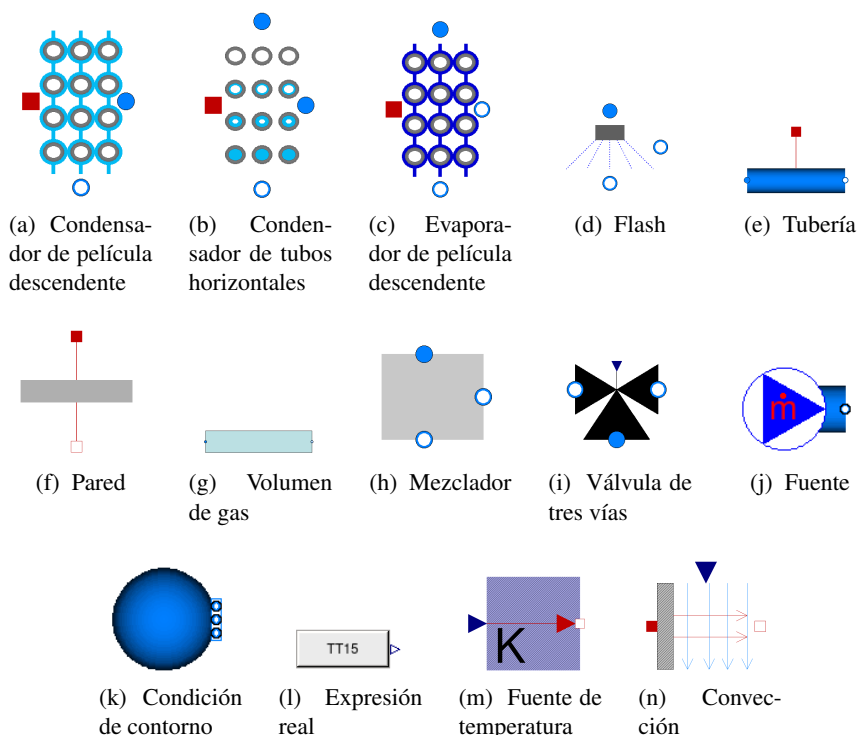


Figura 6.4: Modelos de nivel 1

- Toda la salmuera y el destilado producido por la planta es expulsado. La acumulación de dichos fluidos en su interior es despreciada. Al contrario que en la DEAHF, la circulación de los fluidos en el interior de la planta se realiza por gradiente hidráulico. No hay depósitos que obstaculicen dicha circulación. Su extracción de la planta se realiza mediante bombas hidráulicas, la dinámica de las mismas es despreciada.

Los detalles del condensador de película descendente, evaporador de película descendente⁴, flash y pared pueden consultarse respectivamente en las §5.3.1.1, 5.3.1.4, 5.3.1.5 y 5.3.1.8.

El condensador de tubos horizontales es ligeramente diferente al presentado en la §5.3.1.2. Este, dispone de una entrada de flujo adicional en su parte superior. Por ahí entra el destilado procedente de la celda anterior. Este destilado se une junto al destilado producido en el propio condensador en la parte inferior de los tubos y fluye axialmente impulsado por un gradiente hidráulico hasta la salida. Como los tubos son suficiente-

⁴En el anterior capítulo fue llamado generador para poder hacer una distinción entre una evaporación de un fluido de un solo componente (agua) y una disolución (bromuro de litio acuoso). En este caso, tal distinción no es necesaria ya que toda evaporación es de una disolución (agua de mar). El icono fue cambiado para darle una continuidad a la apariencia gráfica.

mente largos y la velocidad del fluido es baja, a la salida del haz tubular el condensado adquiere la temperatura de la pared. Para reflejar este hecho en el modelo, el balance másico y de energías dados por las Eq. 5.5 y 5.6 deben modificarse para tener en cuenta el flujo másico de destilado entrante, \dot{m}_{in} , y su entalpía específica, h_{in} :

$$0 = \dot{m}_{in} + \dot{m}_{con} - \dot{m}_{out}, \quad (6.1)$$

$$\dot{Q}_{w2} = \dot{m}_{in}h_{in} + \dot{m}_{con}h_f - \dot{m}_{out}h_w. \quad (6.2)$$

Durante la implementación del modelo completo de la planta MED, se observó la fuerte influencia que tenía el modelo de la tubería sobre el tiempo de computación. Esto se debe a que se conectan catorce tuberías en serie. En las primeras simulaciones se empleaba el modelo de tubería perteneciente a la librería MBMs (Bonilla et al., 2015). Sin embargo, este resultaba demasiado pesado al componer el modelo completo. Por ello, se optó por desarrollar un modelo de tubería más sencillo. Este modelo es el que fue presentado en la §5.3.1.7.

Dado que se puede despreciar el volumen de líquido en las celdas frente al ocupado por el vapor, el modelo de volumen de gas escogido fue el desarrollado en §5.3.1.9, que asume un volumen constante.

El mezclador actúa de la misma forma que lo hacía la división ideal de flujo (cf. §5.3.1.11). Se modelan las extracciones asumiendo que un porcentaje fijo del flujo entra en las celdas y el restante continúa su camino hacia el condensador final. Esta misma simplificación fue implementada con éxito en el trabajo de Palenzuela et al. (2011).

La válvula de tres vías, en este caso, se controla por flujo. La apertura de la misma será la división de la señal de control de flujo másico y el flujo másico total de entrada.

Los modelos de fuente, condición de contorno y expresión real, al igual que en el capítulo anterior, fueron tomados de la MSL. Dos modelos más de la MSL, esta vez de la sublibrería *Thermal*, son utilizados. Estos son el de fuente de temperatura, que impone una fuente térmica con una temperatura determinada por su entrada *RealInput*, y el de convección, que calcula el flujo de calor entre dos puntos a distinta temperatura (sus dos conectores) según la ley de enfriamiento de Newton cuyo coeficiente de transferencia de calor es dado por una entrada *RealInput*.

6.3.2. Nivel 2

Este nivel está formado por modelos de las principales estructuras funcionales de la planta, esto es: calentador, efecto, precalentador y condensador. En ellos, se agrupan los principales fenómenos físicos que se dan en este tipo de instalaciones y que ya fueron descritos por los modelos de nivel 1. Su implementación es gráfica, estableciendo las relaciones que se dan entre los distintos fenómenos. Para poder formar parte de un nivel superior de abstracción, los modelos de este nivel también son encapsulados mediante una interfaz (v. Fig. 6.5).

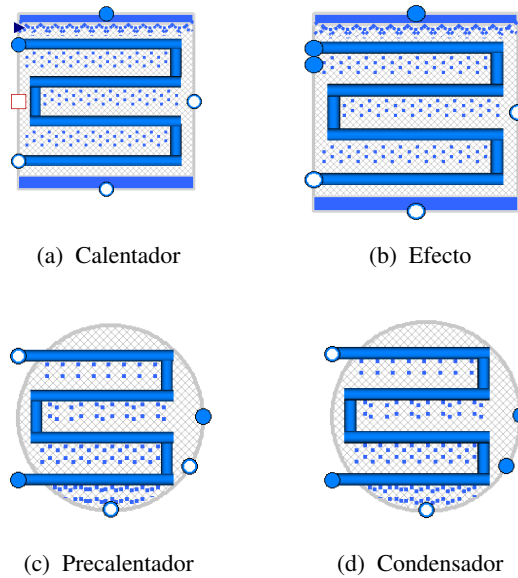


Figura 6.5: Modelos de nivel 2

6.3.2.1. Calentador

El modelo del calentador, mostrado en la Fig. 6.5a, encapsula los principales fenómenos físicos que tienen lugar en el primer efecto o calentador. La disposición del modelo se puede ver en Fig. 6.6a. Está compuesto por modelos de tubería, pared, evaporador y flash conectados entre ellos. Para considerar las pérdidas con el ambiente, el modelo de la pared puede ser conectado desde fuera por medio del conector de transferencia de calor Q_{env} . La línea de agua caliente atraviesa el modelo del calentador desde el conector hw_{in} a hw_{out} , liberando su calor sensible en el modelo de la tubería por medio del modelo de la pared. Este, transfiere el calor al modelo del evaporador de película descendente. La corriente de agua de mar entra dentro del calentador por el conector sw_{in} y lo abandona por el conector sw_{out} tras su paso por los modelos de flash y evaporador. El vapor generado en los modelos de flash y evaporador es recogido en el conector v_{out} .

6.3.2.2. Efecto

De una forma similar al modelo del calentador, el modelo del efecto también se construye con submodelos de nivel 1. El icono mostrado en la Fig. 6.5b envuelve la disposición de modelos de la Fig. 6.6b. La línea de agua de mar, al igual que en el modelo del calentador, cruza el efecto del conector sw_{in} al conector sw_{out} pasando por de los modelos de flash y evaporador. El vapor generado por estos modelos es recogido en el conector v_{out} . La fuente de calor, en este caso, es el condensador de tubos horizonta-

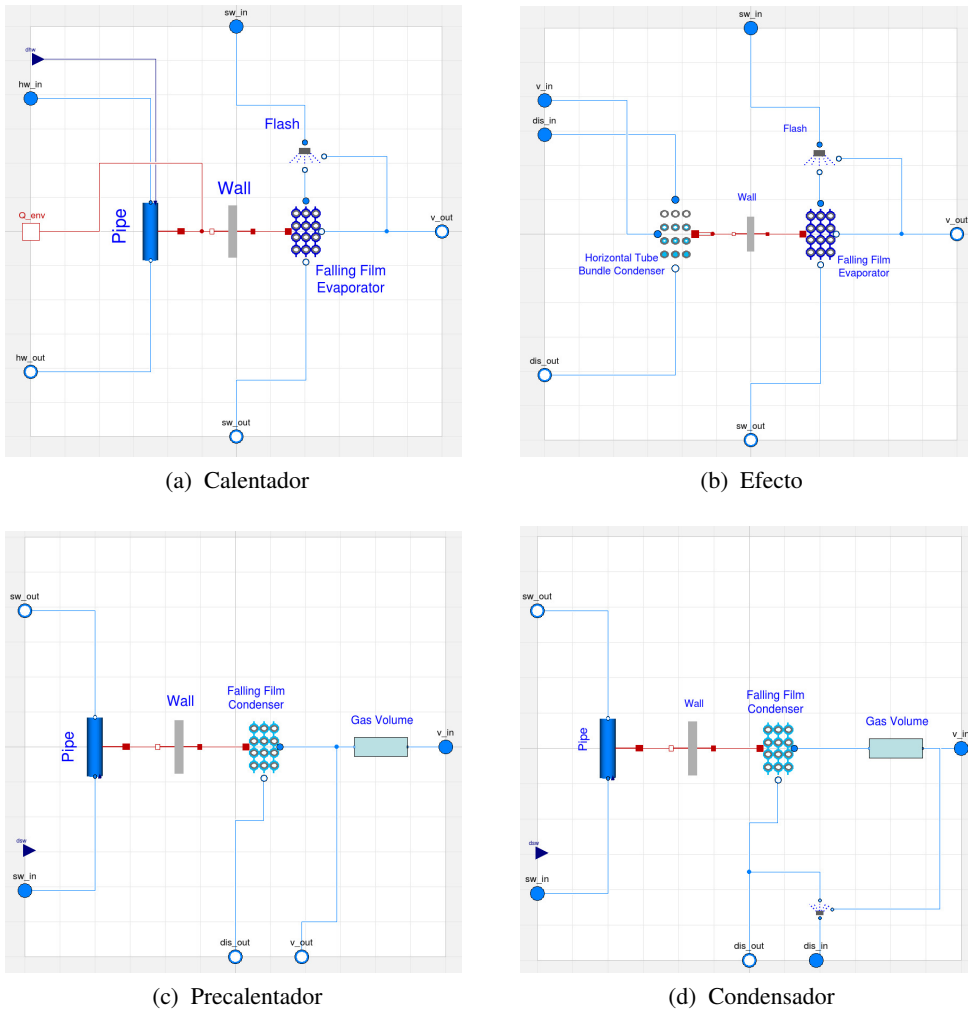


Figura 6.6: Encapsulación de los modelos de nivel 2

les que transfiere el calor latente del vapor (v_{in}) y parte del calor sensible del destilado (dis_{in}) procedentes de la celda previa. El destilado producido en el condensador abandona el efecto por el conector dis_{out} . El calor es intercambiado entre el condensador y el evaporador por medio del modelo de la pared.

6.3.2.3. Precalentador

El modelo del precalentador, Fig. 6.5c, construido según se muestra en la Fig. 6.6c, permite el intercambio de calor entre el vapor que condensa en el exterior del haz tubular y una corriente de agua de mar que circula por su interior. El volumen de gas gestiona el vapor de la celda. Este, entra por el conector v_{in} y lo abandona por el conector v_{out} .

Parte del vapor es consumido en el condensador de película descendente generando destilado que cae al siguiente efecto por el conector *dis_out* y cuyo calor es transferido al modelo de la tubería a través del modelo de la pared. La corriente de agua entra al precalentador por el conector *sw_in* y lo abandona por el conector *sw_out* después de haberse calentado en el modelo de la tubería.

6.3.2.4. Condensador

El condensador final se comporta como un gran precalentador donde todo el destilado de la planta es recopilado. El modelo (v. Fig. 6.5d) es construido como muestra la Fig. 6.6d. El destilado producido por el resto de la planta entra al condensador por el conector *dis_in*. Un modelo de flash divide este flujo, una parte es evaporada y se dirige al modelo del volumen de gas, y la otra, junto con el destilado producido en el condensador de película descendente abandona la planta por el conector *dis_out*. El conector *v_in* proporciona el vapor generado en el efecto. El condensador de película descendente libera el calor latente del vapor que es transferido por medio del modelo de la pared a la corriente de agua de mar que circula en el interior del modelo de la tubería. Esta corriente entra al condensador por el conector *sw_in* y sale por el conector *sw_out*. La derivada de la entalpía específica del agua de mar de entrada es obtenida por el conector *dsw*.

6.3.3. Nivel 3

Es el jerárquicamente superior y compone el modelo completo de la planta MED. Al igual que el nivel 2, su implementación es gráfica mediante diagramas de bloques. Estos bloques, que son modelos encapsulados de los niveles inferiores de abstracción, se conectan entre ellos determinando las relaciones entre los fenómenos físicos que tienen lugar en la planta.

En la Fig. 6.7 puede verse la disposición de los modelos de menor nivel y sus conexiones. La implementación está realizada a semejanza del diagrama de flujos empleado en la descripción de la planta (v. Fig. 6.2). Cada efecto se conecta con el precalentador adyacente, formando celdas. Secuencialmente cada una se conecta a la celda inferior, respetando las extracciones de destilado realizadas en los mezcladores.

