

# **CALCULA 6.0 y PUYUSPA 6.0**

El sistema psicro: una calculadora psicrométrica  
y su interfaz gráfica web

Manual del usuario

Diego Saravia Alía  
`dsa@unsa.edu.ar`

Profesor. Depto. de Física. Fac. de Ciencias Exactas.  
Universidad Nacional de Salta. Argentina  
ORCID: [0000-0002-1868-0409](https://orcid.org/0000-0002-1868-0409)

Copyright © 1992–2026 Diego Saravia Alía.  
Documento universalmente gratuito, libre y copyleft bajo la GNU FDL, versión 1.2 o superior.  
<http://www.gnu.org/licenses/>

Versión 6.0, septiembre de 2026

## Resumen

Calcula resuelve sistemas de ecuaciones: dados tantos datos como grados de libertad tiene un sistema, halla las demás variables con el método de Newton sobre la GNU Scientific Library. Su sistema *psicro* es una calculadora psicrométrica: dados tres datos que definen el estado del aire húmedo, calcula todas sus propiedades con cuatro modelos a elección (ASHRAE RP-1485, TEOS-10, el histórico de Hyland y Wexler y el gas ideal), que reproducen las tablas de la ASHRAE. Calcula trae además otros sistemas, y su módulo dinámico permite que cada persona agregue los suyos escribiendo variables y ecuaciones en un archivo de texto, sin programar. Puyuspa es la interfaz web: una página por sistema; la del sistema psicro calcula puntos, dibuja la carta psicrométrica en SVG, permite anotarla y la exporta a SVG, DXF de AutoCAD y gnuplot. Hasta la versión 5.0 el programa se llamaba Psicro y solo resolvía el aire húmedo. Este manual reúne, actualizados, los manuales de la versión 4.0 (manual de uso, fundamentos, termodinámica del aire húmedo y propagación de errores) y documenta Calcula 6.0 y Puyuspa 6.0. Calcula es software libre bajo la licencia GPL 3.0 o superior, y Puyuspa bajo la AGPL 3.0 o superior.

# Índice general

|           |                                                                |           |
|-----------|----------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>I</b>  | <b>Calcula 6.0 y el sistema psico</b>                          | <b>6</b>  |
| <b>1.</b> | <b>Introducción</b>                                            | <b>7</b>  |
| 1.1.      | Qué puede hacer . . . . .                                      | 7         |
| 1.2.      | Novedades de la versión 6.0 . . . . .                          | 8         |
| 1.3.      | Novedades de la versión 5.0 . . . . .                          | 8         |
| 1.4.      | Historia . . . . .                                             | 9         |
| 1.5.      | Enfoque de software libre . . . . .                            | 9         |
| 1.6.      | Cómo contactar al autor . . . . .                              | 9         |
| <b>2.</b> | <b>Calcula 6.0: Psico como un sistema</b>                      | <b>10</b> |
| 2.1.      | Sistemas y módulos . . . . .                                   | 10        |
| 2.2.      | Uso en consola . . . . .                                       | 10        |
| 2.3.      | Agregar sistemas propios con el módulo dinámico . . . . .      | 11        |
| 2.4.      | Puyuspa 6.0 . . . . .                                          | 11        |
| 2.5.      | Paquetes y licencias . . . . .                                 | 12        |
| <b>3.</b> | <b>Instalación</b>                                             | <b>13</b> |
| 3.1.      | Requerimientos . . . . .                                       | 13        |
| 3.2.      | Con el paquete Debian/Ubuntu . . . . .                         | 13        |
| 3.3.      | Desde las fuentes . . . . .                                    | 13        |
| 3.4.      | Archivos . . . . .                                             | 14        |
| <b>4.</b> | <b>Variables</b>                                               | <b>15</b> |
| <b>5.</b> | <b>Uso en consola</b>                                          | <b>17</b> |
| 5.1.      | Invocación . . . . .                                           | 17        |
| 5.2.      | Configuración . . . . .                                        | 18        |
| 5.3.      | Modo máquina para integradores . . . . .                       | 18        |
| 5.3.1.    | Sensibilidades locales para integradores . . . . .             | 19        |
| 5.4.      | El lenguaje de entrada . . . . .                               | 19        |
| 5.4.1.    | Sistema . . . . .                                              | 19        |
| 5.4.2.    | Comandos generales . . . . .                                   | 20        |
| 5.4.3.    | Comandos del módulo psico: la base de los resultados . . . . . | 20        |
| 5.4.4.    | Datos . . . . .                                                | 20        |
| 5.4.5.    | Comentarios . . . . .                                          | 20        |
| 5.5.      | La salida . . . . .                                            | 20        |
| 5.6.      | Ejemplos . . . . .                                             | 21        |
| 5.7.      | Errores y código de salida . . . . .                           | 21        |
| <b>6.</b> | <b>Módulos</b>                                                 | <b>22</b> |
| 6.1.      | El módulo dinámico . . . . .                                   | 22        |

|                                                                           |           |
|---------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>7. La biblioteca de rutinas</b>                                        | <b>27</b> |
| 7.1. Funciones de propiedades . . . . .                                   | 27        |
| 7.2. Sistema de ecuaciones y solver . . . . .                             | 27        |
| <b>8. Fundamentos</b>                                                     | <b>29</b> |
| 8.1. La presión y la altura . . . . .                                     | 29        |
| 8.2. El modelo . . . . .                                                  | 29        |
| <b>9. Termodinámica del aire húmedo</b>                                   | <b>31</b> |
| 9.1. Gases de un componente . . . . .                                     | 31        |
| 9.1.1. Comportamiento isotérmico . . . . .                                | 31        |
| 9.1.2. El experimento de Joule . . . . .                                  | 31        |
| 9.1.3. La función de Helmholtz . . . . .                                  | 32        |
| 9.2. Gases de dos componentes . . . . .                                   | 32        |
| 9.3. El aire húmedo . . . . .                                             | 33        |
| 9.4. Potenciales químicos del agua con aire disuelto . . . . .            | 33        |
| 9.5. Equilibrio agua-aire . . . . .                                       | 33        |
| 9.6. Datos numéricos . . . . .                                            | 34        |
| 9.6.1. Escalas y unidades . . . . .                                       | 34        |
| 9.6.2. Los coeficientes viriales . . . . .                                | 34        |
| 9.6.3. Entalpías y entropías a presión cero . . . . .                     | 34        |
| 9.6.4. Presión de vapor del agua pura . . . . .                           | 35        |
| 9.6.5. Solubilidad del aire en agua y volumen del agua . . . . .          | 36        |
| 9.6.6. La formulación ASHRAE RP-1485 . . . . .                            | 36        |
| 9.6.7. El modelo de gas ideal de la ASHRAE . . . . .                      | 37        |
| 9.6.8. TEOS-10 y el aire sobre agua de mar . . . . .                      | 38        |
| 9.7. Forma exacta y forma aproximada . . . . .                            | 39        |
| <b>10.Exactitud de las fórmulas</b>                                       | <b>40</b> |
| 10.1. Contraste contra datos experimentales . . . . .                     | 40        |
| <b>11.Propagación de errores en la medición de humedad</b>                | <b>44</b> |
| 11.1. Introducción . . . . .                                              | 44        |
| 11.2. Las fuentes del error . . . . .                                     | 44        |
| 11.2.1. La temperatura: medición y error . . . . .                        | 44        |
| 11.2.2. Errores en la temperatura termodinámica de bulbo húmedo . . . . . | 45        |
| 11.2.3. La presión atmosférica: medición, estimación y error . . . . .    | 45        |
| 11.2.4. El error en la presión de vapor . . . . .                         | 45        |
| 11.2.5. El error en la humedad de saturación . . . . .                    | 45        |
| 11.2.6. Errores en la entalpía . . . . .                                  | 45        |
| 11.3. Errores en la determinación de humedad . . . . .                    | 46        |
| 11.4. Conclusiones . . . . .                                              | 46        |
| <b>II Puyuspa 6.0</b>                                                     | <b>48</b> |
| <b>12.Introducción a Puyuspa</b>                                          | <b>49</b> |
| <b>13.Cálculo de un punto</b>                                             | <b>50</b> |
| <b>14.La carta psicrométrica</b>                                          | <b>51</b> |
| 14.1. Clic para calcular . . . . .                                        | 51        |

|                                              |           |
|----------------------------------------------|-----------|
| <b>15.Dibujar sobre la carta</b>             | <b>52</b> |
| <b>16.Exportar la carta</b>                  | <b>53</b> |
| <b>17.Las páginas de los demás sistemas</b>  | <b>54</b> |
| <b>18.Instalación de Puyuspa</b>             | <b>56</b> |
| 18.1. Con el paquete . . . . .               | 56        |
| 18.2. Sin Apache . . . . .                   | 56        |
| 18.3. Cómo funciona . . . . .                | 56        |
| <b>19.Limitaciones y problemas conocidos</b> | <b>57</b> |
| <b>A. Licencias</b>                          | <b>58</b> |

# Índice de cuadros

|                                                                               |    |
|-------------------------------------------------------------------------------|----|
| 4.1. Variables del módulo psicro. . . . .                                     | 15 |
| 10.1. Comprobación de $f_s$ . . . . .                                         | 41 |
| 10.2. Comprobación de la presión de vapor y la humedad de saturación. . . . . | 41 |
| 10.3. Comprobación del volumen. . . . .                                       | 41 |
| 10.4. Comprobación de la entalpía. . . . .                                    | 41 |
| 10.5. Comprobación de la entropía. . . . .                                    | 42 |
| 11.1. Cálculo de errores. . . . .                                             | 47 |
| 11.2. Cálculo de errores con Psicro. . . . .                                  | 47 |
| 11.3. Errores en la medición de $W$ . . . . .                                 | 47 |

## Parte I

# Calcula 6.0 y el sistema psicro

# Capítulo 1

## Introducción

CALCULA resuelve sistemas de ecuaciones. Su sistema PSICRO realiza cálculos psicrométricos, con una biblioteca de rutinas que está disponible para usarla en otros programas. Está escrito en C.

