

MANIPULACIÓN DEL PROGRAMA REFPROP PARA LA EVALUACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS PARA LA MEDICIÓN DE FLUJO DE FLUIDOS

Roberto Arias
Centro Nacional de Metrología
Dirección de Flujo y Volumen
rarias@cenam.mx
442-2110571

Resumen: Se describen las características del programa informático REFPROP, para la evaluación de múltiples propiedades termodinámicas, y de transporte, de sustancias puras o mezclas; se incluyen también recomendaciones para su uso, a partir de la operación de programas intermediarios como Microsoft Excel, Matlab, Python o R. Especial consideración se otorga al tratamiento de la humedad en las mezclas de gases, en particular para la evaluación de las propiedades de transporte.

1. INTRODUCCIÓN

El programa informático REFPROP [1] fue desarrollado por el National Institute of Standards and Technology (NIST), y es una herramienta de suma utilidad para evaluar numéricamente las propiedades termodinámicas y de transporte de sustancias puras, o mezclas de ellas. La programación de la herramienta de cálculo fue desarrollada como una Librería de Enlace Dinámico (DLL por sus siglas en inglés) y puede ser manipulada desde diversos recursos informáticos como: Microsoft Excel, Matlab, LabView, Python, entre otros.

Las propiedades que pueden ser evaluadas incluyen: densidad, viscosidad, constante crítica (C^*), velocidad de propagación del sonido, factor de compresibilidad, coeficiente de Joule Thompson, coeficientes viriales, energía de Helmholtz, energía de Gibbs, entre otras. Las regiones termodinámicas que se incluyen corresponden a líquido subenfriado, región de saturación, líneas de saturación y región de gas sobrecalentado.

En particular, REFPROP es propicio para evaluar las propiedades termodinámicas del gas natural; usando para este propósito las ecuaciones de estado propuestas en el Reporte No. 8 de la Asociación Americana del Gas (AGA R8, por sus siglas en inglés) [2], o bien en el proyecto GERG-2008 (European Gas Research Group) [3]. La DLL desarrollada por el NIST posee la cualidad de recibir la composición química de la mezcla de gases, en términos de concentración en masa o en concentración molar; puede ser manipulada también desde el programa libre de cálculo matemático y estadístico R, a través del uso de librerías que

vinculan a R con Python. La conveniencia del uso de R estriba en la disponibilidad de herramientas para la generación y manejo de números aleatorios provenientes de diversas funciones de distribución de probabilidad, indispensables para la implementación de cálculo de incertidumbre por el método de Simulación por Monte Carlo.

2. ENLACES CON APLICACIONES INFORMATICAS

La evaluación de propiedades termodinámicas y de transporte con REFPROP puede realizarse desde una aplicación auto-ejecutable elaborada por el NIST, o bien desde diversos programas comerciales o libres; siempre usando los algoritmos incluidos en la Librería de Enlace Dinámico (DLL), Refprop.dll.

La forma más común de usar REFPROP es desde Microsoft Excel, a través de la instalación de un programa complementario (add-in); este programa, escrito en Visual Basic, incluye las instrucciones para llamar y ejecutar las funciones de cálculo definidas en la DLL. Una vez instalado el complemento (Refprop Add-in), las funciones de cálculo se habilitan adentro del sub-menú de funciones definidas por el usuario

Para algunas versiones de Microsoft Excel es necesario la declaración de una variable de sistema para lograr que las funciones de REFPROP se ejecuten en cualquier hoja de cálculo. El programa complementario, escrito en Visual Basic debe modificarse manualmente cuando se desee cambiar de una ecuación de estado a otra.

Las funciones de cálculo de REFPROP también pueden ejecutarse con programas como Matlab,

Labview, Perl, Linux o Python; siendo esta estrategia muy conveniente en sistemas de adquisición y/o procesamiento de datos; de hecho, en el portal del NIST es posible encontrar algunos ejemplos de programación para usar REFPROP desde cualquiera de dichos programas de cómputo.