Las fuentes de flujo y los modelos de condición de contorno se emplean para introducir las medidas experimentales tomadas en la planta. El modelo es alimentado en la última celda por una fuente de flujo que proporciona agua de mar con las medidas experimentales de flujo másico, temperatura y salinidad. Tras su paso por el condensador este flujo es dividido por la válvula de tres vías, una parte es desechada y vuelve a la piscina y la otra es usada para alimentar la planta. Esta división es controlada por la señal de agua de mar de alimentación. En la primera celda, una fuente de flujo provee de agua caliente al calentador. El flujo másico y la temperatura se imponen con los datos experimentales. Para reproducir la pérdida total de energía entre la MED y el ambiente se conecta con la primera celda un modelo de convección cuyo coeficiente de transfe-

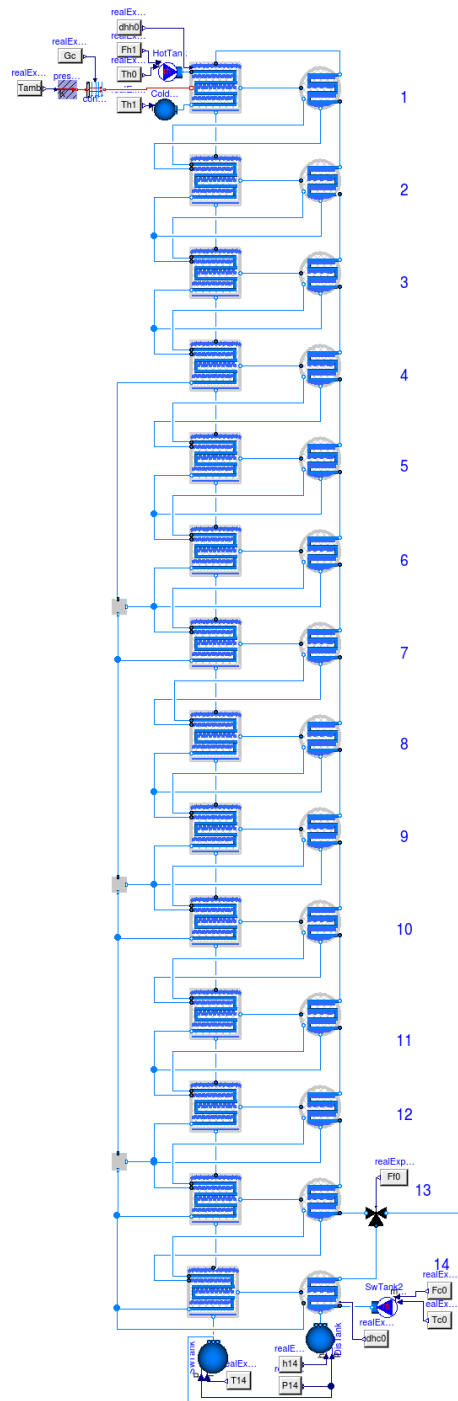


Figura 6.7: Composición final del modelo de la planta MED

rencia de calor es un parámetro de calibración. Las derivadas de los calores específicos del agua caliente y del agua de mar son calculadas fuera de línea y se introducen como entradas para mejorar la eficiencia del modelo.

6.4. Simulación dinámica

Al igual que en el anterior capítulo (v. §5.4), estos trabajos de simulación se realizaron con Dymola 2015 (Dassault Systemes, 2014) y con el integrador numérico DASSL. La tolerancia (relativa y absoluta) que se aplicó fue 10^{-4} . La máquina para las simulaciones fue la misma, un ordenador portátil común con un procesador Intel i5 hyper-threading dual-core con 8 Gbytes de RAM.

En la campaña experimental del proyecto POWER se realizó una serie de experimentos en la planta MED con el objetivo de verificar la validez de la librería de modelos de cambio de fase. Los experimentos se realizaron el 14 y 18 de octubre de 2013. El primero es el empleado para la calibración y el segundo para la validación. Los datos experimentales obtenidos fueron filtrados con un filtro pasa bajo, con una frecuencia de corte fue $2 \cdot 10^{-2}$ Hz, para reducir el ruido de las señales.

El modelo es un sistema DAEs de índice 1 compuesto por 4474 incógnitas y 4474 ecuaciones, de las cuales 70 variables aparecen en su forma diferencial. Después de su transformación y manipulación por parte del entorno de simulación, el modelo presenta 2117 variables dependientes del tiempo y 83 parámetros.

Los nombres de las medidas experimentales dados en la Fig. 6.2 determina la nomenclatura empleada para ellas. Según sea su utilidad se pueden clasificar como variables de entrada, de salida u observables en etapas intermedias. Como entradas se consideran:

- Flujo másico de entrada del agua en el calentador (FhI).
- Temperatura de entrada del agua en el calentador ($Th0$).
- Flujo másico de entrada del agua de mar de alimentación ($Ff0$).
- Flujo másico de entrada del agua de mar en el condensador ($Fc0$).
- Temperatura de entrada del agua de mar en el condensador ($Tc0$).
- Temperatura ambiente ($Tamb$).

Las derivadas de la entalpía específica de entrada del agua en el calentador y del agua de mar en el condensador son numéricamente estimadas mediante el método de diferencias finitas.

Cualquier variable usada en la simulación puede ser una variable de salida, sin embargo, en este caso y por coincidir con las naturales del sistema real las más relevantes son:

- Temperatura de salida del agua en el calentador ($Th1$).
- Flujo másico de destilado ($Fd0$).
- Temperatura de salida del agua de mar en el condensador ($Tf0$).
- Presión en el condensador ($P14$).

El resto de medidas son consideradas observables en etapas intermedias:

- Temperatura de entrada del agua de mar de alimentación ($Tf1$).
- Presión en la 1ª, 2ª, 4ª, 6ª, 8ª, 10ª y 12ª celda ($P1, P2, P4, P6, P8, P10$ and $P12$).

El modelo presenta 57 variables de estado:

- La temperatura de la pared en cada uno de los haces tubulares (28).
- La masa del volumen de vapor en cada celda (14).
- La entalpía específica de salida de las tuberías de los precalentadores y condensador (14).
- La entalpía específica de salida de la tubería del calentador (1).

Todas ellas deben ser correctamente inicializadas. Una completa inicialización en condiciones estacionarias en la práctica es imposible debido a que el modelo requiere una inicialización con flujos másicos no nulos y a que las ecuaciones de estado están entrelazadas. Se siguieron las siguientes reglas generales para la inicialización del modelo:

- La temperatura de la pared en cada uno de los haces tubulares se inicializó en condiciones estacionarias ($\dot{T}_w = 0$).
- La masa del volumen de vapor en cada celda se inicializó con valores de acuerdo a una distribución lineal de presiones entre la 1ª y 14ª celda, usando las medidas experimentales ($P1-P14$) como referencia.
- La entalpía específica de salida de las tuberías de los precalentadores de la 1ª a la 13ª celda es inicializada de acuerdo a una distribución lineal de temperaturas usando las medidas experimentales ($Tf0-Tf1$) como referencia.
- La entalpía específica de salida de la tubería del condensador se inicializa de acuerdo a la temperatura medida experimentalmente ($Tf0$).
- La entalpía específica de salida de la tubería del calentador se inicializa de acuerdo a la temperatura medida experimentalmente ($Th1$).

6.4.1. Calibración

Al igual que la §5.4.1, el grado de complejidad del modelo dinámico favorece una calibración parcial de submodelos, para finalmente realizar una calibración del modelo completo. En este caso, lo más sencillo es identificar los modelos parciales de calibración con los cuatro modelos de nivel 2. Al hacer modelos de calibración independientes, las variables consideradas intermedias en el modelo final adquieren gran relevancia ya que el error entre las medidas y la simulación serán las funciones objetivo de la calibración. Para que la calibración sea coherente con el sistema, los parámetros que son comunes en todas las celdas son asignados iguales en el modelo. Se usaron las mismas herramientas que en la §5.4.1, la versión gratuita de la Modelica Optimization library (Pfeiffer, 2012) permitió la aplicación del método de optimización heurístico multiobjetivo Downhill Simplex en Dymola.

Los datos empleados para hacer esta calibración fueron obtenidos en el experimento del día 14 de octubre de 2013. Los resultados de dicha calibración junto con algunos parámetros asignados son mostrados en la Tab. 6.2. Aunque se posee información detallada acerca de los haces tubulares de los efectos y calentador, su distribución es irregular no cuadrada como los modelos asumen. Para reducir el error asumido por esta distribución se calibró el número de filas y columnas de los mismos (N_{col} y N_{row}), así como de los precalentadores y condensador final de los que sólo se tenían datos del área de intercambio. Para ello se impuso como restricción el área de transferencia de calor

Tabla 6.2: Parámetros del modelo

Parámetros de los haces tubulares

Parámetro	HT	EF	PH	CD ^a
N_{col}	19.14	18	7.6	19
N_{row}	14	17	7.5	11
D_i [mm]	12.6	12.6	12.6	12.6
D_o [mm]	14	14	14	14
l [m]	1.975	1.975	2	2
$c_{p,w}$ [$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$]	377	377	377	377
ρ_w [$kg \cdot m^{-3}$]	8900	8900	8900	8900

Parámetros de transferencia de calor

Parámetro	Valor
α_{ev} [$W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$]	* ^b
α_{env}^A [$W \cdot K^{-1}$]	450

Parámetros estructurales

Parámetro	Valor
V [m^3]	1.24
mix [%]	2

^aHT: calentador; EF: efecto; PH: precalentador; CD: condensador

^bEste coeficiente de transferencia de calor es variable y se calcula de acuerdo al número de Nusselt dado por la Eq. 3.131 cuyos coeficientes han sido calibrados adquiriendo los siguientes valores: $c_1=0.2365$, $c_2=0.5939$ y $c_3=-0.16424$.

de los intercambiadores. Es por ello por lo que dichos valores adquieren unos valores no enteros. Los valores del diámetro interno D_i , el diámetro externo D_o , la longitud l (solo en el caso de calentador y efecto), la capacidad calorífica $c_{p,w}$ y la densidad ρ_w de los tubos son datos extraídos de la documentación. La longitud de los tubos del condensador y de los precalentadores fue calibrada. La correlación empleada para el cálculo de la transferencia de calor en la evaporación por película descendente es la misma para todos los haces tubulares, la dada por la Eq. 3.131. Los valores de los coeficientes fueron calibrados. Para el cálculo de las pérdidas de transferencia de calor, se empleó un coeficiente constante en el que se incluyó además el área de intercambio α_{env}^A , también un parámetro desconocido. Se asumió un volumen constante igual para todas las celdas V , a pesar, de saber que la última debería ser mayor. Lo cierto es que las simulaciones han demostrado la poca sensibilidad de los resultados respecto a dicho parámetro. Algo similar sucede con el porcentaje de las extracciones *mix*, ya que apenas se percibe su influencia en las salidas del modelo completo.

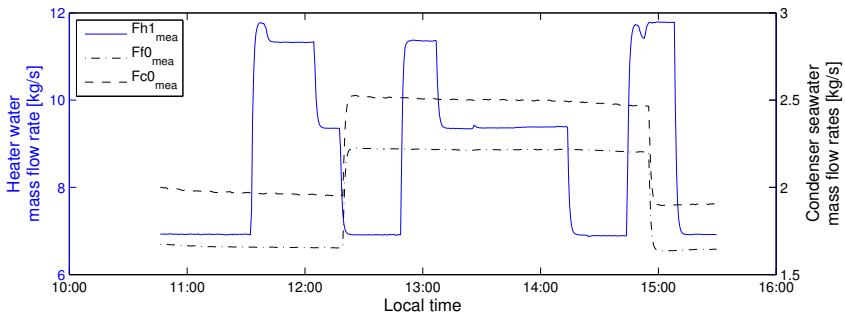
6.4.2. Validación

La validación del modelo completo se hizo con los datos del experimento del día 18 de octubre de 2013. Las simulaciones comienzan una vez arrancado el experimento, y aunque no se llega a capturar toda la inicialización de la planta, se asegura que los flujos másicos iniciales son distintos de cero. Esto permite una correcta inicialización de los modelos.

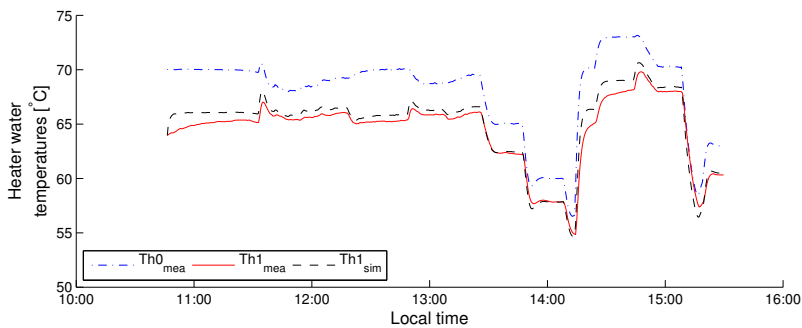
El tiempo de computación para realizar la simulación de 17000 s fue de 10.8 s. No se presentó ningún evento de estado y el orden máximo que tuvo que emplear DASSL en la integración fue 3.

Las Fig. 6.8 y 6.9 muestran los resultados de la simulación del día de validación. Para asegurar una correcta validación, el experimento se diseñó para que sus valores variasen muchas veces abruptamente cubriendo todo el rango de operación de la planta, tal y como muestra la Fig. 6.8a. Por esta misma razón, la temperatura del agua de entrada al calentador también varía en numerosas ocasiones (cf. Fig. 6.8b). El resto de las entradas al sistema, la temperatura ambiente y la temperatura de agua de mar de entrada, son variables libres y pueden variar con el tiempo. La variación de ambas se muestra en la Fig. 6.8c.

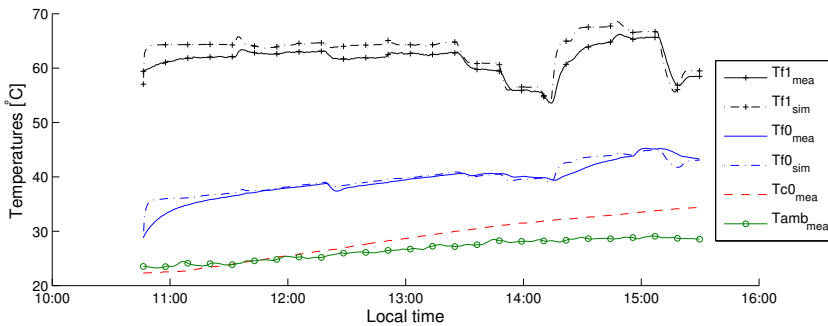
Al comienzo de la simulación, se pueden observar saltos en la respuesta del modelo respecto de las variables medidas. La causa de esto son las pequeñas diferencias entre los valores iniciales propuestos en las variables de estado y los valores reales de estos. Los errores medios absoluto y porcentual de algunas de las variables de la simulación respecto a las medidas experimentales a lo largo de la simulación pueden verse en la Tab. 6.3. Las temperaturas de salida del agua en el calentador y del agua de mar en el condensador muestran buenos ajustes respecto a los datos experimentales (cf. Fig. 6.8b y 6.8c). Aunque el error absoluto excede en ciertas ocasiones el rango de incertidumbre de las medidas, 0.85 °C, el error medio revela la bondad del ajuste obtenido con



(a) Flujos máxicos de entrada



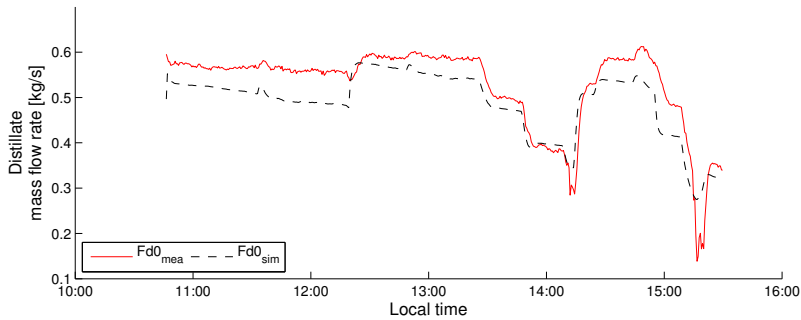
(b) Temperatura de entrada y salida del agua en el calentador



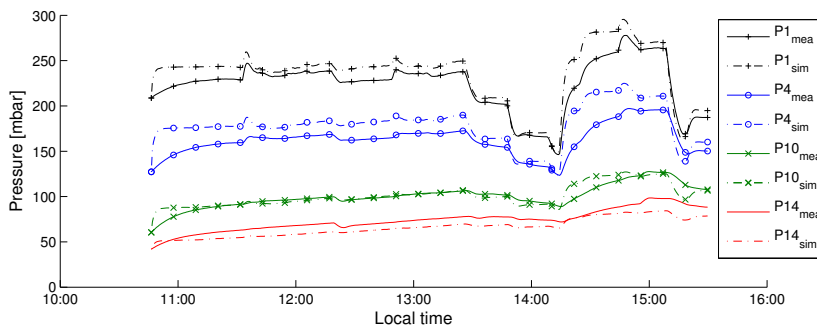
(c) Temperatura de entrada, intermedia y de salida del agua de mar, y temperatura ambiente

Figura 6.8: Entradas y salidas del modelo, validación (I)

el modelo porque este es menor que dicho rango. La temperatura del agua de mar de alimentación a la entrada en la primera celda, $Tf1$, muestra peor ajuste ya que excede del rango de incertidumbre de la medida. La presiones también muestran mayores desviaciones respecto a los datos experimentales (cf. Fig. 6.9b). El rango de incertidumbre de dichas medidas es de 3 mbar excepto para la última celda que es de 1.25 mbar. Las presiones simuladas de las etapas iniciales exhiben una dinámica más rápida que la



(a) Flujo másico de destilado



(b) Presiones en la planta MED

Figura 6.9: Entradas y salidas del modelo, validación (II)

medida. Estas discrepancias, más acentuadas para subidas de presión pueden ser la evidencia de que tanto la capacidad térmica de la estructura metálica de la planta como la posible condensación en las paredes de la celda no deben ser despreciadas en el modelo. El flujo másico de destilado muestra buena concordancia con los datos experimentales (cf. Fig. 6.9a). La incertidumbre relativa del caudalímetro de destilado es del 0.75 %, menor que el error medio de simulación. Sin embargo, las medidas de las últimas etapas (presión y producción de destilado) están ligeramente influenciadas por la bomba de destilado que lo extrae de la última celda trabajando contra la presión ambiente. El ruido que genera en las medidas es mayor que la incertidumbre del instrumento. Es por ello, por lo que estas variables exhiben un error mayor que la teórica incertidumbre de las medidas.