Las funciones del aire húmedo se calculan con gran exactitud y reproducen con mucha aproximación las tablas de la ASHRAE [1]. El capítulo 10 presenta la comparación.

### 1.1. Qué puede hacer

- Calcular las propiedades del aire húmedo dadas tres variables, con el sistema **psicro**. Con tres variables independientes se define un punto en el sistema psicrométrico. El sistema verifica la independencia con respecto a la base  $(t, x, p)$  calculando el determinante del Jacobiano de las tres variables con respecto a esa base, y rechaza las ternas que no determinan un estado.
- Calcular, para cada punto, sus estados asociados: de rocío, de bulbo húmedo y de saturación, y las magnitudes derivadas: presión atmosférica, temperatura de hervor, humedad relativa, grado de saturación y humedad absoluta en distintas bases.
- Mostrar la matriz de derivadas parciales del punto respecto de la base  $(t, x, p)$ .
- Resolver otros sistemas (un péndulo, un circuito eléctrico) y los que cada persona agregue con el módulo dinámico, escribiendo sus variables y ecuaciones en un archivo de texto (capítulo 2).
- Actuar como filtro: leer una secuencia de puntos de su entrada estándar y emitir una línea de resultados por punto, para encadenarlo con otros programas. Como toda la salida es texto plano, se crea un archivo de resultados ASCII redirigiéndola (`calcula -s psicro < datos > resultados.txt`) o se imprime en una impresora de texto (`calcula -s psicro datos | lpr`).
- Producir salida en HTML, para la interfaz web.
- A través de Puyuspa (parte II): dibujar la carta psicrométrica para una altura y rangos de temperatura y humedad dados, marcar puntos y anotar sobre ella, ingresar datos con el ratón, y exportar la carta a SVG, DXF y gnuplot; y calcular y graficar los demás sistemas.

Calcula está desarrollado en C utilizando la biblioteca científica GNU (GSL), y es software libre, copyleft, bajo la licencia GPL 3.0 o superior.

## 1.2. Novedades de la versión 6.0

- El programa se llama **calcula** y resuelve *sistemas*: **psicro** (el aire húmedo, que hasta la 5.0 era todo el programa), **pendulo**, **pendulo-dinamico**, **circuito-carga**, **circuito-bobinas**, **circuito-rlc** y **circuito-tabla**, y los que agregue cada usuario. Cada sistema es un archivo **.sis** que dice qué módulo usa (capítulo 2).
- No hay sistema por defecto: se nombra con **-s** o con **%sistema;; calcula --sistemas** los lista.
- El módulo dinámico permite agregar sistemas propios sin programar (sección 2.3).
- Nombres nuevos: bibliotecas **libcalcula-modulo**, variables de entorno **calcula\_opción**, configuración **~/calcula** y **/etc/calcula.conf**, paquete Debian **calcula**.
- Puyuspa 6.0 en <https://www.psicro.org/puyuspa/>, con una página por sistema y gráficos configurables (parte II).
- Calcula pasa a la licencia GPL 3.0 o superior; Puyuspa sigue bajo la AGPL.

## 1.3. Novedades de la versión 5.0

- Arquitectura modular. El programa **psicro** es un intérprete de un lenguaje de entrada; las ecuaciones de cada sistema físico están en un *módulo* que se carga en tiempo de ejecución (**dlopen**). Se incluyen los módulos **psicro** (aire húmedo, por defecto), **pendulo** y, desde la 5.0-14, **modulodinamico**, que toma las variables y las ecuaciones de un archivo de texto y las evalúa con ExprTk, sin compilar nada; véase el capítulo 6.
- Nuevo lenguaje de entrada, con punto y coma como separador entre módulo, comandos y datos (la 4.0 usaba dos puntos). Capítulo 5.
- Bases de presentación de resultados operativas: por kg de aire seco, por kg de mezcla, por mol de mezcla y por m<sup>3</sup> de mezcla.
- Modelo de propiedades ASHRAE RP-1485 (Herrmann, Kretzschmar y Gatley 2009) por defecto desde la 5.0-9: coeficientes viriales actuales, factor de corrección completo, volumen de gas real y entalpía y entropía con la referencia ASHRAE ( $h = s = 0$  para el aire seco a 0 °C y 101325 Pa). El modelo histórico (Hyland y Wexler 1983 y Brochure 1977) sigue disponible con **--hw**, y desde la 5.0-11 hay un tercer modelo, el de gas ideal del *ASHRAE Handbook*, con **--ideal**, y desde la 5.0-12 un cuarto, TEOS-10 (biblioteca SIA, Feistel y otros 2010) con **--teos10**, que además satura el aire sobre agua de mar de la salinidad que se indique con **--sal**. Secciones 9.6.6, 9.6.7 y 9.6.8.
- Factor de corrección  $f_s$  de la presión de vapor en la mezcla reincorporado (5.0-8), presión de vapor IAPWS (5.0-7), temperaturas en ITS-90 (5.0-6) y bulbo húmedo con la ecuación exacta (5.0-5).
- Corrección del solver en la humedad relativa: el punto histórico  $t_{bh} = 20$ ,  $w_r = 0,6$ ,  $alt = 0$  ahora converge. Un punto sin solución se informa como error y el proceso termina con código distinto de cero, en lugar de imprimir números inválidos. Sección 7.2.
- Opción **--debug** y trazas configurables.
- Paquetes Debian/Ubuntu para el programa y para Puyuspa.

- Modelo histórico: recuperado el término virial de la entalpía, que un resto de depuración anulaba (5.0-10); el aire seco a 0 °C da  $h = 0$  también con `--hw`. Sección 10.
- Batería de regresión de 1747 casos por modelo, cuatro modelos.

## 1.4. Historia

**Psicro 1.0 (1992–1996)** QuickBasic 4.0, en MS-DOS.

**Psicro 2.0** QuickBasic 4.0. Registrado en Argentina. Funcionaba exclusivamente en DOS puro; motor de soluciones bidimensional y específico, muy limitado.

**Psicro 3.0 (2000)** Reescrito en C bajo GNU/Linux, licencia GPL.

**Psicro 4.0 (2008)** Licencia AGPL 3 o superior. Motor de búsqueda general y multidimensional con GSL: itera sobre tres variables e incluye el par presión y altura. Dos interfaces: línea de comandos y navegador (CGI en Perl). Programa filtro, en la filosofía Unix.

**Psicro 5.0 (2016–2026)** Modular, con módulos cargados en tiempo de ejecución, nuevo lenguaje de entrada y Puyuspa 5.0 con la carta en SVG. La 5.0-15 es la última versión con este nombre.

**Calcula 6.0 (desde 2026)** El intérprete de la 5.0 con nombre propio, que resuelve sistemas de ecuaciones cualesquiera; psicro es su sistema del aire húmedo, y el módulo dinámico permite agregar sistemas nuevos. Licencia GPL 3 o superior. Capítulo 2.

## 1.5. Enfoque de software libre

No había, a la fecha del desarrollo de la 4.0, a nivel mundial, un sistema enmarcado en el software libre con código abierto que resolviera sistemas psicométricos. Los programas disponibles eran cerrados y con precios fluctuantes entre los 60 y los 1000 dólares. Esto es arbitrario dado que las ecuaciones fundamentales han sido publicadas, son de libre disponibilidad y sus autores no parecen estar involucrados en la distribución de ese software. El verdadero esfuerzo para la construcción de estos sistemas es la medición y el desarrollo teórico, siendo la programación una tarea absolutamente dependiente de la anterior. Igual situación se da en otros sistemas fisicoquímicos. La irrupción de la filosofía de la FSF y el proyecto GNU, con sistemas operativos como GNU/Linux y las herramientas de desarrollo GNU, permite realizar este trabajo.

Herramientas de desarrollo: GNU/Linux, gcc, gdb, Subversion, automake, autoconf, libtool, bison, flex, gfortran, bash, GSL, readline, perl, Apache, D3, gnuplot.

## 1.6. Cómo contactar al autor

**Dirección postal:** Diego Saravia Alía. Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Salta. Avda. Bolivia 5150. 4400 Salta. República Argentina.

**Correo electrónico:** [dsa@unsa.edu.ar](mailto:dsa@unsa.edu.ar)

**ORCID:** <https://orcid.org/0000-0002-1868-0409>

**Sitio web:** <http://www.psicro.org>

## Capítulo 2

# Calcula 6.0: Psicro como un sistema

Este capítulo presenta Calcula 6.0 y lo que cambió respecto de Psicro 5.0. Para el aire húmedo, las variables, los modelos de propiedades, el lenguaje de entrada, la salida y las fórmulas son los mismos; cambian el nombre del programa, la forma de indicar qué se resuelve y la interfaz web.

### 2.1. Sistemas y módulos

Calcula resuelve sistemas de ecuaciones: dados tantos datos como grados de libertad tiene un sistema, halla las demás variables con el método de Newton sobre la GSL. Un *sistema* es lo que la persona nombra: el aire húmedo, un péndulo, un circuito. Cada sistema corre en un *módulo*, una biblioteca `libcalcula-modulo.so` que sabe evaluar sus ecuaciones.

**psicro** El sistema del aire húmedo. Es exclusivamente eso: un sistema en particular, con sus ecuaciones compiladas en el módulo del mismo nombre. Hasta la 5.0, *Psicro* era además el nombre del programa; desde la 6.0 el programa es Calcula.

**pendulo** El péndulo simple, también con su módulo compilado.

**pendulo-dinamico, circuito-carga, circuito-bobinas, circuito-rlc, circuito-tabla** Sistemas escritos en archivos de texto y resueltos por el módulo dinámico (sección 6.1).