3. USO DE REFPROP A TRAVÉS DE R

El programa de cómputo R [4] es ampliamente usado por la comunidad científica, como una excelente herramienta de cálculo, de análisis de datos y de generación de imágenes gráficas. El uso de este programa es de acceso libre, y la disponibilidad de recursos es muy grande, a través de los paquetes de cómputo desarrollados en forma altruista por la comunidad científica mundial.

Universidades de gran prestigio como La Universidad de California (Berkeley), El Instituto Nacional de Ciencias de Cómputo (NICS), La Universidad Tecnológica de Michigan, La Universidad Estatal de Iowa, El Colegio Imperial (Reino Unido), La Universidad de Bristol, La Universidad de Melbourne, la Universidad de Sao Paulo, La Universidad de la Plata, La Universidad Católica de Chile, El Instituto Tecnológico Autónomo de México (ITAM), entre muchas otras universidades del mundo entero, mantienen disponibles servidores de acceso abierto para poner a disposición los recursos informáticos y de cálculo de R. REFPROP no puede ser empleado de forma directa desde R; sin embargo, la ejecución de las funciones de REFPROP se puede realizar en Python y comunicados sus resultados a R a través de una interfase entre Python y R. El código siguiente ilustra este mecanismo de trabajo,

```
library(rPython)
setwd("C:/Program Files/refprop")
python.load("refprop.py")
python.call("ini")
elem <- c("nitrogen","carbondioxide","methane")
den<-rep(0,10000)
denn<-rep(0,10000)
for(i in 1:10000){
c1<-rnorm(1,0.0072,3.67e-5)
.....
c6<-rnorm(1,0.0202,1.031e-4)
c7<-rnorm(1,0.0058,2.96e-5)
Comps<- c(c1,c2,c3,c4,c5,c6,c7)
FluidName <- python.call("FluidString", Comps,
elem)
```

```
den[i]<-python.call("Density", FluidName, InpCode,
Units,rnorm(1,298.71,0.23),runif(1,1.755,1.855))
denn[i]<-den[i]+rnorm(1,0,0.001*den[i]/1.96)}
```

el paquete rPython funciona para establecer una comunicación bidireccional entre Python y R; refprop.py es un programa en lenguaje Python que contiene las instrucciones para manipular la librería de enlace dinámico (dll) Refprop. El histograma que se muestra en la fig. 2 corresponde a la representación gráfica de la distribución de probabilidad para la densidad de un gas natural, obtenida a partir de la ejecución del código expresado en los párrafos anteriores.

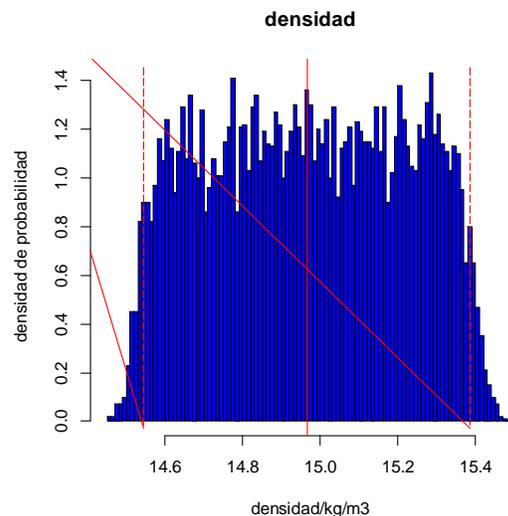


Fig. 2 Histograma correspondiente a la densidad de un gas natural a 25.6 °C y 1.8 MPa.

REFERENCIAS

- [1] NIST Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties Database (REFPROP): Version 9.1; <http://www.nist.gov/srd/nist23.cfm>
- [2] AGA R8; "Compressibility Factor of Natural Gas and Related Hydrocarbon Gases", American Gas Association, 1994.
- [3] O. Kunz and W. Wagner, "The GERG 2008 Wide-Range Equation of State for Natural Gases and Other Mixtures: An Expansion of GERG-2004; *J. Chem. Eng. Data*, 2012, 57 (11), pp 3032–3091
- [4] R, "The R Project for Statistical Computing", <https://www.r-project.org/>