6.5. Resumen

En este capítulo se explican los trabajos de modelado y simulación de una planta de desalinización por destilación multiefecto. Este comienza con una introducción en la que se presenta el proceso de destilación multiefecto y se hace una breve revisión de los

Tabla 6.3: Incertidumbre en la medida y error medio de simulación absoluto y porcentual para el día de validación

	Th1 [°C]	Tf1 [°C]	Tf0 [°C]	Fd0 [kg/s]	P1 [mbar]	P4 [mbar]	P10 [mbar]	P14 [mbar]
inc.	0.85	0.85	0.85	0.75 %	3	3	3	1.25
abs.	0.65	1.96	0.82	0.045	11.91	17.20	4.21	8.02
%	1.00	3.18	2.00	8.31	5.38	10.60	4.11	11.04

últimos avances en el modelado de este tipo de procesos. A continuación, se describe la planta usada como referencia para el modelo. En la siguiente sección se explica en detalle el modelo, el cual se desarrolla con una metodología de modelado orientado a objetos. Se describen los tres niveles de abstracción empleados. En el nivel superior de abstracción se compone el modelo completo de la planta. Finalmente, se presentan los trabajos de simulación, calibración y validación, del modelo con datos reales obtenidos de la planta. La buena concordancia entre las medidas y las simulaciones revela la bondad de los modelos.

6.6. Contribuciones científicas relacionadas

Las contribuciones científicas de esta tesis doctoral relacionadas con el capítulo son enumeradas y brevemente comentadas en la siguiente lista.

1. A. DE LA CALLE, J. BONILLA, L. ROCA & P. PALENZUELA. “Dynamic modeling and performance of the first cell of a multi-effect distillation plant”. *Applied Thermal Engineering*, 70, 410-420, 2014. doi: [10.1016/j.applthermaleng.2014.05.035](https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2014.05.035)

El artículo presenta un modelo dinámico de la primera celda de una planta MED desarrollado con una metodología de modelado orientada a objetos. El modelo se basa en el sistema de desalinización solar térmico AQUASOL. En este artículo, también se explica el trabajo realizado para adaptar la formulación existente de las propiedades termodinámicas del agua de mar a una que pueda usarse en un modelado dinámico de cambio de fase. Los trabajos de simulación, incluyen una calibración y una validación del modelo usando datos experimentales con los que se demuestra una buena concordancia.

2. K. TOUATI, A. DE LA CALLE, F. TADEO, L. ROCA, T. SCHIESTEL & D. ALARCÓN-PADILLA. “Energy recovery using salinity differences in a multi-effect distillation system”. *Desalination and Water Treatment*, 1-8, 2014. doi: [10.1080/19443994.2014.940648](https://doi.org/10.1080/19443994.2014.940648) *Previamente expuesto como presentación oral en Conference on desalination for the environment clean water and energy. Limassol, Chipre. (2014)*

En este artículo se estudia la posibilidad de recuperar parte de la energía empleada en el proceso de destilación multiefecto con la tecnología de ósmosis por presión

retardada. El modelo de la planta MED se empleó para el cálculo en estacionario de la temperatura y concentración de la salmuera producida por la planta en distintos puntos de operación.

3. A. DE LA CALLE, J. BONILLA, L. ROCA & P. PALENZUELA. “Dynamic modeling and simulation of a solar-assisted multi-effect distillation plant”. *Desalination*, 357, 65-76, 2015. doi: [10.1016/j.desal.2014.11.008](https://doi.org/10.1016/j.desal.2014.11.008)

Este artículo continúa con el trabajo de modelado de la planta MED que se inició con el modelo de la primera celda. El modelo dinámico, basado en una metodología de modelado orientada a objetos, presenta una estructura modular con tres niveles de abstracción. Este se calibra y valida con datos experimentales. Se demuestra la buena concordancia entre las medidas experimentales y la simulación.

Capítulo 7

Conclusiones y futuras líneas de investigación

*Decías que todos sabían la respuesta,
tratabas de esconderte
y no hallabas la respuesta
cruzando los mares de la luz...
el sol en la cabeza.*

Piratas
(Letra de Piratas)

7.1. Conclusiones

La principal aportación de esta tesis es el diseño e implementación de los modelos dinámicos de tres procesos termoquímicos de instalaciones termosolares (planta de generación de hidrógeno, bomba de calor de doble efecto y planta de destilación multiefecto) que, independientemente de la metodología de modelado y el entorno de simulación empleado, mejora el conjunto de prestaciones de esfuerzo computacional, precisión y rango de validez lo publicado hasta la fecha. Estos modelos son no lineales ya que de otra forma no hubiera sido posible cubrir todo el rango de operación de las plantas. Están basados en primeros principios, lo que ha permitido una mejor comprensión de cada uno de los procesos de transferencia de masa y/o energía y una mayor precisión de los resultados. Son modelos basados en ecuaciones, cuya causalidad se determina a partir de la elección de las entradas, lo que les confiere una gran versatilidad. Han sido desarrollados con una metodología de modelado orientada a objetos que facilita sus diseños y la comprensión de los mismos así como la reutilización de código. La disposición modular y jerárquica de los modelos facilita además las tareas de actualización y mantenimiento. Han sido calibrados y validados con datos experimentales, con lo que se ha podido verificar su precisión. Las principales conclusiones y recomendaciones extraídas del desarrollo de este trabajo junto con las aportaciones realizadas son expuestas

a continuación:

- Se han revisado los conceptos básicos del modelado y simulación de sistemas dinámicos, así como sus principales problemas y sus posibles soluciones. Se ha presentado el lenguaje de modelado elegido para la realización de los modelos, Modelica, y su entorno de simulación, Dymola. *Entender cómo el entorno de simulación maneja y resuelve los modelos facilita la depuración de los mismos.* Esto gana en importancia cuanto mayor sea la complejidad del modelo. No sólo es más fácil depurar los errores, sino que además puede ser aprovechado para incrementar la calidad del modelado. Se actualizó la librería BondLib para facilitar la depuración de errores.
- Se ha revisado la termodinámica química partiendo desde los principios y las leyes empíricas fundamentales hasta dar un contexto físico y matemático adecuado a los principales fenómenos que se modelan, esto es los cambios de fase y las reacciones químicas. *Describir un determinado fenómeno a partir de las ecuaciones básicas de la física facilita su entendimiento.* El tratamiento riguroso de los balances de masa y energía en los procesos de evaporación (y ebullición) ha permitido desarrollar un procedimiento general y eficiente para el cálculo de los flujos de cambio de fase en condiciones de presión variable para líquidos de uno o varios componentes.
- Se han estudiado en detalle los procesos termoquímicos que se modelan y se ha hecho una revisión de los últimos avances en modelado dinámico de dichos procesos. Se ha realizado un trabajo de documentación de las instalaciones que han sido usadas como referencia para poder describirlas con el máximo grado de detalle. *Cuanto mayor sea el conocimiento que se tenga de la referencia, más fácil será obtener una buena concordancia entre referencia y simulaciones.* Ayuda a la correcta interpretación de los resultados, y permite entender y ampliar el rango de operación de los modelos. En este tipo de instalaciones, es habitual que existan fenómenos con diferentes tiempos de respuesta y que se hagan dominantes unos u otros en función de las condiciones de operación.
- Se han estudiado las propiedades termodinámicas de los fluidos que intervienen en los procesos, se ha hecho una revisión del estado actual de las mismas y se ha realizado una librería de funciones para el bromuro de litio diluido en agua y para el agua de mar. *En el modelado dinámico, la forma en la que se calculan las propiedades termodinámicas de los fluidos tiene una gran influencia en el error y/o en el tiempo de computación de las simulaciones.* Se ha estudiado cuál es la forma más adecuada de calcularlas para cumplir con los requisitos de precisión y esfuerzo computacional de los modelos. Estos tiene una fuerte dependencia respecto a las variables de estado utilizadas en el modelo por ello fue necesario estudiar previamente cuáles eran las que más interesaban desde el punto de vista de la descripción física del sistema. Se adaptaron las funciones de las propiedades

termodinámicas para que pudieran ser calculadas con estas variables. La mejor opción para hacer esta tarea fue la inversión analítica de correlaciones empíricas.

- En los capítulos prácticos se han definido los objetivos de cada uno de los modelos. En algunos casos, se han estudiado varias versiones de los mismos, se ha demostrado la concordancia entre ellos y probado su rango de validez. *El mejor modelo es el más sencillo que cumple con la tarea asignada.* El fallo más común en modelado es el de complicar en exceso los modelos. Si bien es cierto, que a menudo se gana en precisión y/o en rango de validez, también lo es, que es a costa de incrementar el esfuerzo computacional. Por ello, el más sencillo suele ser también el que menor tiempo de ejecución consume, una cualidad importante tanto para depuración como para la facilidad de ser empleados con distintos propósitos. Los modelos simplificados del evaporador y absorbedor/generador de película descendente suponen un importante avance respecto a sus versiones detalladas.
- Se han explotado las virtudes de la metodología de modelado orientada a objetos: acausalidad, modularidad, jerarquización y reutilización de código. *La metodología de modelado orientada a objetos ofrece importantes ventajas al ahorrar tiempo de desarrollo en modelos de sistemas complejos.* Todos los modelos han sido desarrollados con tres niveles de abstracción (jerarquización). Para el nivel inferior se identificaron los principales procesos de transferencia de masa y/o energía y se encapsularon en módulos que han podido ser reutilizados (modularidad y reutilización de código). El nivel intermedio ensambló dichos procesos y les dio un sentido funcional. El nivel superior compuso el modelo completo con elementos de menor orden. Se ha estudiado la problemática de la causalidad computacional de los modelos presentando dos soluciones para la inversión de modelos dando las dos buenos resultados (acausalidad).
- Se han realizado tres campañas experimentales, una en cada instalación modelada. Además, se han instrumentado las plantas para que esto sea posible. El objetivo de dichas campañas siempre fue capturar la dinámica de las plantas en todo su rango de operación. *Al experimentar con una instalación real se adquiere un conocimiento del proceso que de otra forma no es posible adquirirlo.* No sólo son importantes los resultados, sino que con el manejo de las plantas se perciben detalles de las mismas que no están documentados. Esto también ayuda a una correcta interpretación de los resultados.
- Se han analizado los resultados de la manipulación del modelo y sus simulaciones. Se han calibrado los modelos dentro del rango de fiabilidad de las medidas experimentales. Para ello, se emplearon dos metodologías diferentes en las que se pudo explotar la modularidad de los modelos. Se validaron los modelos con datos experimentales. *Sólo los datos experimentales dan resultados incorruptos por las hipótesis asumidas en los modelos.* Los datos experimentales ofrecen una

objetividad imprescindible para el modelado. Si los resultados de la simulación no coinciden con los esperados de ellos se deben revisar las hipótesis asumidas para llegar a ellos. En este caso, se demuestra una buena concordancia entre datos experimentales y simulaciones demostrando que la precisión de los modelos cumple con los objetivos demandados.

- Para finalizar, faltaría comentar que los modelos que se han presentado han podido ser utilizados para cumplir las tareas para las que fueron desarrollados. Esto le da un valor añadido al trabajo aquí expuesto, ya que no sólo se ha contribuido en el modelado de los procesos sino que este avance ya repercute en la mejora de los procesos. El modelo de la planta de generación de hidrógeno, el primero en implementarse, ha sido usado en diferentes tareas de control lo que ha permitido una mejora de la operación de la planta. El modelo de la planta de destilación multiefecto, el segundo en implementarse, ha sido usado para investigar nuevas utilidades de la salmuera. En breve, será usado en optimizaciones termo-económicas o en controladores predictivos para satisfacer la demanda de agua de diversos sistemas de consumo como por ejemplo invernaderos. El modelo de la bomba de calor, el último en ser implementado, ya se está usando para mejorar su operación y pronto se obtendrán resultados.

7.2. Futuras líneas de investigación

A continuación, se proponen algunas futuras líneas de investigación. Ya se comentó en el capítulo 2 que el trabajo de modelado nunca acaba, y siempre es posible encontrar un margen de mejora al modelo, y más, si este es de un sistema complejo. Dicha mejora puede ir en tres sentidos: reducción del esfuerzo computacional, aumento de la precisión y aumento del rango de validez. Lo ideal es abordarlos a la vez ya que lo más probable es que al modificar uno se repercuta negativamente en los demás, sin embargo, la práctica demuestra que es difícil avanzar en los tres sentidos.

Se pueden estudiar cuáles son los puntos débiles de los modelos y tratar de resolverlos de alguna otra forma. Algunas preguntas que se deben plantear son: ¿se puede reducir el índice del problema planteando el modelo de otra forma?, ¿mediante algún cambio de variable se puede reducir el número de variables de estado?, ¿se pueden asumir nuevas hipótesis que reduzca el peso computacional de los modelos? o ¿se pueden evitar de alguna forma los eventos? Si alguna de estas respuestas es afirmativa, ese es un buen punto de partida para mejorar el modelo.

Respecto a la precisión del modelo, hay muchas formas para incrementarla pero pocas que lo hagan sin penalizar el esfuerzo o el rango. Aumentar la complejidad de los modelos debería aumentar la precisión, pero como contrapartida también se incrementará el esfuerzo. Otra forma de mejorar la precisión es reducir la generalidad del modelo y sacar más provecho de los datos experimentales. Si en vez de emplear expresiones generales para las transferencias de masa y energía se emplean correlaciones empíricas

basadas en los datos recopilados se puede mejorar la precisión del modelo sin penalizar el esfuerzo, pero también se puede perder la capacidad de extrapolar los resultados a otros procesos. De igual forma, si se reduce el rango de validez se incrementará la precisión, ya que es de esperar que a menores variaciones de las entradas menor variedad de respuestas y más fácil es ajustar los modelos con los parámetros. Cualquier sistema tiende a una respuesta lineal si se restringen las entradas lo suficiente.

Por todo esto, es tan importante saber cuál es la finalidad del modelo ya que ayuda a analizar si los cambios son beneficiosos en su conjunto. Algunas propuestas concretas que se pueden estudiar son:

Modelo de la planta de generación de hidrógeno

- Merece la pena hacer el esfuerzo de representar el modelo de la planta de procesamiento (diseño térmico) en su espacio de estados. Existen muchas metodologías de control que se pueden aplicar empleando dicha representación. Además, permitirá estudiar la posible linealización del modelo abriendo aún más el espectro de métodos de control que pueden aplicarse.
- Diseñar y realizar una campaña experimental para validar el diseño químico del modelo. Se puede también estudiar la dinámica de las reacciones químicas y ver cuál es el rango de validez de la ecuación de Arrhenius para estas reacciones (cf. Eq. 3.173).
- En el diseño inverso, se pueden estudiar otras técnicas de derivación en línea que sean más eficientes y más precisas. Esto no solo ayudará a mejorar el esfuerzo computacional en este caso, sino que podría ser extrapolado a otros modelos aumentando así su versatilidad.