Cada sistema se describe en un archivo `nombre.sis` con líneas `clave = valor`:

|                      |                                                                |
|----------------------|----------------------------------------------------------------|
| <code>titulo</code>  | <code>= Dos capacitores en paralelo con una resistencia</code> |
| <code>modulo</code>  | <code>= modulodinamico</code>                                  |
| <code>archivo</code> | <code>= circuito-carga.din</code>                              |
| <code>datos</code>   | <code>= r=10,c1=1,c2=2,v1=4,v2=4</code>                        |

Solo `modulo` es obligatoria; `archivo` es el `.din` de un sistema del módulo dinámico y `datos` un juego de datos de ejemplo. El nombre del sistema es el del archivo y lleva solo minúsculas, cifras y guiones, porque sirve igual en la consola, como nombre de archivo y en la dirección de su página web.

### 2.2. Uso en consola

El programa es `calcula`. No hay sistema por defecto: se nombra con `-s` o con `%sistema`; al comienzo de la línea de datos, y si falta, Calcula lo avisa, lista los sistemas disponibles y muestra la ayuda.

```

calcula --sistemas
calcula -s psicro -p 't=25,wr=.5,alt=0'
calcula -p '%psicro;html Ba;t=30,wr=1,alt=0'
calcula -s circuito-carga -p 'r=10,c1=1,c2=2,v1=4,v2=4'

```

Quien use casi siempre el aire húmedo puede poner `sistema=psicro` en `~/calcula`. El resto de las opciones de la 5.0 sigue igual, con los nombres nuevos: las variables de entorno pasan de `psicro_opción` a `calcula_opción` (`calcula_teos10`, `calcula_hw...`) y la configuración de `~/psicro` a `~/calcula`.

## 2.3. Agregar sistemas propios con el módulo dinámico

El módulo dinámico es lo que abre Calcula a otros problemas: con él, cada persona puede agregar sus propios sistemas de ecuaciones sin programar ni compilar nada. Basta con dos archivos de texto en `~/local/share/calcula/sistemas`: el `.din` con las variables y las ecuaciones (su formato está en la sección 6.1) y el `.sis` que le da nombre. Por ejemplo, la caída libre desde el reposo, `caida.din`:

```

constantes
  g = 9.80665
variables
  h = 10 [m]      # altura de caída
  t = 1.4 [s]     # tiempo de caída
  v = 14 [m/s]    # velocidad al llegar
ecuaciones
  h = g*t^2/2
  v = g*t

```

y `caida.sis`:

```

titulo  = Caída libre
modulo  = modulodinamico
archivo = caida.din
datos   = h=10

```

Desde ese momento el sistema existe: aparece en `calcula --sistemas` y `calcula -s caida -p h=10` da  $t = 1,428$  s y  $v = 14,00$  m/s; con `t=2` da la altura y la velocidad. Como con cualquier sistema, cualquier variable puede ser dato. Los sistemas se buscan primero en `$CALCULA_SISTEMAS`, después en la carpeta del usuario y al final en `/usr/share/calcula/sistemas`, los del paquete; si el mismo nombre está en dos lugares se usa el primero y Calcula avisa cuál queda tapado. Para que un sistema aparezca también en la interfaz web hay que ponerlo donde lo vea el servidor: en `/usr/share/calcula/sistemas` o en el directorio que indique `CALCULA_SISTEMAS` en la configuración de Apache.

## 2.4. Puyuspa 6.0

La interfaz web se organiza también por sistemas y se mudó a <https://www.psicro.org/puyuspa/>: allí está la lista de sistemas, y cada uno tiene su página, `/puyuspa/sistema.html`. La carta psicrométrica es la página del sistema psicro, <https://www.psicro.org/puyuspa/psicro.html>; las direcciones viejas bajo `/psicro/` redirigen a ella. Cada página calcula el punto del formulario al abrirse y muestra los gráficos que la configuración del sistema declara, con sus

familias de líneas, las mismas herramientas de dibujo y la exportación a SVG, DXF y gnuplot; *Calcular* muestra el resultado y *Calcular y marcar* además lo marca en los gráficos. Con TEOS-10, mientras el modelo calcula la carta la primera vez, se muestra una provisoria con RP-1485. La página se adapta a teléfonos. La parte [II](#) lo describe en detalle.

## 2.5. Paquetes y licencias

Los paquetes Debian/Ubuntu son `calcula` (el programa, los módulos y los sistemas, que convive con el paquete `psicro` 5.0 porque no comparte archivos con él) y `puyuspa` 6.0, que depende de `calcula`. `Calcula` se distribuye bajo la GNU GPL 3.0 o superior; `Puyuspa`, la interfaz web, sigue bajo la GNU AGPL 3.0 o superior; `Psicro` 5.0 y las versiones anteriores quedan bajo la AGPL con la que se publicaron. La instalación se describe en el capítulo [3](#).

# Capítulo 3

## Instalación

### 3.1. Requerimientos

Calcula puede compilarse y ejecutarse en gran cantidad de computadoras con un sistema tipo Unix. Necesita la GNU Scientific Library (GSL, 2.x), readline y ncurses. Para compilar desde las fuentes hacen falta además autoconf, automake, libtool, bison, flex, gfortran (la biblioteca SIA de TEOS-10, sección 9.6.8, está en Fortran) y g++ (el módulo dinámico usa ExprTk, en C++). La versión 4.0 tuvo un instalador para Windows construido con Cygwin; Calcula no se ha probado en Windows, aunque no hay nada que en teoría impida compilarlo allí con el mismo método.

### 3.2. Con el paquete Debian/Ubuntu

Para Ubuntu 24.04 y derivados existe el paquete `calcula` (arquitectura amd64):

```
sudo apt install ./calcula_6.0-16_amd64.deb
```

Instala `/usr/bin/calcula`, las bibliotecas de los módulos en `/usr/lib/x86_64-linux-gnu` (`libcalcula-psicro`, `libcalcula-pendulo` y sus `-ele`, `libcalcula-modulodinamico`, con los enlaces `.so` que la carga dinámica necesita), los sistemas en `/usr/share/calcula/sistemas`, la página de manual `calcula(1)` y la documentación en `/usr/share/doc/calcula`. Las dependencias (`libgsl`, `libreadline`, `libgfortran`, `libstdc++`) se resuelven solas.

Si se desinstala, `sudo apt remove calcula`. El paquete no comparte archivos con el `psicro` 5.0 anterior, así que los dos pueden convivir.

**Cuidado con instalaciones manuales previas.** Una copia de `calcula` en `/usr/local/bin`, o de sus bibliotecas en `/usr/local/lib`, se encuentra antes que las del paquete, tanto en el `PATH` como en el enlazador dinámico, y produce errores desconcertantes (“No encuentre la biblioteca `libcalcula-psicro.so`” si son bibliotecas viejas). Bórrelas y ejecute `ldconfig`.

### 3.3. Desde las fuentes

Calcula usa las autotools. En el directorio `calcula-6.0` del repositorio:

```
libtoolize --copy && aclocal -I m4 && automake --add-missing --copy && autoconf
./configure
make
sudo make install
sudo ldconfig
```

Si **bison** o **flex** se instalan después de **configure**, vuelva a ejecutarlo: de lo contrario el analizador léxico no se regenera. Para probar sin instalar, con los sistemas del árbol de fuentes:

```
cd src && LD_LIBRARY_PATH=$PWD/.libs CALCULA_SISTEMAS=$PWD/../sistemas ./calcula --sistemas
```

La batería de regresión (1747 casos por modelo, cuatro modelos, más la consola, los sistemas y el módulo dinámico; alrededor de un minuto, casi todo en TEOS-10; escrita en Python, que Calcula no necesita para nada más, y descrita programa por programa en **tests/DOCUMENTACION.md**) se ejecuta con `python3 tests/test_solver.py`.

### 3.4. Archivos

**Ejecutable** `calcula` (C, flex y bison): lee datos de su entrada estándar o de la línea de comandos y vuelca resultados en su salida estándar.

**Módulos** `libcalcula-psicro.so`, `libcalcula-pendulo.so`: sistema de ecuaciones, solver y presentación de cada sistema compilado; `libcalcula-*-ele.so`: sus funciones de propiedades; `libcalcula-modulodinamico.so`: el módulo dinámico (sección 6.1).

**Sistemas** `nombre.sis` y los `.din` del módulo dinámico, en `/usr/share/calcula/sistemas`.

**CGI** `psicro.pl`, `curvas.pl`, `sistemas.pl` y `serie.pl` (Perl): la interfaz web, parte de Puyuspa.

Archivos del código fuente en `calcula-6.0/src`:

`psicro_ele.c`, `psicro_ele.h` funciones psicrométricas (propiedades del aire húmedo).

`psicro_plus.c`, `psicro_plus.h` sistema de ecuaciones del módulo psicro, verificación, impresión.

`calcula_gsl.c`, `calcula_gsl.h` motor de soluciones, común a todos los módulos.

`psi_lex.l`, `psi_yacc.y` analizadores léxico y sintáctico del lenguaje de entrada.

`calcula.c` programa principal: opciones, configuración, carga de módulos, entrada interactiva.

`sistemas.c` el registro de sistemas (`.sis`).

`pendulo_*.c` el módulo péndulo.

`modulodinamico_plus.c`, `modulodinamico_ele.cpp` el módulo dinámico: la mecánica de Calcula en C y el puente a ExprTk en C++ (`exprtk/exprtk.hpp`, licencia MIT).

`common_ele.h`, `psiyac.h` definiciones compartidas.

`Makefile.am` sistema automake y autoconf.

# Capítulo 4

## Variables

Psicro reconoce las variables de la tabla 4.1. Los nombres se escriben en minúsculas en la entrada. Las unidades son las del SI, con la temperatura en grados centígrados. Internamente el estado se expresa en base molar: fracción molar de agua, y entalpía, entropía y volumen por mol de mezcla; las variables con sufijo *a* están referidas al kilogramo de aire seco.

| Nombre     | Magnitud                                                | Unidad              | Notas                            |
|------------|---------------------------------------------------------|---------------------|----------------------------------|
| <i>t</i>   | Temperatura de bulbo seco                               | °C                  | ITS-90 (sección 9.6.1)           |
| <i>x</i>   | Fracción molar del vapor de agua                        | –                   | $0 \leq x < 1$                   |
| <i>p</i>   | Presión de la mezcla                                    | Pa                  |                                  |
| <i>v</i>   | Volumen de la mezcla                                    | m <sup>3</sup> /mol |                                  |
| <i>h</i>   | Entalpía de la mezcla                                   | J/mol               | referida a 0 °C                  |
| <i>pv</i>  | Presión parcial de vapor                                | Pa                  |                                  |
| <i>xs</i>  | Fracción molar de agua en saturación                    | –                   | a la misma <i>t</i> y <i>p</i>   |
| <i>wr</i>  | Humedad relativa                                        | –                   | fracción, $0 \leq wr \leq 1$     |
| <i>alt</i> | Altura sobre el nivel del mar                           | m                   | determina <i>p</i> (sección 8.1) |
| <i>s</i>   | Entropía de la mezcla                                   | J/(K·mol)           |                                  |
| <i>td</i>  | Temperatura de rocío                                    | °C                  |                                  |
| <i>tbh</i> | Temperatura termodinámica de bulbo húmedo               | °C                  |                                  |
| <i>gs</i>  | Grado de saturación                                     | –                   | fracción                         |
| <i>th</i>  | Temperatura de hervor del agua                          | °C                  | a la presión <i>p</i>            |
| <i>xbh</i> | Fracción molar de agua a la temperatura de bulbo húmedo | –                   |                                  |
| <i>ha</i>  | Entalpía por kg de aire seco                            | J/kg                |                                  |
| <i>sa</i>  | Entropía por kg de aire seco                            | J/(K·kg)            |                                  |
| <i>va</i>  | Volumen por kg de aire seco                             | m <sup>3</sup> /kg  |                                  |

Cuadro 4.1: Variables del módulo psicro.

La humedad absoluta *W* (kg de agua por kg de aire seco), que es la que muestran las tablas de salida en base aire seco y la que usa Puyuspa en la carta, se relaciona con la fracción molar por

$$W = \frac{PM_{H_2O}}{PM_{aire}} \frac{x}{1-x}, \quad x = \frac{W PM_{aire}}{PM_{H_2O} + W PM_{aire}}, \quad (4.1)$$

con  $PM_{H_2O} = 0,01801534$  y  $PM_{aire} = 0,0289645$  kg/mol.

El punto se define con exactamente tres variables. Además de rechazar las ternas dependientes (por ejemplo *t*, *th* y *p*, que no son independientes entre sí, o *x* y *td*, que se determinan mutuamente), psicro verifica que el estado calculado tenga sentido físico:  $0 \leq x \leq x_s$ , humedad relativa y grado de saturación entre 0 y 1, temperaturas de rocío y bulbo húmedo no mayores que la de bulbo seco, y temperaturas dentro del rango del modelo (–60 a 300 °C; algunas funciones

dan problemas por debajo de  $-30\text{ }^{\circ}\text{C}$ ).

# Capítulo 5

## Uso en consola

### 5.1. Invocación

```
calcula -s sistema [opciones] [archivo ...]
```

Sin archivos, calcula lee líneas de su entrada estándar (la página de manual `calcula(1)` resume lo que sigue). En una terminal la entrada es interactiva, con edición de línea e historial (readline) y el indicador `Calcula>`; se sale con `quit`, `exit`, `sale`, `chau` o fin de archivo. Si se indican archivos, los procesa en orden. No hay sistema por defecto: si no se indica, calcula lo avisa, lista los sistemas disponibles y muestra la ayuda.

**-s *SISTEMA*, --sistema=*SISTEMA*** Sistema a resolver (por ejemplo `psicro`); calcula deduce su módulo y, si es del módulo dinámico, su archivo. También `%sistema;` al comienzo de la línea de datos, `sistema=SISTEMA` en `~/.calcula` o `calcula_sistema` en el entorno.

**--sistemas** Lista los sistemas disponibles: nombre, módulo, título, datos de ejemplo y archivo.

**--machine** Protocolo por líneas para programas (sección 5.3). Por ahora solo acepta sistemas del módulo dinámico; no se combina con `-p`, archivos de datos, `-t`, `--limite` ni `--sistemas`.

**--limite=*VAR[:PESO ,...]*** Desde el punto de cada línea avanza en esa dirección de los datos (`--limite=v`, `--limite=l:-1`, `--limite=v:1,e:-1`) hasta el borde de lo que se puede resolver, y dice el valor límite y el motivo: una restricción, el dominio, que no hay solución (que puede ser un límite del método numérico) o que no hay límite. Pasos que se duplican y bisección; cada intento parte de la solución anterior.

**-p *DATOS*, --procesa=*DATOS*** Procesa *DATOS* como si fuera una línea de entrada y termina. En el shell hay que entrecomillar el argumento si contiene espacios, punto y coma o el signo %.

**-m *MODULO*, --modulo=*MODULO*** Usa un módulo directamente, sin un sistema registrado (con `modulodinamico`, junto con `--dinamico`).

**-d[*NIVEL*], --debug[=*NIVEL*]** Trazas de depuración por la salida de error. Nivel 2 agrega la traza del analizador sintáctico. También con `calcula_debug=NIVEL` en el entorno o `debug=NIVEL` en `~/.calcula` o `/etc/calcula.conf`.

**-8, --ipts68** Las temperaturas de entrada y de salida del sistema `psicro` están en la escala IPTS-68, la de las tablas anteriores a 1990. Por defecto se entran y salen en ITS-90 (sección 9.6.1). También con `calcula_ipts68=1` en el entorno o `ipts68=1` en `~/.calcula`.

- H, --hw Modelo histórico (Hyland y Wexler 1983 y Brochure ASHRAE 1977, en IPTS-68, gas ideal en el volumen) en vez de la formulación ASHRAE RP-1485 (sección 9.6.6). También con `calcula_hw=1` o `hw=1`.
- w, --pvhw Presión de vapor de Hyland y Wexler 1983 [2] en vez de la IAPWS (sección 9.6.4). También con `calcula_pvhw=1` o `pvhw=1`.
- i, --ideal Modelo de gas ideal del *ASHRAE Handbook* (sección 9.6.7):  $f_s = 1$ ,  $v = RT/p$ ,  $h = 1,006t + W(2501 + 1,86t)$ . También con `calcula_ideal=1` o `ideal=1`. Si se dan --hw e --ideal, vale --ideal.
- T, --teos10 Modelo TEOS-10 (sección 9.6.8): la biblioteca SIA con las funciones de Helmholtz completas del agua (IAPWS-95), el hielo (IAPWS-06) y el aire (Lemmon 2000) y saturación por igualdad de potenciales químicos. También con `calcula_teos10=1` o `teos10=1`. Tiene prioridad sobre --ideal y --hw.
- S *S*, --sal=*S* Salinidad absoluta del agua de mar, en g/kg, con la que se satura el aire: la humedad relativa, el rocío y el bulbo húmedo pasan a referirse al equilibrio con esa agua (IAPWS-08). Por defecto es 0: agua pura. Solo actúa con --teos10; los otros modelos la ignoran. También con `calcula_sal=S` o `sal=S`, pero fijada en `~/calcula` queda para todas las corridas con --teos10 hasta que se la quite; para un uso ocasional conviene la línea de comandos.
- D *archivo*, --dinamico=*archivo* Archivo de variables y ecuaciones para usar el módulo `modulodinamico` sin registrar un sistema (sección 6.1). También con `calcula_dinamico` o `dinamico=`.
- 1, --fs1 Factor de corrección  $f_s = 1$  ( $x_s = p_{ws}/p$ ) en vez del del modelo (RP-1485, sección 9.6.6, o la ecuación de equilibrio agua-aire de la sección 9.5 con --hw). También con `calcula_fs1=1` o `fs1=1`.
- t Ejecuta la función de prueba del módulo del sistema.
- , --help; --usage; -V, --version Ayuda, uso resumido y versión.

## 5.2. Configuración

Cada opción larga puede fijarse también en `/etc/calcula.conf` (para todos los usuarios) o en `~/calcula` (para uno), con líneas de la forma `opcion=valor`, o con variables de entorno `calcula_opcion`. La prioridad es: línea de comandos, entorno, archivo del usuario, archivo del sistema. Quien use casi siempre el aire húmedo puede poner `sistema=psicro` en `~/calcula`.

## 5.3. Modo máquina para integradores

Con `calcula --machine -s circuito-rlc` el programa carga el sistema una vez, escribe `READY 1` y espera peticiones de una línea por la entrada estándar. Solo se admite el módulo dinámico. El formato es `EVAL id cantidad_datos nombre=valor ... cantidad_salidas nombre ...`; la respuesta es `OK id cantidad_salidas nombre=valor ...` o `ERR id clase codigo`. Cada línea de respuesta se vacía enseguida; la salida estándar contiene solo el protocolo y los diagnósticos van a la salida de error. Calcula continúa después de un error de petición, aunque el integrador puede decidir detenerse.

Desde Calcula 6.0-28 la petición puede terminar con `SEMILLAS k nombre=valor ...`, el punto desde donde arranca Newton (las variables que no se nombran toman la semilla del `.din`), y con `ITER n`, el tope de iteraciones de esa petición (sin él, 10000). Los dos valen solo para esa petición. Simul2 los usa para arrancar cada paso desde la predicción del estado nuevo, como

el predictor del método de Gear de SCEPTRE, y para fallar rápido y achicar el paso cuando Newton no converge.

Las clases iniciales son `INPUT` (petición inválida), `DOMAIN` (dominio o restricción), `SOLVER` (sin solución válida) e `INTERNAL` (fallo del módulo). Los códigos concretos y un ejemplo completo están en `PROTOCOLO-MAQUINA.md`. Los resultados se imprimen directamente con 17 cifras significativas y locale numérico C, sin el filtro de ceros de la presentación interactiva; eso preserva el transporte de un `double`, no mejora por sí mismo la exactitud de Newton. La opción `--machine` solo existe en la línea de comandos: no se configura en `~/calcula`.