Modelo de la bomba de calor de doble efecto

- Cuando se dispongan de medidas experimentales de los flujos internos y concentraciones, diseñar y realizar una campaña experimental para validar el modelo con datos experimentales. Se pueden estudiar los mecanismos de transferencia de masa y energía en el interior de absorbedor y generador para obtener correlaciones que se ajusten a los datos.
- Uno de los puntos conflictivos del modelo de la DEAHP, es su problema de índice superior. Un estudio detallado del modelo del volumen variable empleado en G2, probablemente ayude a identificar qué términos de la Eq. 5.72 son los más relevantes y poder despreciar el resto. No es seguro que se reduzca el índice del modelo pero probablemente sea más eficazmente resuelto.
- Para reducir el error en el nivel de alta presión, se debe estudiar la influencia de la carcasa de G2 con la presión del recinto. La capacidad térmica y la condensación del vapor en ella parece ser el motivo de la amortiguación en la respuesta de la presión en ese contenedor.

- Otro estudio para reducir el error de los flujos máxicos de condensado es el de los mecanismos de evacuación de G2 y E0. En el primero, se debe estudiar el funcionamiento de la trampa de vapor que está situada al final del haz. En el segundo, se debe incluir la dinámica de la bomba que ayuda al destilado a desplazarse.
- Para reducir el error en los intercambiadores de calor, se puede estudiar la influencia de la capacidad térmica de su estructura metálica en la temperatura de salida.
- Estudiar la geometría de los depósitos de los contenedores para mejorar el modelado de los niveles de los mismos.
- Por su naturaleza, los modelos que presentan cambio de fase muchas veces se ven obligados a expresiones condicionales para manejar el hecho de que en situación de coexistencia de fases los grados de libertad del sistema se reducen en uno. Se podría estudiar cómo aplicar la metodología de modelado de estructura variable a este tipo de modelos ya que podría mejorar el esfuerzo computacional de las simulaciones.

Modelo de la planta de destilación multiefecto

- Para reducir el error de la presión en las primeras celdas, habría que estudiar la capacidad térmica de la estructura metálica de la planta y la condensación del vapor en las paredes de las celdas cuando se producen variaciones rápidas en las entradas.
- Para reducir el error de la producción de destilado y de la presión en las últimas celdas se puede estudiar el mecanismo de expulsión de los productos de la planta. El estudio de las condiciones en las que funcionan las bombas de destilado y salmuera ayudaría a esto.
- Para mejorar la precisión de la temperatura del flujo de agua de alimentación térmica que sale de la primera celda se puede estudiar la caída de presión en el interior del haz tubular del calentador. Esto mismo, también se podría estudiar en el condensador.

Otra importante línea de investigación relacionada con el tema de esta tesis es la explotación de los modelos. Los modelos que aquí se han presentado tienen una clara finalidad, que es poder ser usados para el diseño, prueba y validación de sistemas de control avanzado. Los nuevos sistemas de control pueden mejorar la operación de las plantas. Pero además, podrán ser usados para estudiar la respuesta de la planta frente a nuevos escenarios. Algunas propuestas concretas se plantean a continuación:

Modelo de la planta de generación de hidrógeno

- Gracias al modelo, se han podido desarrollar distintos sistemas de control con muy buenos resultados que han permitido hacer un rechazo de perturbaciones y

unas transiciones de ciclos con más seguridad. Este control se basa en fijar y mantener dos temperaturas de operación, una para cada ciclo. El efecto de este perfil plano de temperaturas es una producción de hidrógeno intermitente en forma de picos. Una interesante línea de investigación sería estudiar la posibilidad de una producción continua de hidrógeno mediante el control de perfiles de temperaturas dependientes del tiempo.

Modelo de la bomba de calor de doble efecto

- En este caso, el control automático de las bombas que impulsan el bromuro de litio es fundamental para asegurar la estabilidad, y debe ser el primer reto. Hasta ahora, este control es manual y requiere la atención constante de un operador.
- No solo la estabilidad de la DEAHP depende del control de las bombas internas que impulsan el agua y la disolución de bromuro de litio, las válvulas reguladoras también ejercen una gran influencia en la estabilidad. Ya se demostró que un control de la válvula *EV55* influye directamente en la estabilidad y eficiencia de la bomba. Su apertura, permite reducir la presión de G2, y por tanto, controlar que la concentración de la disolución no llegue a la zona de cristalización. El segundo reto es, una vez asegurados los niveles de los depósitos con el control de las bombas internas, garantizar que la DEAHP trabaje en zona segura de concentraciones en todo momento.
- Una vez conseguidos los requisitos de estabilidad y seguridad, se puede investigar cómo mejorar el rendimiento de la bomba de calor. Un trabajo interesante consistiría en estudiar la apertura de la válvula *LV01*. Actualmente, esta válvula tiene un control todo o nada. Si se consiguiera una correcta regulación de la misma, seguramente se reduciría el efecto flash en E0 con la entrada masiva de condensado de C1. La consecuencia directa es que se mejoraría la eficiencia de la bomba al poder obtener mayor caudal de destilado procedente de la MED.
- Un estudio interesante consistiría en calcular la cantidad óptima de agua en el interior de la DEAHP (y por tanto de concentración del bromuro de litio). Demasiada agua produce el desbordamiento en operación del depósito de E0, problema que habitualmente se soluciona evacuando el agua por la válvula *TV18*. Poca agua produce el vaciamiento del depósito de E0. Una concentración inicial alta de absorbente también es perjudicial para la bomba ya que existe riesgo de cristalización.
- Ya que la bomba de calor puede operarse a carga parcial, se pueden estudiar estrategias de control para poder obtener de ella un flujo de calor bajo demanda. Se ha observado en operación, que cuando se acopla directamente DEAHP y MED y la válvula *TV16* está abierta al 100% se provee más potencia térmica de la que es capaz de consumir la planta MED en condiciones de seguridad. El estrangulamiento de esta válvula puede controlar el flujo. Sin embargo, este control es un reto dada la gran inercia térmica de la bomba.

- Con el modelo, se puede estudiar cuál es el impacto de posibles modificaciones de la instalación sin que estas tengan que llevarse a cabo en la realidad. Una de ellas sería probar como influiría en la eficiencia de la bomba la instalación de un intercambiador de calor en la línea de agua que permite la entrada de condensado en el depósito de C1 procedente del condensador de G1. Este intercambiador podría reducir o eliminar la evaporación flash que penaliza la desorción en G1.
- También en simulación, se puede estudiar la influencia de la configuración de flujos de la DEAHP en el rendimiento. Se podría probar la configuración en paralelo y estudiar posibles estrategias de control para asegurar la estabilidad. Otro trabajo interesante sería el del estudio de distintos tipos de bomba de absorción (un efecto, triple efecto,...) en el proceso.

Modelo de la planta de destilación multiefecto

- Existen pocos elementos en la planta MED que necesiten ser controlados para mejorar su operación. Uno de ellos es el caudal de refrigeración del condensador. El consumo eléctrico de la bomba aumenta en la medida en la que lo hace el flujo impulsado. Y el caudal de destilado aumenta cuanto mayor sea este caudal para una determinada temperatura. Se podría estudiar la relación entre consumo eléctrico y producción de destilado y optimizar esta relación.
- Se puede extrapolar este estudio de consumo y producción a toda la planta. La gran caída de presión del caudal de agua caliente en el calentador supone un importante consumo eléctrico para la bomba que lo impulsa. Se podría hacer un control que regulase ambos caudales, el del calentador y el del condensador, maximizando la producción de destilado, minimizando el consumo térmico del calentador y minimizando el consumo eléctrico en función de las temperaturas de ambos caudales.
- Al haber desarrollado un modelo de la DEAHP, es posible conectar ambos modelos y estudiar cuáles son las condiciones más favorables para minimizar la relación entre el consumo de gas en la caldera y la producción de destilado.
- La modularidad del modelo permite realizar estudios con distintas configuraciones. Un estudio interesante sería ver la respuesta de la planta frente a distintas conexiones entre celdas o distinto número de ellas.

Otros trabajos de investigación que merecen la pena ser considerados son:

- Dada la fuerte influencia que tienen las propiedades termodinámicas en los procesos de transferencia de masa y energía, y sabiendo que la corrosión es inevitable en el interior de las DEAHP; un trabajo interesante es estudiar cómo las partículas de óxido influyen en las propiedades del bromuro de litio, con el fin de entender su efecto en el rendimiento de una bomba de calor.

-
- Un modelo detallado de la caldera de gas permitiría entender mejor el acoplamiento con la bomba y probablemente se podrían implementar controles automáticos para mejorar el rendimiento conjunto.

Apéndice A

Propiedades termodinámicas para modelado dinámico

A.1. Introducción

El modo en el que se calculan las propiedades termodinámicas de los fluidos en el modelado de procesos dinámicos puede ser crítico. Este es responsable en gran medida del error y del tiempo de computación de las soluciones (Kunick et al., 2008), y además, es el origen de numerosos problemas intrínsecos al modelado dinámico, e.g. chattering (Bonilla et al., 2012a). Por ello, el esquema computacional de las propiedades termodinámicas debe reunir las siguientes cualidades: tener suficiente precisión, una alta velocidad de cálculo, ser consistentes numéricamente y continuas en todo su rango de validez (Wang et al., 2012). Otro aspecto muy importante en el cálculo de propiedades termodinámicas de fluidos son las variables independientes usadas en la formulación. Estas condicionan fuertemente la implementación de los modelos hasta el punto de restringir las variables de estado.

Por su facilidad para ser medidas, presión y temperatura son las variables independientes habituales en la formulación, a la que se le añade la fracción másica o la concentración cuando el fluido es multicompuesto. Sin embargo, como se explicó en la §3.6 estas tres variables no son adecuadas para representar sistemas de fluidos en cuyo rango de operación se produzcan cambios de fase. Una de ellas debe sustituirse por una variable que presente una discontinuidad natural en el cambio de fase, i.e. entropía específica, volumen específico, entalpía específica, densidad... La sustitución habitual, que coincide con la tomada en esta tesis, es temperatura por entalpía específica. Esta elección se debe principalmente por la facilidad de expresar el balance energético del sistema con esta variable (cf. §3.4.3.1). Por tanto, la formulación de propiedades termodinámicas para esta tesis debe permitir que las variables independientes sean presión, entalpía específica y fracción másica.

A continuación se va a presentar la formulación de las propiedades termodinámicas

de los fluidos empleados en los capítulos 5 y 6, i.e. agua pura, agua de mar y bromuro de litio en disolución.

A.2. Propiedades termodinámicas del agua

Debido a su importancia como fluido de trabajo en ciclos térmicos de potencia y en otras aplicaciones industriales, el agua, es uno de los elementos en los que más se ha avanzado para adaptar la formulación de sus propiedades termodinámicas a la mecánica de fluidos computacional. La IAPWS (*International Association for the Properties of Water and Steam*)¹ que es el organismo internacional sin ánimo de lucro referencia para las investigaciones de propiedades termodinámicas del vapor, del agua líquida y algunas disoluciones acuosas recomienda dos formulaciones:

- El estándar IAPWS-95: “The IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use”. (Wagner y Pruss, 2002)
- El estándar IAPWS-IF97: “The IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam”. (IAPWS, 1997)

La primera, la más precisa hasta la fecha, es la recomendada para la mayoría de los usos, especialmente en aplicaciones científicas. Su implementación es mediante una única ecuación por propiedad para todo el rango de temperaturas y presiones². La segunda es la recomendada para el cálculo computacional, ya que está optimizada para reducir el esfuerzo computacional. Con ella, se reduce entre 100-200 veces el tiempo de cálculo respecto a la IAPWS-95 (Wang et al., 2012). Las diferencias entre los valores de las variables calculadas son muy pequeñas en la mayoría de los casos. Sólo su precisión es notablemente inferior en las proximidades del punto crítico y en la región metaestable del agua líquida sobrecalentada. Su formulación se divide en 5 regiones separadas, con una ecuación por propiedad³, y en las que se han observado pequeñas discontinuidades en los límites. En la Fig. A.1 se pueden observar esta división en regiones para todo el rango de validez:

- Región 1: Agua líquida subenfriada.
- Región 2: Vapor sobrecalentado.
- Región 3: Agua saturada y flujo bifásico.
- Región 4: Ebullición y condensación.

¹Asociación Internacional de Propiedades del Agua y el Vapor.

²A excepción de las propiedades que presentan discontinuidad en el cambio de fase, que entonces se formulan con dos ecuaciones.

³Alguna región es ampliada con una ecuación suplementaria completamente consistente con la ecuación básica.

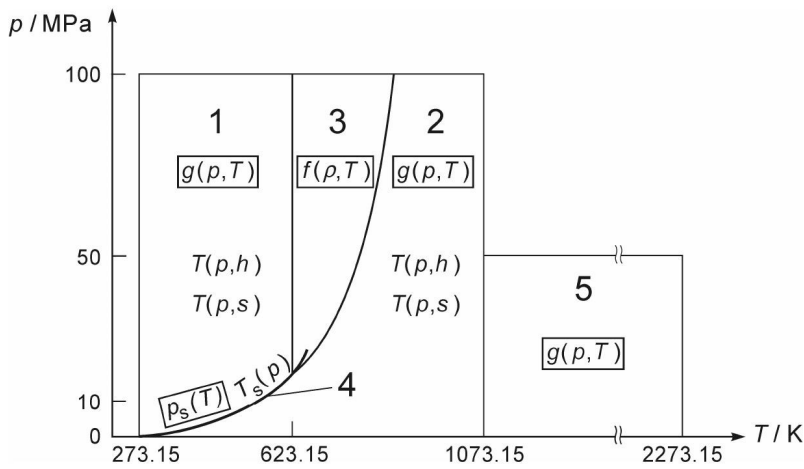


Figura A.1: Regiones y ecuaciones de IAPWS-IF97(IAPWS, 1997)

- Región 5: Vapor sobrecalentado.

Para que estos dos estándares puedan usarse con otras variables independientes sin recurrir a la iteración, se provee de una serie de funciones inversas consistentes con las ecuaciones básicas. Dado que las ecuaciones básicas son excesivamente complicadas para poder invertirse analíticamente, las funciones inversas son correlaciones de datos virtualmente generados con las ecuaciones básicas. La consistencia de las propiedades se asegura imponiendo unos requisitos de precisión extrema para estas funciones, que como consecuencia hace que los polinomios que forman estas funciones sean de mayor orden o que sea necesario dividir el rango en subregiones⁴. El error máximo en todo el rango para las funciones inversas $T(p, h)$ en las regiones 1 y 2 de IAPWS-IF97 es de $|\Delta T_{max}|_1 = 23,6$ mK, $|\Delta T_{max}|_{2a} = 9,6$ mK, $|\Delta T_{max}|_{2b} = 9,3$ mK y $|\Delta T_{max}|_{2c} = 23,7$ mK siendo 25 mK la tolerancia máxima impuesta a las funciones.

Algunos autores han conseguido reducir el tiempo computacional empleado en el cálculo respecto al estándar IAPWS-IF97. Este es el caso de Miyagawa y Hill (2001) que con un método tabular de expansión de series de Taylor en su versión de $p-h$ mejoró la eficiencia computacional, Kunick et al. (2008) que obtuvieron prometedores resultados con un método de interpolación de splines o Wang et al. (2012, 2013) que basándose en un esquema de interpolación por splines bicuadráticos de doble red sobre las superficies $p-T$ y $p-h$ han obtenido los mejores ratios de esfuerzo computacional hasta la fecha.

⁴La región 2 se divide en tres subregiones.

A.3. Propiedades termodinámicas del agua de mar

A pesar de ser la sustancia líquida más abundante en nuestro entorno, el conocimiento que se posee de las propiedades termodinámicas del agua de mar es aún muy limitado en comparación con el que se tiene del agua pura. En una primera aproximación sus propiedades físicas son similares a las del agua pura, pero las pequeñas diferencias en densidad, calor específico y punto de ebullición afectan significativamente a procesos como la destilación. Al ser una combinación de agua pura y sales disueltas, para su descripción ha de incluirse una nueva variable independiente más, la salinidad, que puede representarse en unidades de fracción másica.

El procedimiento actual para el cálculo de las propiedades termodinámicas del agua de mar limita el rango de aplicabilidad en el modelado dinámico. Se están haciendo importantes esfuerzos para que esto cambie, como los de la IAPWS cuyo subcomité de agua de mar ha publicado recientemente dos formulaciones: una orientada al uso científico (IAPWS, 2008) y otra al uso industrial (IAPWS, 2013). Los principales problemas de estas formulaciones es que los rangos de validez no son lo suficientemente extensos, la manipulación matemática de sus ecuaciones es engorrosa comparada con otras con mayor precisión, no proporciona ecuaciones para las propiedades de transporte ni sus ecuaciones están estructuradas para proporcionar propiedades multifase como la tensión superficial.

Sharqawy et al. (2010) revisó las principales propiedades termodinámicas del agua de mar en el rango habitual de temperatura y salinidad de los procesos de desalinización por ósmosis inversa y térmica. En este estudio se presentaron correlaciones en forma de ecuaciones de regresión en función de temperatura y salinidad para la densidad, calor específico, conductividad térmica, viscosidad dinámica, tensión superficial, presión de vapor, elevación del punto de ebullición, calor latente de evaporación, entalpía específica, entropía específica y coeficiente osmótico. Se compararon con otras correlaciones y se realizaron recomendaciones para cada una de las propiedades. Respecto a la formulación propuesta por la IAPWS, esta tiene la ventaja de ser más precisa en el rango de aplicabilidad y la desventaja de ser menos consistente al no proceder de una única ecuación fundamental sino de una regresión para cada una de las propiedades. Esta formulación solo proporciona la función inversa de la temperatura de saturación $T_{sat}(p)$.

Para esta tesis, se ha empleado la formulación de las propiedades propuesta por Sharqawy et al. (2010). El principal motivo para esta elección se fundamenta en la necesidad de una formulación cuyas variables independientes sean presión, entalpía específica y fracción másica, ya que las ecuaciones que en ella se proponen son polinomios de menor grado y su manejo matemático es más sencillo. Mediante una inversión de la función de la entalpía específica para obtener $T(h, w)$, es posible calcular cualquier propiedad termodinámica con las variables de estado mediante un procedimiento de dos pasos. En este caso, dicha inversión se realiza mediante la manipulación matemática de la ecuación de la entalpía específica.

La entalpía específica del agua de mar propuesta se calcula a partir de la siguiente

expresión:

$$h = h_{water} - w(b_1 + b_2w + b_3w^2 + b_4w^3 + b_5T + b_6T^2 + b_7T^3 + b_8wT + b_9w^2T + b_{10}wT^2), \quad (\text{A.1})$$

donde la entalpía específica del agua pura es calculada como:

$$h_{water} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3. \quad (\text{A.2})$$

Los coeficientes de estos polinomios se muestran en la Tab. A.1.

Si se reordenan las Eq. A.1 y A.2 es posible expresar la ecuación en forma de ecuación cúbica respecto a la temperatura:

$$0 = c_3T^3 + c_2T^2 + c_1T + c_0, \quad (\text{A.3})$$

donde,

$$\begin{aligned} c_0 &= a_1 - b_1w - b_2w^2 - b_3w^3 - b_4w^4 - h, \\ c_1 &= a_2 - b_5w - b_8w^2 - b_9w^3, \\ c_2 &= a_3 - b_6w - b_{10}w^2, \\ c_3 &= a_4 - b_7w. \end{aligned}$$

Tabla A.1: Coeficientes de la entalpía específica para el agua de mar (Sharqawy et al., 2010)

i	a_i	b_i
1	$1,41355 \cdot 10^2$	$-2,34825 \cdot 10^4$
2	$4,20207 \cdot 10^3$	$3,15183 \cdot 10^5$
3	$-5,35 \cdot 10^{-1}$	$2,80269 \cdot 10^6$
4	$4 \cdot 10^{-3}$	$-1,44606 \cdot 10^7$
5		$7,82607 \cdot 10^3$
6		$-4,41733 \cdot 10^1$
7		$2,13940 \cdot 10^{-1}$
8		$-1,99108 \cdot 10^4$
9		$2,77846 \cdot 10^4$
10		$9,72801 \cdot 10^1$

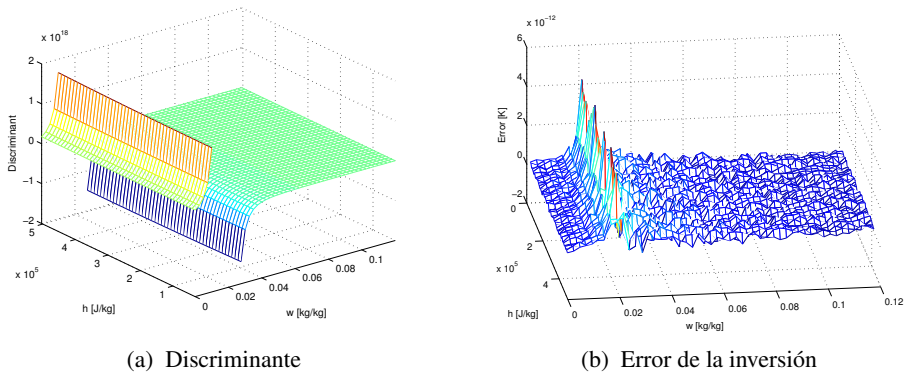


Figura A.2: Análisis de la función inversa $T(h,w)$ para el agua de mar

La ecuación cúbica es analíticamente resoluble⁵. Dado que los coeficientes son números reales, esta ecuación tiene al menos una solución real. Dependiendo del valor del discriminante es posible identificar la naturaleza de las otras soluciones⁶. La Fig. A.2a muestra una asíntota en el discriminante para $w = 0,01869$, donde la ecuación se convierte en una ecuación cuadrática. Por tanto, la función inversa debe ser dividida en tres regiones en función de su salinidad para asegurar su continuidad, estas son: menor, igual o mayor que dicho valor de fracción másica. En la práctica, se observan pequeñas discontinuidades en el entorno de la asíntota del discriminante que son menores que la tolerancia numérica de las simulaciones. La representación del error en la superficie $T(h,w)$ muestra estas discrepancias (v. Fig. A.2b). La derivada parcial de la temperatura respecto a la entalpía es también continua, pero la derivada parcial respecto a la fracción másica vuelve a presentar discontinuidades debido a la asíntota. Una posible solución para evitar esta discontinuidad es calcular la derivada como un producto de otras derivadas parciales que sí son continuas aplicando la regla de la cadena.

A.4. Propiedades termodinámicas del bromuro de litio

La disolución de bromuro de litio en agua es uno de los fluidos más usados en la industria de la refrigeración desde los años 50. Sus propiedades termodinámicas determinan de una forma crítica el rendimiento de los ciclos de absorción (Sun et al., 2012). Sin embargo, el conocimiento que se tiene de ellas es muy limitado en comparación con otras sustancias. El creciente interés por ciclos de absorción más complejos, y con los que se espera obtener mejores rendimientos, ha suscitado un repunte en publicaciones

⁵El método de Cardano proporciona las raíces de la ecuación, ya sean reales o imaginarias.

⁶El discriminante se define como $\Delta = 18c_3c_2c_1c_0 - 4c_2^3c_0 + c_2^2c_1^2 - 4c_3c_1^3 - 27c_3^2c_0^2$. Si es positivo, la solución tiene una raíz real y dos complejas conjugadas. Si es negativo, la solución tiene tres raíces reales distintas. Si es 0, la solución tiene raíces múltiples y todas son reales ya sea una raíz triple o una doble y otra simple.

Tabla A.2: Comparación de propiedades termodinámicas del bromuro de litio

Referencia	Propiedades	Rango T[°C]	Rango w[%]	Eq. ^a
McNeely (1979)	p_{sat}, c_p, h	16-165	45-70	No
Kashiwagi (1985)	D	-	3-17 M ^b	No
Andberg (1986)	D	-	7-17 M	No
Patterson y Perez-Blanco (1988)	$p_{sat}, T_{sat}, \rho, \eta, c_p, h, \sigma, k$	0-180	0-70	No
Lee et al. (1990)	ρ, η	25-200	45-65	No
DiGuilio et al. (1990)	k	20-190	45-65	No
Yao et al. (1991)	σ	20-90	10-60	No
Jeter et al. (1992)	c_p, h	20-200	45-65	No
Lenard et al. (1992)	p_{sat}	20-190	30-65	No
DiGuilio y Teja (1992)	k	0-200	30-65	No
Feuerecker et al. (1994)	T_{sat}, c_p, h, s	0-190	40-70	No
Wimby y Bertsson (1994)	ρ, η	20-70	0-61	No
Kim et al. (1994)	σ	-	-	No
Ishida y Mori (1996)	σ	-	-	No
Chua et al. (2000)	p_{sat}, ρ, c_p, h, s	0-190	0-75	No
Kaita (2001)	p_{sat}, c_p, h, s	40-210	40-65	No
Yuan y Herold (2001)	σ	-	-	No
Park et al. (2001)	σ	-	-	No
Kulankara y Herold (2002)	σ	-	-	No
Yuan y Herold (2005)	p_{sat}, ρ, c_p, h, s	5-250	0-75	Sí
Kim y Infante Ferreira (2006)	p_{sat}, ρ, c_p, h, s	0-210	0-70	Sí
Pátek y Klomfar (2006a)	p_{sat}, ρ, c_p, h, s	0-226,85	0-75	No
Jun et al. (2010)	σ	-	-	No

^aEcuación fundamental.

^bConcentración expresada en unidades de molaridad.

de correlaciones de propiedades que tratan de ampliar los rangos de validez y precisión.

En la Tab. A.2 se muestra una revisión de los últimos avances en las propiedades termodinámicas del bromuro de litio en disolución desde las correlaciones clásicas de McNeely (1979). En ella se repasan las propiedades termodinámicas necesarias para esta tesis, esto es: presión de vapor p_{sat} , temperatura de saturación T_{sat} , densidad ρ (o su análoga: volumen específico), viscosidad η , calor específico isobárico c_p , entalpía específica h , entropía específica s , tensión superficial σ , conductividad térmica k y difusividad D . Todas las ecuaciones revisadas usan como variables independientes temperatura y fracción másica (o alguna otra medida de concentración), a excepción de la temperatura de saturación cuyas variables independientes son presión y concentración. En la tabla, también se analizan los rangos de aplicabilidad en temperaturas y concentraciones⁷. En la última columna se examina si las ecuaciones derivan de una ecuación fundamental, e.g. función de Gibbs, o se trata de regresiones separadas para cada una de ellas.

Al ser una medida directa, numerosas publicaciones proponen correlaciones de presión de vapor. Estas, han ido ampliando los rangos de aplicabilidad hasta la actualidad. Sin embargo, pocas de ellas ofrecen la función inversa, esto es, la temperatura de sa-

⁷El límite de concentración a bajas temperaturas queda determinado por la curva de cristalización.

turación. Algo parecido ocurre con las otras dos medidas directas, densidad y calor específico. Sus rangos de aplicabilidad han ido aumentando con los años. Con estas tres medidas se pueden determinar los potenciales termodinámicos, aunque sólo dos publicaciones (Yuan y Herold, 2005; Kim y Infante Ferreira, 2006) unifican todas las propiedades en una ecuación fundamental, como es la función de Gibbs de la que deriva el resto. De estas dos, la segunda además trata de darle un sentido físico a las ecuaciones ya que su formulación parte de las propiedades de las sustancias puras y determina las propiedades de mezcla. La formulación de Pátek y Klomfar (2006a) a pesar de no tener la consistencia numérica de las otras dos, propone correlaciones con una gran precisión que además son consistentes con las propiedades del agua pura a base de extender la formulación IAPWS-95 con polinomios de hasta 30 términos (en el caso de la entalpía específica). Las investigaciones acerca de las propiedades de transporte son muy escasas en comparación con las otras y sus rangos mucho más limitados. Respecto a la tensión superficial, existen numerosos estudios que prueban la fuerte influencia que tienen los aditivos sobre esta propiedad pero ninguno de ellos proporciona una ecuación para su cálculo en un rango de temperaturas y concentraciones.

La necesidad de unas propiedades cuyas variables independientes sean presión, entalpía específica y fracción másica, obligó a desarrollar una función inversa de la entalpía. Se probaron tres metodologías diferentes para la obtención de esta: una interpolación bilineal de una tabla de datos, una correlación polinomial y una inversión analítica, siendo esta última la opción escogida en la implementación de la tesis.

En la primera metodología, se toma como referencia la formulación propuesta por Pátek y Klomfar (2006a) por ser la más precisa y con mayor rango de aplicabilidad. Con esta formulación se creó una malla 50x50 para representar la superficie $T(h, w)$. Para que la malla fuese rectangular en entalpías y fracciones másicas se recurrió a iteración de la función $h(T, w)$ y a una evaluación del polinomio más allá de su rango. Una vez construida la malla, los valores de la temperatura se obtienen a partir de una interpolación bilineal. El error máximo que se obtuvo en esta inversión fue de 0,05 K. Aunque era posible mejorar el error mediante interpolaciones con splines, el esfuerzo computacional que mostró la interpolación bilineal era excesivo para un modelado dinámico.

La segunda metodología consistió en una regresión de un polinomio a partir de un vector de 1000 datos virtuales uniformemente distribuidos y generados a partir de la función $h(T, w)$ de la formulación de Pátek y Klomfar (2006a). El polinomio es una extensión de la función inversa del agua a la que se le añaden 30 términos (cuyo término de mayor grado es de orden 6 en concentraciones y 4 en entalpías). Los coeficientes de ajustaron haciendo uso de la *Optimization Toolbox* de Matlab con la función *fminsearch*. Aunque se mejoró notablemente el esfuerzo computacional, el error máximo cometido era del orden de 1 K, el cual no garantiza la consistencia numérica de la formulación.

Asumiendo que el rango de temperaturas y concentraciones de los procesos termodinámicos en el interior de la bomba de calor puede ser cubierto por la formulación propuesta por Kaita (2001), se tomó esta como referencia. Esta formulación tiene la

ventaja de que la ecuación de la entalpía específica es de segundo grado en temperaturas, y por tanto, se puede invertir analíticamente:

$$h = (A_0 + A_1 w)T + \frac{1}{2}(B_0 + B_1 w)T^2 + (D_0 + D_1 w + D_2 w^2 + D_3 w^3), \quad (\text{A.4})$$

donde h se expresa en $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$, T en $^{\circ}\text{C}$, y w en %, y cuyos coeficientes son los que muestra la Tab. A.3.

De una forma análoga, se puede invertir la ecuación de la presión de vapor para dicha formulación. Esta, se calcula con un procedimiento de dos pasos. Primero se calcula el punto de condensación, T_d como:

$$T_d = \sum_{i=0}^2 \sum_{j=0}^3 A_{ij} (w - 40)^j T^i, \quad (\text{A.5})$$

donde las temperaturas se miden en $^{\circ}\text{C}$ y la fracción másica en %. Con la correlación de [McNeely \(1979\)](#) se puede calcular la presión de vapor:

$$\log(p) = k_0 + \frac{k_1}{(T_d + 273,15)} + \frac{k_2}{(T_d + 273,15)^2}, \quad (\text{A.6})$$

donde la presión se expresa en mbar. Los coeficientes de ambas ecuaciones se muestran en la Tab. A.4.

La Eq. A.6 es invertible haciendo el cambio de variable $T_d^* = 1/(T_d + 273,15)$, ya que la ecuación resultante es una ecuación de segundo grado. En esta inversión se obtiene la función $T_d(p)$. Como la Eq. A.5 es un polinomio de segundo grado en temperaturas también se puede invertir analíticamente obteniendo $T(T_d, w)$. Esta última, es la temperatura de cambio de fase que se empleará en el modelo de la bomba de calor.