### 5.3.1. Sensibilidades locales para integradores

La consulta `CAPS id` responde `CAPS id SENS1` si el módulo permite sensibilidades; `READY 1` y `EVAL` no cambian. La operación optativa `SENS` toma los mismos datos y salidas que `EVAL`, más `WRT nq dato ...`, `CONTROL delta absoluto relativo refinamientos` y, opcionalmente, `SCALES k variable=escala ....` Devuelve el punto y la matriz de derivadas por filas de salida y columnas de los datos pedidos, en unidades físicas y con 17 cifras.

1. Calcula resuelve una vez el punto de  $R(q, z) = 0$ , aproxima las derivadas de los residuos originales y resuelve  $R_z S = -R_q$ . No entrega al integrador el Jacobiano de Newton como si fuera el del campo diferencial.
2. Se comparan diferencias centrales a dos perturbaciones, con escalas para datos e incógnitas; se controla el residuo central y la relación de valores singulares de la matriz escalada. Una LU propia se reutiliza para todos los segundos miembros.
3. El alcance inicial es de 1 a 256 ecuaciones y salidas, y de 1 a 64 datos diferenciados. Se requiere solución local regular y suave. No se aceptan incógnitas colgantes no finitas ni perturbaciones fuera de dominio.
4. Los fallos específicos llevan clase `SENSITIVITY`; no se sustituyen por otra aproximación silenciosamente. El protocolo completo, sus límites y pruebas están en `PROTOCOLO-MAQUINA.md`. El control numérico no certifica exactitud ni diferenciabilidad.

## 5.4. El lenguaje de entrada

Cada línea de entrada, ya sea interactiva, de un archivo o dada con `-p`, tiene la forma

```
[%sistema;] [comando[=valores] comando ...;] tipo1=valor1,tipo2=valor2,tipo3=valor3
```

Los corchetes marcan partes opcionales. El punto y coma separa el sistema, los comandos y los datos; la coma separa los datos. Los espacios son indiferentes. Una línea puede contener solo comandos (terminados en `;`) o solo datos.

### 5.4.1. Sistema

`%psicro;`, `%pendulo;`, `%circuito-carga;` o el nombre de cualquier sistema al comienzo de la línea lo seleccionan para esa línea. Si no se indica, rige el de la opción `-s`; si tampoco hay, calcula lo avisa. Con los datos del sistema `psicro` se usan las variables de la tabla 4.1; con otros sistemas, las suyas.

### 5.4.2. Comandos generales

**html** Salida en HTML: la tabla y las magnitudes derivadas con etiquetas `<TABLE>` y `<div>`. Es lo que usa el CGI.

**dp** Agrega la matriz de derivadas parciales de todas las propiedades respecto de la base ( $T, X, P$ ) en el punto calculado.

**imp[=tipos]** Modo filtro: en vez de la tabla imprime una sola línea de números separados por comas, con los valores de *tipos* (por ejemplo `imp=t,ha,td`); sin lista imprime las 18 variables en el orden de la tabla 4.1 (`t x p v h pv xs wr alt s td tbh gs th xbh ha sa va`). Los valores van en las unidades internas (base molar) salvo *ha*, *sa* y *va*. Los comandos no persisten entre líneas: cada línea lleva los suyos.

### 5.4.3. Comandos del módulo psico: la base de los resultados

Eligen en qué base se muestran las columnas X, H, S y V de la tabla:

**Ba** Por kg de aire seco (defecto). X es entonces  $W$ ; H y S por kg de aire seco; V en  $\text{m}^3$  por kg de aire seco.

**Bm** Por kg de mezcla: X es la fracción másica de agua; H, S y V por kg de mezcla. Usa la masa molar de la mezcla  $(1 - x) PM_{\text{aire}} + x PM_{H_2O}$ .

**Bn** Por mol de mezcla: los valores internos, X fracción molar.

**Bv** Por  $\text{m}^3$  de mezcla: X en kg de agua por  $\text{m}^3$ , H y S por  $\text{m}^3$ ; V se muestra por kg de mezcla.

La base afecta solo a la presentación; el cálculo es siempre el mismo.

### 5.4.4. Datos

Tres asignaciones `tipo=valor` separadas por comas, con los nombres de la tabla 4.1 en minúsculas y valores en las unidades allí indicadas. Se aceptan los sinónimos *xa* (por *x*) y *xas* (por *xs*).

### 5.4.5. Comentarios

Estilo shell: desde `#` hasta el fin de línea se ignora. Una línea que empieza con `##` se copia a la salida sin el prefijo; con `###` se copia con el `#`: sirven para rotular archivos de resultados. Estilo C: todo lo encerrado entre `/*` y `*/`, que puede abarcar varias líneas.

## 5.5. La salida

Para `t=20,wr=0.5,alt=0`:

Tipos de datos ingresados: ALT WR T

Iteraciones: 2

Base: masa aire

| Punto      | T     | X       | H        | S      | V       | PV      |
|------------|-------|---------|----------|--------|---------|---------|
| central:   | 20.00 | 0.00726 | 38775.02 | 139.48 | 0.84019 | 2336.64 |
| rocio:     | 9.27  | 0.00726 | 27856.39 | 101.54 | 0.80944 | 1168.32 |
| bulbo hum: | 13.77 | 0.00981 | 38894.81 | 140.31 | 0.82567 | 1573.62 |
| saturado:  | 20.00 | 0.01468 | 57626.73 | 204.90 | 0.85010 | 2336.64 |

Presion Atmosferica: 101325

|                      |         |
|----------------------|---------|
| Altura est.:         | 0.00    |
| Temperatura hervor:  | 100.00  |
| Humedad relativa:    | 0.5000  |
| Grado de Saturacion: | 0.4942  |
| Humedad base mezcla: | 0.01153 |
| Humedad base aire:   | 0.00726 |

Las cuatro filas son el punto pedido (*central*), el estado de rocío (misma humedad, enfriado hasta saturar), el de bulbo húmedo (saturación adiabática) y el saturado a la misma temperatura. Las columnas X, H, S y V están en la base elegida (sección 5.4.3); T en °C y PV en Pa. “Iteraciones” es la cantidad de pasos del solver. “Humedad base mezcla” es la fracción molar y “Humedad base aire” la humedad absoluta W.

Con `dp;` se agrega la matriz de derivadas parciales  $\partial(\text{propiedad})/\partial(T, X, P)$ .

## 5.6. Ejemplos

```
calcula -s psicro -pt=30,wr=1,alt=0          # aire saturado a 30 C, nivel del mar
calcula -s psicro '-pBm;t=30,wr=1,alt=0'     # lo mismo, por kg de mezcla
calcula '-p%psicro;html Ba;t=30,wr=1,alt=0'  # salida HTML
calcula -s psicro '-pimp=t,x,ha,tbh=20,wr=.6,alt=0' # una linea: t, x, ha
calcula -s psicro '-pdp;t=47.87,tbh=29.07,p=87740' # con derivadas parciales
echo "tbh=20,wr=.6,alt=0" | calcula -s psicro  # por la entrada estandar
calcula -s psicro entrada.datos               # archivo con una linea por punto
calcula '-p%pendulo;l=1'                     # otro sistema
calcula --sistemas                           # los sistemas disponibles
```

Un archivo de entrada típico:

```
## Ensayo del 3 de marzo, Salta
# columnas: t, x, ha, td, tbh
imp=t,x,ha,td,tbh;t=25.1,tbh=18.3,alt=1220
imp=t,x,ha,td,tbh;t=26.4,tbh=18.9,alt=1220
```

## 5.7. Errores y código de salida

Si no se indicó el sistema, calcula lo avisa, lista los sistemas y muestra la ayuda, y termina con código de salida 2; en un archivo o una tubería lo avisa en la primera línea de datos que no nombra sistema. Si los tres datos no definen un estado, el sistema psicro lo dice al leerlos: “**det=...**, Conjunto de tipos que no determina solucion: T TH P”. Si el sistema no converge o el estado no verifica (humedad negativa,  $x > x_s$ , temperaturas fuera de rango), imprime la causa por la salida de error y “**Psicro: no se obtuvo una solucion valida tras N iteraciones: ...**”, no imprime tabla, y al terminar el proceso devuelve código de salida 1. Con todos los puntos resueltos devuelve 0. Un error de sintaxis se informa con el número de línea y el texto no reconocido, y el proceso sigue con la línea siguiente.

# Capítulo 6

## Módulos

Calcula no sabe nada de aire húmedo: para cada sistema carga la biblioteca `libcalcula-modulo.so` de su módulo y le pide la lista de variables, la de comandos, la función que evalúa el sistema de ecuaciones, la que verifica el punto y la que lo imprime. Un módulo nuevo es un sistema físico nuevo con la misma interfaz.

**psicro** El aire húmedo, descrito en este manual: el módulo del sistema del mismo nombre.

**pendulo** Un péndulo simple: variables `l` (longitud, m) y `t` (período, s); dado uno calcula el otro. Ejemplo: `%pendulo;l=1` da  $T = 2,00641$  s.

**modulodinamico** Variables y ecuaciones leídas de un archivo de texto y evaluadas con ExprTk: sección 6.1. Lo usan los sistemas `pendulo-dinamico`, `circuito-carga`, `circuito-bobinas`, `circuito-rlc` y `circuito-tabla` y los que agregue cada usuario. (El módulo `circuito` compilado de las versiones anteriores, que nunca funcionó, se retiró en la 5.0-14.)

### 6.1. El módulo dinámico

Los módulos `psicro` y `pendulo` tienen sus variables y sus ecuaciones compiladas en C. El módulo `modulodinamico` las toma de un archivo de texto y las evalúa en tiempo de ejecución con la biblioteca ExprTk (Arash Partow, licencia MIT, incluida en las fuentes), de modo que cualquier sistema de ecuaciones algebraicas se puede resolver con la mecánica de Calcula sin escribir ni compilar código: se dan  $NV - NE$  datos, cualquier subconjunto de las variables, y se obtienen las demás. Con  $NE = NV$  el sistema es cerrado: no lleva datos y se resuelve desde las semillas del archivo (desde la 6.0-29). Es la idea del simulador de Simusol de 2015 [3]<sup>1</sup> traída a Calcula, sin el integrador temporal, que queda para más adelante. En Calcula 6.0 cada archivo `.din` se registra como un sistema con nombre propio; así cualquier persona agrega sistemas nuevos (sección 2.3).