Tabla A.3: Coeficientes de la entalpía específica para el bromuro de litio ([Kaita, 2001](#))

i	A_i	B_i	D_i
0	3,462023	$1,3499 \cdot 10^{-3}$	162,81
1	$-2,679895 \cdot 10^{-2}$	$-6,55 \cdot 10^{-6}$	-6,0418
2			$-4,5348 \cdot 10^{-3}$
3			$1,2053 \cdot 10^{-3}$

Tabla A.4: Coeficientes de la presión de vapor para el bromuro de litio ([Kaita, 2001](#))

j	A_{0j}	A_{1j}	A_{2j}	k_j
0	$-9,133128 \cdot 10^0$	$9,439697 \cdot 10^{-1}$	$-7,324352 \cdot 10^{-5}$	7,05
1	$-4,759724 \cdot 10^{-1}$	$-2,882015 \cdot 10^{-3}$	$-1,556533 \cdot 10^{-5}$	-1603,54
2	$-5,638171 \cdot 10^{-2}$	$-1,345453 \cdot 10^{-5}$	$1,992657 \cdot 10^{-6}$	-104095,5
3	$1,108418 \cdot 10^{-3}$	$5,852133 \cdot 10^{-7}$	$-3,924205 \cdot 10^{-83}$	

A.5. Modelica.Media

La librería Modelica.Media (Casella et al., 2006), incluida en la MSL, proporciona una interfaz estandarizada para modelos de medios fluidos y algunos modelos de medios basados en ella. Un modelo de un medio define la formulación empleada para las variables termodinámicas intensivas usadas en los balances de masa y energía. Además, opcionalmente se pueden añadir otras propiedades como las de transporte, e.g. viscosidad dinámica, conductividad térmica, difusividad, etc., o de superficie, e.g. tensión superficial, empleadas en esta tesis. Los modelos de medios son clasificados como de una o varias sustancias y de una o varias fases.

La librería proporciona un marco adecuado para un cálculo eficiente de las propiedades en modelos dinámicos de sistemas fluidos. La formulación de las propiedades queda encapsulada y mediante una interfaz del modelo del medio se pueden extraer las variables necesarias para el cálculo de la dinámica de los sistemas termodinámicos. Así, es posible desacoplar el cálculo de las propiedades con las ecuaciones de los balances. Las propiedades termodinámicas del agua de mar y del bromuro de litio en disolución fueron implementadas en Modelica heredando de esta interfaz. Como variables independientes se impusieron p , h y w .

Además, en la librería se facilitan cerca de 1250 modelos de medios que pueden ser utilizados directamente. Entre ellos destaca el paquete Modelica.Media.Water, que siguiendo la formulación del estándar IAPWS-IF97, hace posible el modelado de sistemas ya sea con agua líquida o vapor y situaciones de cambios de fase. Este medio permite elegir entre tres pares de variables independientes: pT , ph y ρT . Este modelo ha sido utilizado en los capítulos 5 y 6.

Apéndice B

Trabajos de instrumentación de la bomba de calor de doble efecto

B.1. Introducción

En las bombas de calor con la tecnología de absorción, los flujos internos determinan su estabilidad de una forma crítica. Es por ello, por lo que el control de los mismos se hace tan importante. Además, las propiedades termodinámicas del fluido absorbente determinan el rendimiento del ciclo. Conocer el valor de los flujos internos y de sus propiedades termodinámicas ayuda a comprender mejor los procesos que se dan en el interior de la bomba.

La DEAHP instalada en la Plataforma Solar de Almería está instrumentada con una gran cantidad de sensores, tanto en su interior como en sus conexiones en el exterior (Alarcón-Padilla, 2007). En el trabajo de Roca et al. (2010) se advirtió de la necesidad de la instalación de caudalímetros para los flujos internos. Esto permitiría el desarrollo de un modelo dinámico basado en ecuaciones de balances de masa y energía de sus contenedores y el posterior diseño de un sistema de control avanzado. En 2014, en el marco del proyecto POWER (subproyecto “Estrategias de modelado y control para una desaladora solar híbrida”) se instalaron dichos caudalímetros. Los trabajos realizados para esta instrumentación han formado parte de la tesis.

B.2. Instalación de la instrumentación

La nueva instrumentación adquirida fue:

- Tres caudalímetros másicos tipo coriolis para las tres principales conexiones entre A0, G2 y G1. Estos, además de medir flujo másico, miden temperatura y densidad con lo que se puede determinar el estado termodinámico del fluido que pasa por ellos.

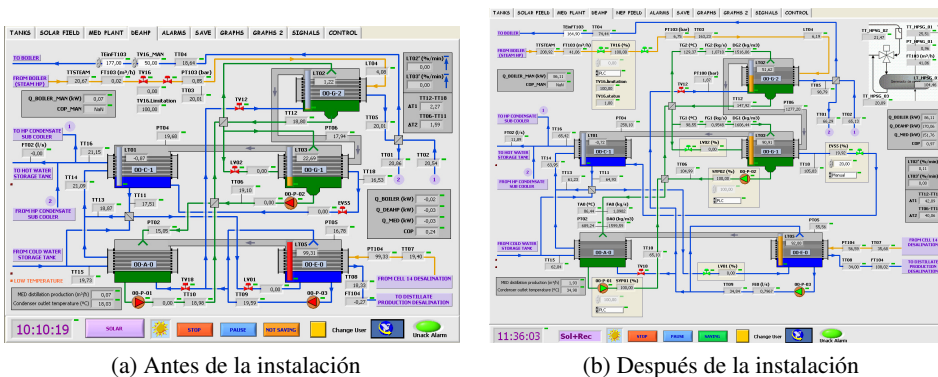


Figura B.1: Sistema de supervisión, control y adquisición de datos

- Un caudalímetro de agua tipo vortex para la línea de rociado de agua en E0.
- Una válvula automática para regular el flujo que pasa por la línea de rociado de agua en E0.

El esquema escogido para su instalación consistió en situar los tres caudalímetros másicos a la entrada de los contenedores A0, G2 y G1 y tras su paso por los intercambiadores HX1 y HX2. El caudalímetro de agua se situó tras la bomba *P-03*, y la válvula en la misma línea de agua tras la derivación de la tubería con la válvula *TV18*. En la Fig. B.1 se muestra el sistema de supervisión, control y adquisición de datos antes y después de la incorporación de estos sensores. Como medida de prevención y para asegurar un espacio de tubería recta por delante y por detrás de cada uno de los caudalímetros, se decidió que estos se instalarían con un sistema de *bypass* por si comprometían la circulación.

Adicionalmente, para asegurar que el volumen de los nuevos tramos de tubería que se situaban en la parte inferior de la bomba no afectarían al nivel de los depósitos, se compró disolución de bromuro de litio para rellenar esas tuberías. Se compraron 25 kg de disolución de bromuro de litio (60%) y los aditivos necesarios para que las propiedades de la disolución del interior de la bomba no se vieses afectadas. La mezcla final, que coincidía con la original de la DEAHF fue una disolución de LiBr al 54% con 750 mg/L de LiNO₃, 0.005 N de LiOH y 100 ppm de 2-etil 1-hexanol.

El procedimiento seguido para acometer dicha instalación fue el siguiente. Por una de las válvulas con mayor cota se introdujo aire en el interior de la bomba. Una vez que las presiones exterior e interior se igualaron, se abrió la válvula de menor cota a la que se le había conectado una goma hasta un depósito situado bajo la bomba de calor (v. Fig. B.2a). La diferencia de elevaciones hizo que todo el líquido, agua y disolución de bromuro de litio, cayese al depósito. En este proceso se advirtió de la gran cantidad de partículas de óxido tenía la disolución (v. Fig. B.2b), ya que originalmente la disolución es transparente. Se instalaron los *bypass*, los caudalímetros y la válvula (v. Fig. B.2d-



(a) Preparación del depósito



(b) Extracción de la disolución de bromuro de litio



(c) Precipitado de las partículas



(d) Instalación de los caudalímetros



(e) Vista general de los cuadralímetros



(f) Válvula automática

Figura B.2: Instalación de los caudalímetros (I)

B.2f). Se hizo el vacío de la bomba conectando con una goma a una de las válvulas de la DEAHF (v. Fig. B.3b) y el sistema de vacío de la planta MED. Se introdujo agua destilada en el interior de la bomba mediante la succión de un depósito situado en su parte inferior aprovechando la diferencia de presiones entre el interior y el exterior. Con el agua destilada se probaron los caudalímetros y la válvula, además de arrastrar todas las



(a) Estado de corrosión de las tuberías



(b) Vaciado la DEAHP



(c) Estado final de la disolución



(d) Preparación de la mezcla



(e) Vertido de la mezcla en el depósito



(f) Posos de partículas de óxido

Figura B.3: Instalación de los caudalímetros (II)

partículas de óxido que aún quedasen adherida a las tuberías. Se detectaron problemas en el sistema de apertura de la válvula, motivo por el cual tuvo que desinstalarse. Se extrajo el agua y se volvió a hacer el vaciado de la bomba. Se preparó la mezcla del nuevo volumen de disolución (v. Fig. B.3d) y se mezcló con el del depósito (v. Fig. B.3e). Finalmente se volvió a introducir la disolución de bromuro de litio en el interior mediante

el sistema de succión, procurando no reintroducir las partículas de óxido al sistema (v. Fig. B.3f).

Durante el periodo que duró este proceso (aproximadamente cinco meses), se observó que la disolución pasó de ser marrón por la gran concentración de partículas de óxido en suspensión (v. Fig. B.2b), a transparente por el precipitado de las partículas (v. Fig. B.2c), a finalmente azul posiblemente por la acción de la corrosión del depósito donde se encontraba almacenado (v. Fig. B.3c).

B.3. Consideraciones sobre los datos experimentales

A priori, los tres caudalímetros máscos permiten determinar el estado de los flujos de la disolución de bromuro de litio entre A0-G2, G2-G1 y G1-A0, ya que proporcionan medidas de flujos máscico (FG2i, FG1i y FA0i), temperaturas (TG2i, TG1i y TA0i) y densidades (DG2i, DG1i y DA0i). Sin embargo, el análisis de las medidas de la campaña experimental revela que dichas medidas están comprometidas. Si analizamos las concentraciones, una medida indirecta función de temperatura y densidad, se puede observar que éstas no se comportan como cabría esperar. En la Fig. B.4 se puede observar que la disolución de bromuro de litio está menos concentrada a la entrada de A0 que a la entrada de G1. Esto significaría que en G1 se está absorbiendo vapor de agua, cosa que resulta imposible ya que se observa condensación tanto en C1 como en el interior de los tubos de G1. Este error no es explicable desde el punto de vista de la propagación de la incertidumbre en medidas indirectas. Esta incertidumbre se calcula como:

$$\Delta w = \left| \frac{\partial w}{\partial T} \right| \Delta T + \left| \frac{\partial w}{\partial \rho} \right| \Delta \rho, \quad (\text{B.1})$$

donde $\Delta T = \pm 0,5 \pm 0,005T$ K (la T medida en °C) y $\Delta \rho = \pm 10$ kg/m³. En la Fig. B.4 también se han añadido estas incertidumbres, cuyo valor ronda los $5 \cdot 10^{-3}$. Se puede observar que aunque existen puntos donde hay un pequeño solapamiento de incertidumbres, este no es lo suficiente como para dar por válidas las medidas. Las temperaturas medidas sí se encuentran dentro de los márgenes esperados para ellas. Algo, que no puede asegurarse con los valores de los flujos máscicos medidos, ya que estos, no pueden estimarse de una forma directa.

Lo más probable es que la causa que corrompe la medida esté en la propia disolución. Los caudalímetros han sido intercambiados obteniendo valores similares en ambas posiciones y han sido probados con agua destilada obteniendo medidas dentro del rango esperado. Cuando se extrajo la disolución de bromuro de litio, se observó la gran cantidad de partículas de óxido en suspensión que había. Aunque se trató de eliminar mediante decantación, inevitablemente parte de este óxido volvió a introducirse. Los caudalímetros instalados son de tipo coriolis, y aunque por lo general aceptan bastante bien las partículas en suspensión en el líquido, una gran acumulación de ellas puede interferir en las medidas.

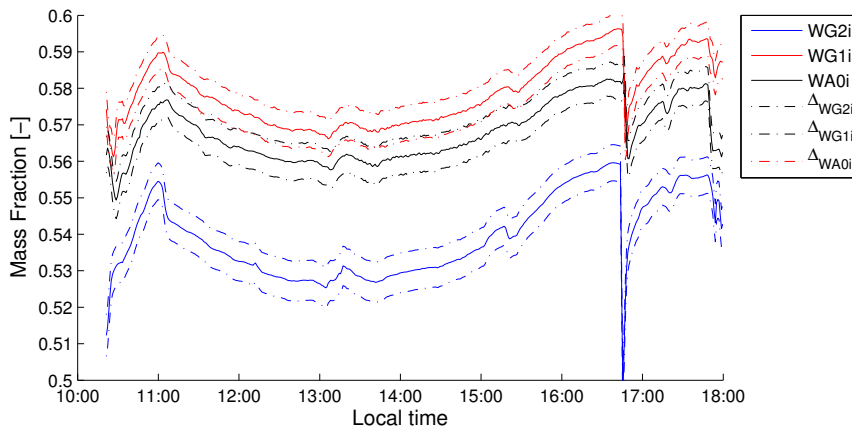


Figura B.4: Fracciones másicas medidas el 26-05-2014

Otros sensores cuyas medidas no son las esperadas son los termopares Tcw1 y Tcw2. Mientras que los termopares que capturan la temperatura del agua de refrigeración a la entrada y a la salida de la bomba, Tcwi y Tcwo, obtienen directamente su medida en el líquido los otros lo hacen con un termopozo metálico. Este, protege el termopar y evita fugas en la tubería pero apantalla su medida. La diferencia de respuesta entre los primeros y los segundos frente a un escalón de temperaturas es de aproximadamente 10 min en tiempo y de 0.5 °C en su valor estacionario. Esto hace inviable capturar la respuesta dinámica del absorbedor, y difícil la respuesta estacionaria ya que 0.5 °C suponen aproximadamente un 25% del valor del escalón de temperaturas entre la entrada y la salida del absorbedor en condiciones nominales.

Bibliografía

- AGRAFIOTIS, C. C., PAGKOURA, C., LORENTZOU, S., KOSTOGLU, M. y KONS-TANDOPOULOS, A. G. Hydrogen production in solar reactors. *Catalysis Today*, vol. 127, páginas 265–277, 2007.
- AGUILAR, J. *Curso de Termodinámica*. Alhambra Universidad, Madrid, 2001. ISBN 84-205-1382-2.
- ALARCÓN-PADILLA, D. C. *Acoplamiento de una bomba de calor de absorción con doble efecto a un sistema de desalación: Aplicación a la destilación solar*. Tesis Doctoral, Universidad de La Laguna, 2007.
- ALARCÓN-PADILLA, D. C., BLANCO-GÁLVEZ, J., GARCÍA-RODRÍGUEZ, L., GERNJAK, W. y MALATO, S. First experimental results of a new hybrid solar/gas multi-effect distillation system: the AQUASOL project. *Desalination*, vol. 220(1-3), páginas 619–625, 2008.
- ALARCÓN-PADILLA, D. C. y GARCÍA-RODRÍGUEZ, L. Application of absorption heat pumps to multi-effect distillation: a case study of solar desalination. *Desalination*, vol. 212(1-3), páginas 294–302, 2007.
- ALARCÓN-PADILLA, D. C., GARCÍA-RODRÍGUEZ, L. y BLANCO-GÁLVEZ, J. Experimental assessment of connection of an absorption heat pump to a multi-effect distillation unit. *Desalination*, vol. 250(2), páginas 500–505, 2010.
- ALI, M. T., FATH, H. E. y ARMSTRONG, P. R. A comprehensive techno-economical review of indirect solar desalination. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 15(8), páginas 4187–4199, 2011.
- ANAND, S., GUPTA, A. y TYAGI, S. K. Simulation studies of refrigeration cycles: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 17, páginas 260–277, 2013.
- ANDBERG, J. W. *Absorption of vapors into liquid films flowing over horizontal tubes*. Tesis Doctoral, University of Texas at Austin, 1986.
- BALLESTRÍN, J. y MONTERREAL, R. Hybrid heat flux measurement system for solar central receiver evaluation. *Energy*, vol. 29(5-6), páginas 915–924, 2004.