**Uso.** Lo normal es nombrar el sistema, que ya dice qué archivo usa (sección 2.3):

```
calcula -s circuito-carga -p 'r=10,c1=1,c2=2,v1=4,v2=4'
calcula -p '%pendulo-dinamico;l=1'
```

Para probar un archivo sin registrarlo, se indica el módulo y el archivo:

```
calcula -m modulodinamico --dinamico=mio.din -p 'x=1'
```

<sup>1</sup>Saravia 2015, AVERMA 19, 08.13: ecuaciones implícitas con interpretación dinámica; allí el archivo era el `.d` de Sceptre.

(--dinamico= también se puede dar como `calcula_dinamico` en el entorno o `dinamico=` en `~/calcula.`) Los comandos generales `imp` y `html` funcionan igual que con `psiro`; `-t` muestra lo que el módulo leyó y los residuos en las semillas.

**El archivo.** Cinco secciones, cada una anunciada por su palabra sola en una línea, en cualquier orden y repetibles; `#` empieza un comentario. **constantes:** `nombre = expresión`, evaluada una vez (se dispone de `pi`). **funciones:** `nombre(x, y) = expresión` en sus argumentos. **variables:** `nombre = semilla [unidad]`; la semilla es el valor inicial de la incógnita y la unidad es solo para imprimir. Desde *Calcula* 6.0-6 una variable puede llevar su dominio después de la unidad: hasta dos condiciones `>`, `>=`, `<` o `<=` con un número, como `l = 1 [m] > 0`. *Calcula* rechaza un dato fuera del dominio antes de resolver (**Dato fuera del dominio**: `l = 0`; debe ser `> 0`.) y una raíz que lo viola después (**Resultado fuera del dominio**); los módulos compilados pueden declararlo también (el péndulo: `l > 0, t > 0`). Desde *Calcula* 6.0-16 algunos dominios se deducen de las ecuaciones sin declararlos: `sqrt(x)` da  $x \geq 0$  y `log(x)`, `log10(x)` y `log2(x)` dan  $x > 0$ , cuando el argumento es una variable sola por o entre números o constantes positivos (`sqrt(1/g)`); `-t` los lista con su origen. El borde físico general es una superficie en el espacio de las variables: la sección **restricciones** (*Calcula* 6.0-8) lleva desigualdades entre expresiones, como `v <= e` para un capacitor que carga una batería (mientras carga, su tensión no pasa la de la batería), que se comprueban con los datos antes de resolver y sobre la solución. **ecuaciones:** una por línea, como expresión que debe anularse o como `izquierda = derecha`. La sintaxis de las expresiones es la de *ExprTk*: operadores habituales, `^`, las funciones matemáticas usuales, `if(cond, a, b)` y comparaciones. Los nombres se pasan a minúsculas.

**Metadatos opcionales para integración temporal.** En un `.din` que describa un sistema dinámico se puede indicar qué variable es un estado y cuál es su derivada mediante un comentario por par: `# @estado nombre_estado nombre_derivada`. Los dos nombres deben corresponder a variables declaradas en el mismo archivo. Por ejemplo, `circuito-rlc.din` contiene `# @estado il2 dil2dt, # @estado il23 dil23dt` y `# @estado vc3 dvc3dt`. *Calcula* elimina el comentario antes de interpretar el archivo: no lee ni valida esta anotación y el sistema sigue siendo utilizable sin integrar. La convención está destinada a herramientas externas como *Simul2*, que podrán usarla para generar un `.din` ampliado con las ecuaciones de un método de Runge–Kutta. El generador automático todavía no forma parte de *Calcula* ni de *Simul2*.

**Tablas externas.** Desde *Calcula* 6.0-18, si al configurar se encontró el paquete `tabular2` (la biblioteca de tablas de *Siru/Simusol*, `pkg-config tabular2`; con `./configure -with-tabular2` es obligatoria, y así la pide el paquete *Debian* desde 6.0-20), las expresiones tienen además `tabla('archivo.txt', 'X', 'Y', valor [, método])`: busca en un archivo de texto la columna con encabezado `X`, entra con `valor` y devuelve la columna `Y`, interpolada lineal (método 1, el de por defecto) o por spline (método 2). Una ruta relativa se busca primero junto al `.din`. El archivo de datos es texto: una línea con los nombres de columna precedida de `#` y después las líneas de datos, separadas por tabuladores, espacios o comas. Una línea que empieza con `#` es un comentario en cualquier parte del archivo; el encabezado, que también empieza con `#`, se distingue porque tiene tantas palabras como la primera línea de datos (y `##` es siempre comentario, para desempatar a mano). La columna de entrada no puede decrecer: repetir un valor significa un salto, y fuera de la tabla se extrapola con la recta de los dos puntos del extremo (hasta *tabular2* 2.0-1 la interpolación lineal devolvía, a la derecha, el último valor), lo que rara vez dice algo del objeto tabulado, por lo que a la variable que entra en una tabla conviene ponerle como dominio el rango de la tabla. Se leen tal cual los archivos de resultados de *Simusol* (`.simul` y `.INTER`; en los `.simul` *tabular* usa los *sceptrevars* del bloque de encabezados, que son los nombres con los que se pide una columna en todo *Simusol*) y los archivos de datos de *gnuplot*; no un script de *gnuplot* con los datos adentro, que es un programa y no una tabla. El formato completo está en

el README de tabular2.

No es un paso previo sino una función más, de modo que va adentro de una ecuación y el solver la atraviesa en los dos sentidos: se puede entrar por la columna  $X$  y preguntar la  $Y$ , o dar la  $Y$  y dejar que Newton busque la  $X$ , que es una búsqueda inversa en la tabla. Si el archivo no está, la columna no existe o el método no es 1 ni 2, `tabla()` devuelve NaN y avisa una vez por la salida de error: no termina el proceso, y Calcula informa que no encontró solución. `tabular2` es opcional; sin ella Calcula compila igual y `tabla()` no existe.

**Tablas dentro del archivo.** Desde Calcula 6.0-23 (con tabular2 2.0-9) la tabla puede escribirse en el mismo `.din`, en una sección `tablas`: cada una empieza con `tabla NOMBRE` y debajo va tal cual, con el formato del archivo de datos, hasta la tabla o la sección siguiente. `tabla('NOMBRE', 'X', 'Y', valor)` busca primero entre ellas, y si no hay ninguna con ese nombre lee un archivo como siempre. En esa sección el `#` no es comentario sino el encabezado de la tabla; los comentarios van con `##`. Las tablas se leen antes que todo, así las constantes ya pueden usarlas. Así un sistema queda en un solo archivo:

```
variables
  t = 25 [C] >= 0 <= 100
  r = 10000 [ohm] > 0
ecuaciones
  r = tabla('ntc', 'T', 'R', t, 1)
tablas
tabla ntc
  #T  R
    0  28704.3
    25 10000.0
    100 987.0
```

**Funciones externas en Fortran.** Desde Calcula 6.0-27 un `.din` puede usar una `FUNCTION` de Fortran de doble precisión, declarada en la sección `externas` con su nombre, su cantidad de argumentos (de 1 a 12) y la ruta del fuente, relativa al `.din`:

```
externas
  DOBLE 2 doble.f90
variables
  y = 0
  x = 1
ecuaciones
  y - doble(x, 3) = 0
```

Calcula compila el fuente con `gfortran` a una biblioteca compartida en `~/cache/calcula/externas`, que vuelve a compilar si el fuente cambia, y la carga con `dlopen`. Como es código de afuera, solo lo acepta con `CALCULA_EXTERNAS=1` en el entorno: el editor de Puyuspa, que corre archivos de cualquiera, no la pone.

El péndulo del módulo compilado, en este lenguaje:

```
constantes
  g = 9.80665
variables
  l = 1 [m]
  t = 2 [s]
ecuaciones
  t = 2*pi*sqrt(l/g)
```

y `%pendulo-dinamico;l=1` da  $t = 2,00641$  s, lo mismo que `%pendulo;l=1`.

**Los ejemplos de circuitos.** Son dos, uno dual del otro, y describen un instante: el módulo no integra en el tiempo. (Hasta Calcula 6.0-8 había un solo sistema, `circuito`; después hubo tres, con batería; la conexión de dos capacitores con una llave se quitó, porque su trasvase instantáneo ya está en `circuito-carga` y una llave supone un antes y un después.)

Los dos son duales variable por variable (tensión y corriente, carga y flujo, capacidad e inductancia, paralelo y serie) y tienen 19 variables, 14 ecuaciones y 5 datos cada uno. En `circuito-carga.din`, dos capacitores  $c_1$  y  $c_2$  en paralelo, con tensiones  $v_1$  y  $v_2$  y cargas  $q_1 = c_1 v_1$  y  $q_2 = c_2 v_2$ , se descargan por la resistencia  $r$ . Si  $v_1$  y  $v_2$  son distintas, al estar en paralelo pasa carga de uno al otro en forma instantánea hasta la tensión común  $v$ :  $\Delta v_1 = v - v_1$ ,  $\Delta v_2 = v - v_2$ ,  $\Delta q = c \Delta v$  y  $\Delta q_1 + \Delta q_2 = 0$  (se conserva la carga, no la energía:  $e_p$  es la disipada). Luego  $v = ir$ ,  $i = i_{c1} + i_{c2}$ ,  $i_{c1} = -c_1 dv/dt$ ,  $i_{c2} = -c_2 dv/dt$  y  $dv/dt = r di/dt$ . Con  $r = 10 \Omega$ ,  $c_1 = c_2 = 1 \text{ F}$ ,  $v_1 = 4 \text{ V}$  y  $v_2 = 7 \text{ V}$ :  $v = 5,5 \text{ V}$ ,  $\Delta q_1 = 1,5 \text{ C}$ ,  $\Delta q_2 = -1,5 \text{ C}$ , se disipan  $2,25 \text{ J}$  e  $i = 0,55 \text{ A}$ .