- BELHOMME, B., PITZ-PAAL, R., SCHWARZBÖZL, P. y ULMER, S. A new fast ray tracing tool for high-precision simulation of heliostat fields. *Journal of Solar Energy Engineering*, vol. 131, página 31002, 2009.
- BLANCO-MURIEL, M., ALARCÓN-PADILLA, D. C., LÓPEZ-MORATALLA, T. y LARA-COIRA, M. Computing the solar vector. *Solar Energy*, vol. 70, páginas 431–441, 2001.
- BONILLA, J., ÁLVAREZ, J. D., ROCA, L., DE LA CALLE, A., YEBRA, L. J. y RODRÍGUEZ, F. Intercambio de Modelos entre Herramientas de Simulación con Functional Mock-up Interface (FMI). En *Proc. XXXIV Jornadas de Automática*, 04200, páginas 1–7. Terrassa, Barcelona, Spain, 2013a.
- BONILLA, J., DORMIDO, S. y CELLIER, F. E. Switching moving boundary models for two-phase flow evaporators and condensers. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, vol. 20(3), páginas 743–768, 2015.
- BONILLA, J., YEBRA, L. J. y DORMIDO, S. Chattering in dynamic mathematical two-phase flow models. *Applied Mathematical Modelling*, vol. 36(5), páginas 2067–2081, 2012a.
- BONILLA, J., YEBRA, L. J., DORMIDO, S. y ZARZA, E. Parabolic-trough solar thermal power plant simulation scheme, multi-objective genetic algorithm calibration and validation. *Solar Energy*, vol. 86(1), páginas 531–540, 2012b.
- BONILLA, J., YEBRA, L. J., DORMIDO, S. y ZARZA, E. *Modeling and simulation of two-phase flow evaporators for parabolic-trough solar thermal power plants*. Colección Documentos CIEMAT, Madrid, 2013b.
- BRENAN, K. E., CAMPBELL, S. L. y PETZOLD, L. R. *Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1995.
- BRITISH PETROLEUM. BP statistical review of world energy. Informe técnico, 2014.
- BROWN, P., HINDMARSH, A. C. y PETZOLD, L. R. Using Krylov Methods in the Solution of Large-Scale Differential-Algebraic Systems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 15(6), páginas 1467–1488, 1994.
- DE LA CALLE, A., BONILLA, J., ROCA, L. y PALENZUELA, P. Dynamic modeling and performance of the first cell of a multi-effect distillation plant. *Applied Thermal Engineering*, vol. 70, páginas 410–420, 2014.
- DE LA CALLE, A., CELLIER, F. E., YEBRA, L. y DORMIDO, S. Improvements in BondLib, the Modelica Bond Graph Library. En *Proc. 8th EUROSIM Congress on Modelling and Simulation*, páginas 282 – 287. IEEE, Cardiff, United Kingdom, 2013a.

- DE LA CALLE, A., ROCA, L., YEBRA, L. J. y DORMIDO, S. Modeling of a two-step solar hydrogen production plant. *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 37(14), páginas 10549 – 10556, 2012.
- DE LA CALLE, A., YEBRA, L. J. y DORMIDO, S. Dynamic Modeling and Simulation Study of Falling Film Evaporation and Condensation. En *Proc. 8th EUROSIM Congress on Modelling and Simulation*, páginas 427 – 432. IEEE, Cardiff, United Kingdom, 2013b.
- CAMPBELL, C. J. y LAHERRÈRE, J. H. The End of Cheap Oil. *Scientific American*, vol. 278, páginas 78–83, 1998.
- CASELLA, F., OTTER, M., PROELSS, K., RICHTER, C. y TUMMESCHEIT, H. The Modelica Fluid and Media library for modeling of incompressible and compressible thermo-fluid pipe networks. En *Proc. 5th International Modelica Conference*, páginas 631–640. Vienna, Austria, 2006.
- ÇENGEL, Y. A. y GHAJAR, A. J. *Heat and Mass Transfer: Fundamentals and Applications*. McGraw-Hill Higher Education, 4 edición, 2011. ISBN 0073398128.
- CELLIER, F. E. *Continuous System Modeling*. Springer-Verlag New York, Inc., Secaucus, NJ, USA, 1991. ISBN 0-387-97502-0.
- CELLIER, F. E. y ELMQVIST, H. Automated formula manipulation supports object-oriented continuous-system modeling. *IEEE Control Systems*, vol. 13(2), páginas 28–38, 1993.
- CELLIER, F. E. y KOFMAN, E. *Continuous System Simulation*. Springer-Verlag New York, Inc., Secaucus, NJ, USA, 2006. ISBN 0-387-26102-8.
- CHATO, J. C. Laminar condensation inside horizontal and inclined tubes. *ASHRAE Journal*, vol. 4, páginas 52–60, 1962.
- CHUA, H., TOH, H. y MALEK, A. Improved thermodynamic property fields of LiBr-H₂O solution. *International Journal of Refrigeration*, vol. 23, 2000.
- CHURCHILL, S. W. y CHU, H. H. S. Correlating equations for laminar and turbulent free convection from a horizontal cylinder. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 18(9), páginas 1049–1053, 1975.
- COLLIER, J. G. y THOME, J. R. *Convective Boiling and Condensation*. Oxford University Press, 3 edición, 1994. ISBN 0198562969.
- CONN, A., SCHEINBERG, K. y VICENTE, L. *Introduction to Derivative-Free Optimization*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2009.
- DASSAULT SYSTEMES. Dymola 2015 - Dynamic Modeling Laboratory. 2014.

- DHIR, V. y LIENHARD, J. Laminar Film Condensation on Plane and Axisymmetric Bodies in Nonuniform Gravity. *Journal of Heat Transfer*, vol. 93(1), páginas 97–100, 1971.
- DIGUILIO, R. M., LEE, R., JETER, S. y TEJA, A. Properties of Lithium Bromide-Water Solutions at High Temperatures and Concentrations I: Thermal Conductivity. En *ASHRAE Transactions*, páginas 702–708. 1990.
- DIGUILIO, R. M. y TEJA, A. S. Thermal Conductivity of Aqueous Salt Solutions at High Temperatures and High Concentrations. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, (1951), páginas 1081–1085, 1992.
- DITTUS, F. W. y BOELTER, L. M. K. Heat transfer in automobile radiators of the tubular Type. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, vol. 12, páginas 3–22, 1985.
- EL-NASHAR, A. M. Predicting part load performance of small MED evaporators-a simple simulation program and its experimental verification. *Desalination*, vol. 130, páginas 217–234, 2000a.
- EL-NASHAR, A. M. Validating the performance simulation program SOLDES using data from an operating solar desalination plant. *Desalination*, vol. 130, páginas 235–253, 2000b.
- ELMQVIST, H. *A Structured Model Language for Large Continuous Systems*. Tesis Doctoral, Department of Automatic Control, Lund Institute of Technology, Lund, Sweden, 1978.
- ELMQVIST, H. y OTTER, M. Methods for tearing systems of equations in object-oriented modeling. En *Proc. the European Simulation Multiconference*, vol. 2, páginas 326–332. Barcelona, Spain, 1994.
- EUROPEAN COMMISSION. EUROPE 2020. Informe técnico, 2013.
- EVOLA, G., LE PIERRÈS, N., BOUDEHENN, F. y PAPILLON, P. Proposal and validation of a model for the dynamic simulation of a solar-assisted single-stage LiBr/water absorption chiller. *International Journal of Refrigeration*, vol. 36(3), páginas 1015–1028, 2013.
- FERNÁNDEZ-GARCÍA, A., ZARZA, E., VALENZUELA, L. y PÉREZ, M. Parabolic-trough solar collectors and their applications. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 14, páginas 1695–1721, 2010.
- FERNÁNDEZ-IZQUIERDO, P., GARCÍA-RODRÍGUEZ, L., ALARCÓN-PADILLA, D. C., VALENZUELA, P. y MARTÍN-MATEOS, I. Experimental analysis of a multi-effect distillation unit operated out of nominal conditions. *Desalination*, vol. 284, páginas 233–237, 2012.

- FERNÁNDEZ-SEARA, J. y PARDIÑAS, A. A. Refrigerant falling film evaporation review: Description, fluid dynamics and heat transfer. *Applied Thermal Engineering*, vol. 64(1-2), páginas 155–171, 2014.
- FEUERECKER, G., SCHARFE, J., GREITER, I., FRANK, C. y ALEFELD, G. Measurement of thermophysical properties of aqueous LiBr-solutions at high temperatures and concentrations. En *Proc. International Absorption Heat Pump Conference*, páginas 493–499. 1994.
- FRANKE, R., CASELLA, F., OTTER, M., SIELEMANN, M., ELMQVIST, H., MATSON, S. y OLSSON, H. Stream Connectors - An Extension of Modelica for Device-Oriented Modeling of Convective Transport Phenomena. En *Proc. 7th International Modelica Conference*, páginas 108–121. Como, Italy, 2009.
- FRITZSON, P. *Principles of object-oriented modeling and simulation with Modelica 2.1*. Wiley-IEEE Press, 2004. ISBN 9780471471639.
- FU, D., PONCIA, G. y LU, Z. Implementation of an object-oriented dynamic modeling library for absorption refrigeration systems. *Applied Thermal Engineering*, vol. 26(2-3), páginas 217–225, 2006.
- FUNK, J. E. Thermochemical hydrogen production: past and present. *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 26(3), páginas 185–190, 2001.
- GARCIA, P., FERRIERE, A. y BEZIAN, J. J. Codes for solar flux calculation dedicated to central receiver system applications: A comparative review. *Solar Energy*, vol. 82(3), páginas 189–197, 2008.
- HABERT, M. *Falling film evaporation on a tube bundle with plain and enhanced tubes*. Tesis Doctoral, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Switzerland, 2009.
- HABERT, M. y THOME, J. R. Falling-Film Evaporation on Tube Bundle with Plain and Enhanced Tubes - Part II: New Prediction Methods. *Experimental Heat Transfer*, vol. 23(4), páginas 281–297, 2010.
- HEROLD, K., RADERMACHER, R. y KLEIN, S. A. *Absorption Chillers and Heat Pumps*. CRC Press, 1 edición, 1996.
- HONGESOMBUT, K., MITANI, Y. y TSUJI, K. An incorporated use of genetic algorithm and a Modelica library for simultaneous tuning of power system stabilizers. En *Proc. 2nd International Modelica Conference*, páginas 89–98. Oberpfaffenhofen, Germany, 2002.
- IAPWS. Release on the IAPWS, Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam. Informe técnico, Erlangen, Germany, 1997.

- IAPWS. Release on the IAPWS Formulation 2008 for the Thermodynamic Properties of Seawater. Informe Técnico September, Berlin, Germany, 2008.
- IAPWS. Advisory Note No. 5: Industrial Calculation of the Thermodynamic Properties of Seawater. 2013.
- IBARRA, M., ALARCÓN-PADILLA, D. C., BLANCO-GÁLVEZ, J., ZARAGOZA, G. y PALENZUELA, P. Performance Of Small Parabolic Through Collector As Thermal Energy Supply To Steam Generation. En *Proc. SolarPACES Conference*, página 24997. Marrakech, Morocco, 2012.
- IEA. World Energy Outlook 2006. Informe técnico, International Energy Agency, Paris, France, 2006.
- IEA. World Energy Outlook 2010. Informe técnico, International Energy Agency, Paris, France, 2010.
- IEA. World Energy Outlook 2014. Informe técnico, International Energy Agency, Paris, France, 2014.
- INCROPERA, F. P., BERGMAN, T. L., DEWITT, D. P. y LAVINE, A. S. *Principles of heat and mass transfer*. John Wiley & Sons, Hoboken, NJ, USA, 7 edición, 2012. ISBN 9780470646151.
- IPCC. IPCC First Assessment Report. Informe técnico, Intergovernmental Panel on Climate Change, 1990.
- ISHIDA, K. y MORI, Y. H. Surface tension of aqueous lithium bromide solutions containing 1-octanol as a heat-transfer additive. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, vol. 23(7), páginas 907–915, 1996.
- JEONG, S., KANG, B. y KARNG, S. Dynamic simulation of an absorption heat pump for recovering low grade waste heat. *Applied Thermal Engineering*, vol. 18(1-2), páginas 1–12, 1998. ISSN 13594311.
- JETER, S. M., MORAN, J. P. y TEJA, A. S. Properties of lithium bromide-water solutions at high temperatures and concentrations-part III: specific heat. En *ASHRAE Transactions*, vol. 98, páginas 137–149. 1992.
- JIAN, S., LIN, F. y SHIGANG, Z. Performance calculation of single effect absorption heat pump using LiBr + LiNO₃ + H₂O as working fluid. *Applied Thermal Engineering*, vol. 30(17-18), páginas 2680–2684, 2010.
- JOO, H.-J. y KWAK, H.-Y. Performance evaluation of multi-effect distiller for optimized solar thermal desalination. *Applied Thermal Engineering*, vol. 61(2), páginas 491–499, 2013.

- JUN, Y. D., KIM, K. J. y KENNEDY, J. M. Dynamic surface tension of heat transfer additives suitable for use in steam condensers and absorbers. *International Journal of Refrigeration*, vol. 33(2), páginas 428–434, 2010.
- KAITA, Y. Thermodynamic properties of lithium bromide-water solutions at high temperatures. *International Journal of Refrigeration*, vol. 24(5), páginas 374–390, 2001.
- KALOGIROU, S. Seawater desalination using renewable energy sources. *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 31(3), páginas 242–281, 2005.
- KASHIWAGI, T. The activity of surfactant in high-performance absorber and absorption enhancement. *Reito*, vol. 60, páginas 72–79, 1985.
- KILLION, J. D. y GARIMELLA, S. A critical review of models of coupled heat and mass transfer in falling-film absorption. *International Journal of Refrigeration*, vol. 24, 2001.
- KIM, D. y INFANTE FERREIRA, C. A Gibbs energy equation for LiBr aqueous solutions. *International Journal of Refrigeration*, vol. 29(1), páginas 36–46, 2006.
- KIM, K. J., BERMAN, N. S. y WOOD, B. D. Surface tension of aqueous lithium bromide + 2-ethyl-1-hexanol. *Journal of Chemical & Engineering Data*, vol. 39(1), páginas 122–124, 1994.
- KIM, Y.-D., THU, K., MYAT, A. y NG, K. C. Numerical simulation of solar-assisted multi-effect distillation (SMED) desalination systems. *Desalination and Water Treatment*, vol. 51(4-6), páginas 1242–1253, 2013.
- KISHORE, G., NISAN, S., DARDOU, S., ADAK, A. K., SRIVASTAVA, V. K. y TEWARI, P. K. Development of a dynamic simulator (INFMED) for the MED/VC plant. *Desalination and Water Treatment*, vol. 21(1-3), páginas 364–374, 2010.
- KODAMA, T. y GOKON, N. Thermochemical cycles for high-temperature solar hydrogen production. *Chemical reviews*, vol. 107(10), páginas 4048–77, 2007.
- KOHLNBACH, P. y ZIEGLER, F. A dynamic simulation model for transient absorption chiller performance. Part I: The model. *International Journal of Refrigeration*, vol. 31(2), páginas 217–225, 2008a.
- KOHLNBACH, P. y ZIEGLER, F. A dynamic simulation model for transient absorption chiller performance. Part II: Numerical results and experimental verification. *International Journal of Refrigeration*, vol. 31(2), páginas 226–233, 2008b.
- KOUHIKAMALI, R. Thermodynamic analysis of feed water pre-heaters in multiple effect distillation systems. *Applied Thermal Engineering*, vol. 50(1), páginas 1157–1163, 2013.