En `circuito-bobinas.din`, el dual, dos bobinas  $l_1$  y  $l_2$  en serie, con corrientes  $i_1$  e  $i_2$  y flujos  $\phi_1 = l_1 i_1$  y  $\phi_2 = l_2 i_2$ , se descargan por  $r$ . Si  $i_1$  e  $i_2$  son distintas, al estar en serie la corriente se iguala en forma instantánea en  $i$ :  $\Delta i_1 = i - i_1$ ,  $\Delta i_2 = i - i_2$ ,  $\Delta \phi = l \Delta i$  y  $\Delta \phi_1 + \Delta \phi_2 = 0$  (se conserva el flujo). Luego  $v_r = ir$ ,  $v_r = v_{l1} + v_{l2}$ ,  $v_{l1} = -l_1 di/dt$ ,  $v_{l2} = -l_2 di/dt$  y  $dv_r/dt = r di/dt$ . Con  $r = 10 \Omega$ ,  $l_1 = 1 \text{ H}$ ,  $l_2 = 2 \text{ H}$ ,  $i_1 = 3 \text{ A}$  e  $i_2 = 0$ :  $i = 1 \text{ A}$ ,  $\Delta \phi_1 = -2 \text{ Wb}$ ,  $\Delta \phi_2 = 2 \text{ Wb}$ , se disipan  $3 \text{ J}$  y  $di/dt = -3,33 \text{ A/s}$ .

En Puyuspa, el esquema de cada uno tiene dos dibujos con los componentes en el mismo lugar: sueltos, cada uno con sus variables, y conectados, con las variables que resuelve Calcula.

`circuito-rlc.din` (18 variables, 9 ecuaciones, 9 datos) es el circuito de la figura 2 de Saravia (2015) [4], el “sistema a” verificado contra SCEPTRE en Saravia (2014) [5]: la fuente  $e_1$ , la resistencia  $r_{12}$ , las bobinas  $l_2$  y  $l_{23}$ , el capacitor  $c_3$  y la resistencia  $r_3$ . El artículo integra en el tiempo; Calcula resuelve un instante: con los parámetros y el estado ( $i_{l2}$ ,  $i_{l23}$ ,  $v_{c3}$ ) da las corrientes y tensiones de cada rama y las derivadas del estado. En el estado inicial del artículo (todos los coeficientes 1,  $i_{l2} = i_{l23} = 0$ ,  $v_{c3} = 0$ ) da  $v_{l2} = 1 \text{ V}$  y  $di_{l2}/dt = di_{l23}/dt = 1 \text{ A/s}$ , el comienzo de sus curvas; en el régimen final ( $i_{l2} = 1 \text{ A}$ ) las derivadas se anulan.

**Una resistencia dada por una tabla.** `circuito-tabla` (10 variables, 7 ecuaciones, 3 datos) es el circuito más simple de todos y el único que mira afuera del archivo: una batería de fuerza electromotriz  $v$  y resistencia interna  $r_i$  alimenta un termistor NTC. La resistencia del termistor no es un dato ni una fórmula: sale de la tabla que publica el fabricante, `circuito-tabla-ntc.txt`, un NTC de  $10 \text{ k}\Omega$  a  $25^\circ \text{C}$  con  $B = 3435 \text{ K}$  tabulado de  $0$  a  $100^\circ \text{C}$ , leída desde la propia ecuación  $r = \text{tabla}(\text{'circuito-tabla-ntc.txt'}, \text{'T'}, \text{'R'}, t, 1)$ . El resto es la malla única:  $v_r = ir$ ,  $v_i = ir_i$ ,  $v = v_r + v_i$ ,  $p = vi$ ,  $p_r = v_r i$  y el rendimiento  $p_r/p$ . El dominio de  $t$  es el de la tabla, porque afuera tabular devuelve el valor del extremo, una resistencia constante que no dice nada del termistor.

Con  $v = 12 \text{ V}$ ,  $r_i = 0,5 \Omega$  y  $t = 25^\circ \text{C}$  da  $r = 10000 \Omega$  e  $i = 1,19994 \text{ mA}$ . Al revés, dando  $i = 0,00721631 \text{ A}$  en lugar de la temperatura, Newton despeja  $t = 80^\circ \text{C}$ : la búsqueda inversa en la tabla la hace el mismo solver que resuelve el circuito. Los dos métodos de interpolación se distinguen bien acá: en  $t = 45^\circ \text{C}$  la fórmula exacta del termistor da  $4846,87 \Omega$ , la recta entre los puntos tabulados de  $40$  y  $50$  da  $4930$  (un  $1,7\%$  de más) y la spline,  $4846,2$  (un  $0,01\%$ ).

**Sistemas grandes.** Desde Calcula 6.0-38 el módulo dinámico resuelve sistemas de decenas de miles de ecuaciones (circuitos grandes, grillas de conducción). Todo es optativo y se elige con variables de entorno; el archivo `.din` es el mismo y la batería de pruebas compara cada camino con el de siempre.

| Variable                             | Efecto                                                       |
|--------------------------------------|--------------------------------------------------------------|
| <code>CALCULA_KLU=0</code>           | LU denso de GSL aunque el sistema sea grande                 |
| <code>CALCULA_KLU_MIN=n</code>       | desde cuántas ecuaciones se usa KLU (100)                    |
| <code>CALCULA_LINEAL=gmres</code>    | GMRES con la factorización vieja de preconditionador         |
| <code>CALCULA_LINEAL=jfnk</code>     | Newton-Krylov sin jacobiano                                  |
| <code>CALCULA_LINEAL=bloques</code>  | GMRES preconditionado por subcircuitos (Mongoose)            |
| <code>CALCULA_GMRES_TOL=t</code>     | residuo relativo de GMRES en un paso de Newton ( $10^{-4}$ ) |
| <code>CALCULA_COMPILADO=1</code>     | ecuaciones traducidas a Fortran y compiladas                 |
| <code>CALCULA_HILOS=n</code>         | hilos para el jacobiano y los residuos del compilado         |
| <code>CALCULA_LINEAL_INFOME=1</code> | al salir, factorizaciones e iteraciones                      |

*El jacobiano disperso.* El de un circuito tiene dos a cinco no ceros por fila, pero el LU de GSL es denso: tiempo  $NE^3$  y memoria  $NE^2$ . Desde 100 ecuaciones, si Calcula se compiló con KLU de SuiteSparse (el paquete la trae), el jacobiano se guarda disperso y se factoriza con KLU, hecho para matrices de circuitos: el patrón se analiza una vez por elección de datos y en cada paso se refactoriza con los pivotes anteriores. Si KLU lo encuentra singular, sigue el híbrido denso de GSL como antes. GSL usa OpenBLAS si está.

*Métodos iterativos.* En una integración el jacobiano cambia poco de un paso al otro: con `CALCULA_LINEAL=gmres` el paso de Newton se resuelve con GMRES preconditionado con la última factorización, y solo se refactoriza si GMRES no converge en diez iteraciones. Con `CALCULA_LINEAL=jfnk` (Newton-Krylov), además, el jacobiano no se arma en esos pasos: el producto  $Jv$  sale de dos evaluaciones de residuos,  $(F(x + \varepsilon v) - F(x))/\varepsilon$ . Con `CALCULA_LINEAL=bloques` el sistema se parte en subcircuitos con Mongoose, cada uno se factoriza en su hilo y GMRES ajusta lo que los acopla; da los mismos resultados pero hoy rinde menos que KLU solo, y queda como base de un método directo por subcircuitos (complemento de Schur).

*Las ecuaciones compiladas.* Con `CALCULA_COMPILADO=1` las ecuaciones se traducen a Fortran al cargar el archivo, se compilan con `gfortran` (en trozos de 500, en paralelo) y se cargan con `dlopen`; el código queda en `~/.cache/calcula/compilados` y solo se vuelve a compilar si el archivo cambia. Al cargar se comparan sus residuos con los de ExprTk en tres puntos: si no coinciden, si el traductor no conoce una función o si `gfortran` falla, se avisa y se sigue con ExprTk. El código compilado es puro, así que con `CALCULA_HILOS=n` el jacobiano y los residuos se reparten entre hilos. Rinde con ecuaciones complejas; con miles de ecuaciones triviales ExprTk es más rápido. Se pide explícitamente porque compila y carga código, y el editor de Puyuspa no lo pide.

Medido con la grilla RC de  $10 \times 10$  de Siru (1920 ecuaciones por el trapecio, 500 pasos), la corrida entera pasa de 208 s a 7,7 s con la misma curva; en una grilla de 10 000 diodos, Newton-Krylov con las ecuaciones compiladas y ocho hilos es tres veces más rápido que KLU solo. El detalle, en `MODULODINAMICO.md`.

**Lo que hay que saber.** El módulo verifica, antes de resolver, que los datos elegidos determinen a las demás variables: calcula el jacobiano de los residuos respecto de las incógnitas en la semilla, lo equilibra y mira la relación entre su menor y su mayor valor singular; si es despreciable avisa cuáles son los datos y no resuelve. Por eso las semillas importan: en un punto donde se anulan las derivadas de los términos no lineales (una carga nula en  $q_b^2$ , una tensión nula en  $v_f^2$ ) el jacobiano es singular aunque el sistema tenga solución, y hay que poner semillas típicas distintas de cero. La convergencia se mide con los residuos absolutos, tolerancia  $10^{-7}$ : ecuaciones con valores de  $10^5$  (una presión en Pa) conviene escribirlas divididas por una constante. Compilar el módulo requiere un compilador C++ y tarda un par de minutos por el tamaño de ExprTk.