- KREITH, F. *The CRC handbook of thermal engineering*. Springer, 2000. ISBN 9780849395819.
- KRON, G. *Diakoptics - The Piecewise Solution of Large-scale Systems*. MacDonald & Co, London, United Kingdom, 1962.
- KULANKARA, S. y HEROLD, K. Surface tension of aqueous lithium bromide with heat/mass transfer enhancement additives: the effect of additive vapor transport. *International Journal of Refrigeration*, vol. 25(3), páginas 383–389, 2002.
- KUNICK, M., KRETZSCHMAR, H.-J. y GAMPE, U. Fast Calculation of Thermodynamic Properties of Water and Steam in Process Modelling using Spline Interpolation. En *Proc. ICPWS XV*, página 5. Berlin, Germany, 2008.
- LEARY, P. y HANKINS, J. Users guide for MIRVAL: a computer code for comparing designs of heliostat-receiver optics for central receiver solar power plants. Informe técnico, SAND77-8280, 1979.
- LEE, R., DIGUILIO, R. M., JETER, S. y TEJA, A. Properties of Lithium Bromide-Water Solutions at High Temperatures and Concentrations II: Density and Viscosity. En *ASHRAE Transactions*, páginas 709–714. 1990.
- LENARD, J. L. Y., JETER, S. M. y TEJA, A. S. Properties of lithium bromide-water solutions at high temperatures and concentrations-part IV: vapor pressure. En *ASHRAE Transactions*, vol. 98, páginas 167–172. 1992.
- LI, C., GOSWAMI, Y. y STEFANAKOS, E. Solar assisted sea water desalination: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 19, páginas 136–163, 2013.
- LI, P., QIAO, H., LI, Y., SEEM, J. E., WINKLER, J. y LI, X. Recent advances in dynamic modeling of HVAC equipment. Part 1: Equipment modeling. *HVAC&R Research*, vol. 20(1), páginas 136–149, 2014.
- LIENHARD IV, J. H. y LIENHARD V, J. H. *A Heat Transfer Textbook*, vol. 82. Phlogiston Press, Cambridge, Massachusetts, U.S.A., 3 edición, 2004. ISBN 9788776814328.
- MACKENZIE, J. J. Oil as a finite resource. *Nonrenewable Resources*, vol. 7(2), páginas 97–100, 1998.
- MAZINI, M. T., YAZDIZADEH, A. y RAMEZANI, M. H. Dynamic modeling of multi-effect desalination with thermal vapor compressor plant. *Desalination*, vol. 353, páginas 98–108, 2014.
- MCNEELY, L. A. Thermodynamic properties of aqueous solutions of Lithium Bromide. *ASHRAE Transactions*, vol. 85(1), páginas 413–434, 1979.

- MITROVIC, J. Influence of tube spacing and flow rate on heat transfer from a horizontal tube to a falling liquid film. En *Proc. 8th International Heat Transfer Conference*. San Francisco, CA, 1986.
- MIYAGAWA, K. y HILL, P. G. Rapid and Accurate Calculation of Water and Steam Properties Using the Tabular Taylor Series Expansion Method. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 123(3), página 707, 2001.
- MODELICA ASSOCIATION. Modelica Specification 2.2.1. 2007.
- MODELICA ASSOCIATION. Modelica Specification 3.3. 2014.
- MODELISAR. Functional Mockup Interface (FMI). 2014.
- MYAT, A., THU, K., KIM, Y.-D., CHAKRABORTY, A., CHUN, W. G. y NG, K. C. A second law analysis and entropy generation minimization of an absorption chiller. *Applied Thermal Engineering*, vol. 31(14-15), páginas 2405–2413, 2011.
- NEISES, M., ROEB, M., SCHMU, M., SATTLER, C. y PITZ-PAAL, R. Kinetic investigations of the hydrogen production step of a thermochemical cycle using mixed iron oxides coated on ceramic substrates. *International Journal of Energy Research*, vol. 34, páginas 651–661, 2010.
- OLSSON, H., OTTER, M., MATTSSON, S. E. y ELMQVIST, H. Balanced Models in Modelica 3.0 for Increased Model Quality. En *Proc. 6th International Modelica Conference*, páginas 21–33. Bielefeld, Germany, 2008.
- OTTER, M. y ELMQVIST, H. Modelica. Language, Libraries, Tools, Workshop and EU-Project RealSim. Informe técnico, Modelica Association, 2001.
- OTTER, M., ELMQVIST, H. y CELLIER, F. E. Relaxing A Symbolic Sparse Matrix Method Exploiting the Model Structure in Generating Efficient Simulation Code. En *IMACS MultiConference on Computational Engineering in Systems Applications*, páginas 1–12. Proc. Symp. Modelling, Analysis, and Simulation, CESA'96, IMACS MultiConference on Computational Engineering in Systems Applications, Lille, France, vol.1, pp.1-12., 1996.
- PALENZUELA, P., ALARCÓN-PADILLA, D. C., BLANCO-GÁLVEZ, J., GUILLÉN, E., IBARRA, M. y ZARAGOZA, G. Modeling of the heat transfer of a solar multi-effect distillation plant at the Plataforma Solar de Almería. *Desalination and Water Treatment*, vol. 31(1-3), páginas 257–268, 2011.
- PALENZUELA, P., ALARCÓN-PADILLA, D. C., ZARAGOZA, G., BLANCO-GÁLVEZ, J. y IBARRA, M. Parametric equations for the variables of a steady-state model of a multi-effect desalination plant. *Desalination and Water Treatment*, vol. 51(4-6), páginas 1229–1241, 2013a.

- PALENZUELA, P., ROCA, L., ZARAGOZA, G., ALARCÓN-PADILLA, D., GARCÍA, L. y DE LA CALLE, A. Operational improvements to increase the efficiency of an absorption heat pump connected to a Multi-Effect Distillation unit. *Applied Thermal Engineering*, vol. 63(1), páginas 84–96, 2014.
- PALENZUELA, P., ZARAGOZA, G., ALARCÓN-PADILLA, D. C. y BLANCO, J. Evaluation of cooling technologies of concentrated solar power plants and their combination with desalination in the mediterranean area. *Applied Thermal Engineering*, vol. 50(2), páginas 1514–1521, 2013b.
- PANTELIDES, C. The consistent initialization of differential-algebraic systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computation*, vol. 9(2), páginas 213–231, 1988.
- PARK, S. B., LEE, J. W., LEE, H. y BAEK, Y. S. Surface Tensions and Thermal Conductivities of Aqueous LiBr-Based Solutions Containing n-Octanol and 2-Ethyl-1-Hexanol: Application to an Absorption Heat Pump. *International Journal of Thermophysics*, vol. 22(2), páginas 445–458, 2001.
- PÁTEK, J. y KLOMFAR, J. A computationally effective formulation of the thermodynamic properties of LiBr-H₂O solutions from 273 to 500K over full composition range. *International Journal of Refrigeration*, vol. 29(4), páginas 566–578, 2006a.
- PÁTEK, J. y KLOMFAR, J. Solid-liquid phase equilibrium in the systems of LiBr-H₂O and LiCl-H₂O. *Fluid phase equilibria*, vol. 250, páginas 138–149, 2006b.
- PATTERSON, M. y PEREZ-BLANCO, H. Numerical fits of the properties of lithium-bromide water solutions. *ASHRAE Transactions*, vol. 94(2), páginas 2379–88, 1988.
- PETZOLD, L. R. A description of DASSL: a Differential/Algebraic System Solver. *Scientific Computing*, páginas 65–68, 1983.
- PFEIFFER, A. Optimization Library for Interactive Multi-Criteria Optimization Tasks. En *Proc. 9th International Modelica Conference*, páginas 669–680. Munich, Germany, 2012.
- PREGGER, T., GRAF, D., KREWITT, W., SATTLER, C., ROEB, M. y MÖLLER, S. Prospects of solar thermal hydrogen production processes. *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 34, páginas 4256–4267, 2009.
- QIBLAWEY, H. M. y BANAT, F. Solar thermal desalination technologies. *Desalination*, vol. 220(1-3), páginas 633–644, 2008.
- RAE. Diccionario de la Real Academia Española. 2015.
- REN21. Renewables, global status report 2010. Informe técnico, Renewable Energy Policy Network for the 21 Century, 2010.

- RIBATSKI, G. y JACOBI, A. M. Falling-film evaporation on horizontal tubes—a critical review. *International Journal of Refrigeration*, vol. 28(5), páginas 635–653, 2005.
- RIBATSKI, G. y THOME, J. R. Experimental study on the onset of local dryout in an evaporating falling film on horizontal plain tubes. *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol. 31(6), páginas 483–493, 2007.
- ROCA, L., BERENGUEL, M., YEBRA, L. J. y GUZMÁN, J. L. *Aportaciones al modelado y control de una planta de desalación con energía solar*. Editorial CIEMAT, 2010. ISBN 978-84-7834-649-3.
- ROCA, L., DE LA CALLE, A. y YEBRA, L. J. Heliostat-field gain-scheduling control applied to a two-step solar hydrogen production plant. *Applied Energy*, vol. 103, páginas 298–305, 2013.
- ROCA, L., DIAZ-FRANCO, R., DE LA CALLE, A., BONILLA, J. y VIDAL, A. A control based on a knapsack problem for solar hydrogen production. *Optimal Control Applications and Methods*, 2014.
- ROCA, L., YEBRA, L. J., BERENGUEL, M. y ALARCÓN-PADILLA, D. C. Modeling of a Solar Seawater Desalination Plant for Automatic Operation Purposes. *Journal of Solar Energy Engineering*, vol. 130(4), páginas 041009–1–041009–8, 2008.
- ROCA, L., YEBRA, L. J., BERENGUEL, M. y DE LA CALLE, A. Dynamic modeling and simulation of a multi-effect distillation plant. En *Proc. 9th International Modelling Conference*, páginas 883–888. Munich, Germany, 2012.
- RODRÍGUEZ, J. A., RUIZ, J. J. y URIETA, J. S. *Termodinámica química*. Editorial Síntesis, Madrid, 2000. ISBN 84-7738-581-5.
- ROEB, M., NEISES, M., SÄCK, J. P., RIETBROCK, P., MONNERIE, N., DERSCH, J., SCHMITZ, M. y SATTTLER, C. Operational strategy of a two-step thermochemical process for solar hydrogen production. *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 34(10), páginas 4537–4545, 2009.
- ROEB, M., SÄCK, J.-P., RIETBROCK, P., PRAHL, C., SCHREIBER, H., NEISES, M., DE OLIVEIRA, L., GRAF, D., EBERT, M., REINALTER, W., MEYER-GRÜNEFELDT, M., SATTTLER, C., LOPEZ, A., VIDAL, A., ELSBERG, A., STOBBE, P., JONES, D., STEELE, A., LORENTZOU, S., PAGKOURA, C., ZYGOGIANNI, A., AGRAFIOTIS, C. y KONSTANDOPOULOS, A. G. Test operation of a 100 kW pilot plant for solar hydrogen production from water on a solar tower. *Solar Energy*, vol. 85, páginas 634–644, 2011.
- ROGERS, J., GOINDI, S. y LAMARI, M. Turbulent falling film flow and heat transfer on horizontal tube. En *Proc. of the National Heat Transfer Conference*, páginas 3–12. Portland, 1995.

- ROHSENOW, W. H. A method of correlating heat-transfer data for surface boiling of liquids. *Transactions of ASME*, vol. 74, página 969, 1952.
- ROMERO-ALVAREZ, M. y ZARZA, E. Concentrating Solar Thermal Power. En *Handbook of Energy Efficiency And Renewable Energy*, capítulo 21, páginas 1–98. CRC Press, 2007. ISBN 978-0849317309.
- SÄCK, J.-P., ROEB, M., SATTLER, C., PITZ-PAAL, R. y HEINZEL, A. Development of a system model for a hydrogen production process on a solar tower. *Solar Energy*, 2011.
- SERNAS, V. Heat transfer correlation for subcooled water films on horizontal tubes. *Journal of Heat Transfer*, vol. 101, páginas 176–178, 1979.
- SERPONE, N., LAWLESS, D. y TERZIAN, R. Solar fuels: Status and perspectives. *Solar Energy*, vol. 49(4), páginas 221–234, 1992.
- SHAH, R. K. y SEKULIC, D. P. *Fundamentals of Heat Exchanger Design*. Wiley, 2003. ISBN 978-0-471-32171-2.
- SHARQAWY, M., LIENHARD, J. H. y ZUBAIR, S. M. Thermophysical properties of seawater: A review of existing correlations and data. *Desalination and Water Treatment*, vol. 16(10), páginas 354–380, 2010.
- SHIN, Y., SEO, J. A., CHO, H. W., NAM, S. C. y JEONG, J. H. Simulation of dynamics and control of a double-effect LiBr-H₂O absorption chiller. *Applied Thermal Engineering*, vol. 29(13), páginas 2718–2725, 2009.
- SPAKOVSKY, Z. S. *Unified: Thermodynamics and Propulsion*. 2014.
- STEINFELD, A. Solar thermochemical production of hydrogen—a review. *Solar Energy*, vol. 78, páginas 603–615, 2005.
- STEWART, D. V. *System Analysis and Management: Structure, Strategy and Design*. Petrocelli Books, Inc., 1981.
- SUN, J., FU, L. y ZHANG, S. A review of working fluids of absorption cycles. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 16(4), páginas 1899–1906, 2012.
- TARJAN, R. E. Depth First Search and Linear Graph Algorithms. *SIAM Journal on Computing*, vol. 1, páginas 146–160, 1972.
- THOME, J. R. *Engineering Databook III*. Wolverine Tube Inc., 2004.
- THU, K., KIM, Y.-D., AMY, G., CHUN, W. G. y NG, K. C. A synergetic hybridization of adsorption cycle with the multi-effect distillation (MED). *Applied Thermal Engineering*, vol. 62(1), páginas 245–255, 2014. ISSN 13594311.

- UNFCCC. Kyoto protocol to the United Nations framework Convention on Climate Change. Informe técnico, United Nations framework Convention on Climate Change, 1998.
- URQUÍA, A. *Modelado Orientado a Objetos y Simulación de Sistemas Híbridos en el ámbito del Control de Procesos Químicos*. Tesis Doctoral, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Spain, 2000.
- VDI. *VDI Heat Atlas*, vol. 2010. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2 edición, 2010. ISBN 9783540778769.
- WAGNER, W. y PRUSS, A. The IAPWS formulation 1995 for the thermodynamic properties of ordinary water substance for general and scientific use. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, vol. 31(2), 2002.
- WANG, K., ABDELAZIZ, O., KISARI, P. y VINEYARD, E. A. State-of-the-art review on crystallization control technologies for water/LiBr absorption heat pumps. *International Journal of Refrigeration*, vol. 34(6), páginas 1325–1337, 2011.
- WANG, X.-D., AN, B., DUAN, Y.-Y., WANG, Z.-X. y LEE, D.-J. Efficient and accurate computation scheme of p-T thermodynamic properties of water and steam. *J Taiwan Inst Chem Eng*, vol. 43(6), páginas 845–851, 2012.
- WANG, X.-D., WANG, Z.-X., DUAN, Y.-Y., AN, B. y LEE, D.-J. Efficient evaluation of thermodynamic properties of water and steam on p-h surface. *J Taiwan Inst Chem Eng*, vol. 45(2), páginas 372–379, 2013.
- WIMBY, J. M. y BERNTSSON, T. S. Viscosity and density of aqueous solutions of lithium bromide, lithium chloride, zinc bromide, calcium chloride and lithium nitrate. 1. Single salt solutions. *Journal of Chemical & Engineering Data*, vol. 39(1), páginas 68–72, 1994.
- YAO, W., BJURSTOM, H. y SETTEWALL, F. Surface tension of lithium bromide solution with heat-transfer additives. *Journal of Chemical & Engineering Data*, vol. 36(27), páginas 96–99, 1991.
- YUAN, Z. y HEROLD, K. Surface tension of pure water and aqueous lithium bromide with 2-ethyl-hexanol. 2001.
- YUAN, Z. y HEROLD, K. Thermodynamic Properties of Aqueous Lithium Bromide Using a Multiproperty Free Energy Correlation. *HVAC&R Research*, vol. 11(3), páginas 377–393, 2005.
- YUNG, D., GANIC, E. N. y LORENZ, J. J. Vapor/liquid interaction and entrainment in falling film evaporators. *Journal of heat transfer*, vol. 102(1), páginas 20–25, 1980.

*I feel like an old railroad man,
getting on board at the end of an age.
The station's empty and the whistle blows.
Things are faster now
and this train is just too slow,
and i know i can walk along the tracks.
It may take a little longer but i'll know
how to find my way back.¹*

Eels

(Letra de Mark Oliver Everett)

¹trad.: Me siento como el viejo hombre del ferrocarril, subiendo a bordo del final de una era. La estación está vacía y el silbato sopla. Las cosas son más rápidas ahora y este tren es un poco lento, y sé que puedo andar sobre las vías. Puede que me lleve un poco más de tiempo pero sabré como encontrar mi camino de vuelta.