# Capítulo 7

## La biblioteca de rutinas

El sistema `psicro` usa una biblioteca de rutinas para realizar los cálculos psicrométricos, `libcalcula-psicro-ele` (propiedades) y `libcalcula-psicro` (sistema de ecuaciones y solver), utilizables desde otros programas en C enlazando con `-lcalcula-psicro -lcalcula-psicro-ele -lgsl -lgslcblas -lm` e incluyendo `psicro_ele.h`.

### 7.1. Funciones de propiedades

Todas devuelven 0 y dejan el resultado en el último argumento. Las que reciben `pre` calculan con la forma exacta (gas real) para cualquier valor salvo `-1`, que selecciona la aproximada (sección 9.7).

```
int psicro_prop_p(double alt, double *p);           /* presion segun la altura */
int psicro_prop_pw(double t, double *pw);          /* presion de vapor saturado */
int psicro_prop_xws(double pw, double p, double *xs); /* fraccion molar de saturacion */
int psicro_prop_wr(double xw, double xws, double *wr); /* humedad relativa */
int psicro_prop_gs(double gs, double xw, double xws, double *r); /* residuo del grado de saturacion */
int psicro_prop_vol(double t, double xw, double p, int pre, double *v);
int psicro_prop_h_aw(double t, double xw, double p, int pre, double *h);
int psicro_prop_s(double t, double xw, double p, double pw, int pre, double *s);
int psicro_prop_tbh(double t, double xw, double p, double h, double tbh, int pre,
                    double *r1, double *r2);        /* residuos de bulbo humedo */
int psicro_prop_td(double xw, double p, double td, double *r);
int psicro_prop_th(double p, double th, double *r);
```

Hay además funciones de transporte y otras propiedades (viscosidad, conductividad, difusividad, número de Lewis, Prandtl, Schmidt: familia `psicro_prop_vis_*`, `psicro_prop_KondT_*`, `psicro_prop_dv_w`, `psicro_prop_le`, `psicro_prop_pr`, `psicro_prop_sc`) que el programa no expone todavía como variables.

### 7.2. Sistema de ecuaciones y solver

```
int psicro_evalua(const gsl_vector *incognitas, void *param, gsl_vector *residuos);
int psicro_punto(int tipos[3], double datos[3], double resultado[18], int *iter, int defin[5]);
int raiz(gsl_vector *x, gsl_multiroot_function *f, int *iter);
int raiz_con_test(gsl_vector *x, gsl_multiroot_function *f, int *iter,
                 int (*test)(const gsl_multiroot_fsolver *, double *));
```

`psicro_punto` es el punto de entrada: dados tres tipos y sus valores, arma el sistema con las incógnitas restantes, lo resuelve y verifica el resultado. Devuelve `GSL_SUCCESS` solo si hay solución;

el vector de resultados contiene las 18 variables en base molar.

El solver es el método de Newton discreto de GSL (`gsl_multiroot_fsolver_dnewton`) con la semilla histórica del programa y tolerancia absoluta  $10^{-7}$  sobre los residuos, hasta 10000 iteraciones. En la 5.0 (y en la 4.0 desde su revisión 6) las ecuaciones de humedad relativa y grado de saturación se reformulan para iterar ( $X - WR \cdot XS$  en lugar de  $X/XS - WR$ , lineal en  $X$  y  $XS$  cuando  $WR$  es dato), pero la convergencia se comprueba con los residuos originales: multiplicar por  $XS$  no debe aflojar la tolerancia en aire frío o seco. La semilla se comprueba antes de iterar, se rechazan resultados no finitos, y un intento no convergido no se devuelve como solución. Este cambio resolvió el fallo histórico del punto  $t_{bh} = 20$ ,  $w_r = 0,6$ ,  $alt = 0$ , que divergía por un primer paso de Newton desmesurado. Desde Calcula 6.0-6, si un paso cae fuera del dominio de las ecuaciones (la raíz de un negativo, el logaritmo de cero), el solver no abandona: prueba desde el punto anterior con la mitad del paso, un cuarto, etc., hasta que las ecuaciones den valores finitos, y sigue iterando. Así el péndulo con un período de 1 s, cuyo primer paso desde la semilla  $l = 1$  m da una longitud negativa, tiene solución ( $l = 0,2484$  m); el solver es común a todos los módulos, también al dinámico.

La temperatura termodinámica de bulbo húmedo se resuelve con la ecuación exacta de saturación adiabática en base molar, con las entalpías viriales del modelo: si  $h$  es la entalpía del aire ( $t, x$ ),  $h_s$  la del aire saturado a  $t_{bh}$  y  $h_l$  la del agua líquida a  $t_{bh}$ ,

$$(1 - x_s) h - (1 - x) h_s + PM_{H_2O} (x_s - x) h_l = 0. \quad (7.1)$$

Hasta la 5.0-4 se usaba la ecuación aproximada del Handbook de 1985 en base másica con  $c_p$  del aire igual a 1,000 kJ/(kg K) (la 4.0 la sigue usando); la diferencia en  $t_{bh}$  es de 0,001 a 0,03 °C. Queda abierto  $t_{bh} = 0$ ,  $w_r = 1$ : las correlaciones de presión de saturación sobre hielo y sobre agua tienen un salto de unos 0,06 Pa en 0 °C y el método no converge allí; se informa como error.

# Capítulo 8

## Fundamentos

### 8.1. La presión y la altura

Si no se conoce la presión local, se la estima en función de la altura con el modelo de la “US Standard Atmosphere 1976” [6], que en unidades SI establece, para  $-1524 \text{ m} \leq H \leq 11000 \text{ m}$ :

$$T = 288,15 \text{ K} - 0,0065 \frac{\text{K}}{\text{m}} H, \quad P = 101325 \text{ Pa} \left( \frac{288,15 \text{ K}}{T} \right)^{-5,255877}. \quad (8.1)$$

Así lo hace `psicro_prop_p`, y es la ecuación que liga las variables `alt` y `p`: dando una queda determinada la otra.

### 8.2. El modelo

Desde la versión 5.0-9 el modelo de propiedades por defecto es la formulación ASHRAE RP-1485 (sección 9.6.6). Lo que sigue describe el modelo histórico de psicro, que se conserva con la opción `--hw` y cuya termodinámica desarrolla el capítulo 9; las funciones básicas, las relaciones entre variables y el sistema de ecuaciones son los mismos en los cuatro modelos (RP-1485, histórico, gas ideal y TEOS-10, secciones 9.6.7 y 9.6.8), cambian los datos numéricos con que se evalúan.

La biblioteca modeliza al aire húmedo según las siguientes ecuaciones y criterios [7]:

**Aire húmedo.** Volumen: ecuación de estado con coeficientes viriales para mezclas de agua y aire [7] ( $f_z$ ). Entalpía y entropía: con las del aire y del vapor de agua a presión cero, integrando la ecuación de estado ( $H$  y  $S$ ).

**Agua.** Funciones de la temperatura para el volumen [8] ( $V_W$ ), la solubilidad del aire en agua [8] ( $K$ ) y la presión de vapor [1] ( $P_W$ ).

**Equilibrio.** Se obtiene una ecuación igualando los potenciales químicos de cada componente del aire húmedo con los componentes del agua con aire disuelto. Los potenciales se obtienen similarmente a la entalpía y entropía ( $f_s$ ).

En principio trabaja entre  $-60$  y  $90$  °C, pero algunas funciones dan problemas por debajo de los  $-30$  °C.

Los datos sobre el aire húmedo están contenidos en las funciones básicas  $f_s$ ,  $f_z$ ,  $H$ ,  $S$ ,  $P_W$ ,  $K$  y  $V_W$ . Sobre esa base se calculan:

$$W = \frac{PM_{H_2O}}{PM_{aire}} \frac{X_W}{1 - X_W}, \quad X_{Ws} = f_s P_W(t)/P, \quad (8.2)$$

$$WR = X_w/X_{Ws}, \quad GS = W/W(X_{Ws}), \quad (8.3)$$

$$VOL = f_z \frac{RT}{P} \frac{PM_{aire}}{1 - X_W}, \quad \text{y la ecuación de } TBH. \quad (8.4)$$

(En el código histórico  $f_z = 1$ : el volumen es el del gas ideal. El modelo RP-1485 usa la ecuación virial completa.) Cualquier otro dato lo encuentra resolviendo ecuaciones con las funciones anteriores. El capítulo 9 desarrolla la termodinámica y da los datos numéricos.

## Capítulo 9

# Termodinámica del aire húmedo

Se desarrollan someramente las relaciones termodinámicas del aire húmedo considerándolo como un gas real, y se construye el modelo numérico que permite calcular sus propiedades con precisión.

### 9.1. Gases de un componente

#### 9.1.1. Comportamiento isotérmico

Es razonable esperar que el volumen de cualquier fase a temperatura constante sea expresable como una serie de potencias de la presión. Como el volumen es una magnitud extensiva conviene referirlo a una porción de materia. Podemos elegir el número de moléculas  $N$  como medida de esa porción y entonces veremos que el término más significativo de esa serie es idéntico para todos los gases. Definiendo el mol como cierta cantidad entera de moléculas  $N_{Av}$ , tenemos que  $n = N/N_{Av}$ , donde  $N_{Av}$  es el número de Avogadro, una cantidad arbitraria definida históricamente para que en condiciones normales un gas ocupe cierto volumen. Por ello diremos que  $x = X/n$  si  $X$  es una magnitud extensiva. Entonces:

$$v = \frac{A_0}{P} + A_{00} + A_{000}P + \dots \quad (9.1)$$

Definimos

$$C_x = \frac{dA_x}{dT}, \quad B_x = \frac{d\frac{A_x}{T}}{d\frac{1}{T}}, \quad (9.2)$$

quedando  $B_x = A_x - TC_x$ . Todos estos coeficientes  $A_x$ ,  $B_x$ ,  $C_x$  son funciones solamente de la temperatura. Utilizando

$$\left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T = V, \quad H = G - T \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P, \quad (9.3)$$

integramos

$$g = g^* + A_0 \ln \frac{P}{P^*} + A_{00} (P - P^*) + \frac{1}{2} A_{000} (P^2 - P^{*2}) + \dots \quad (9.4)$$

y obtenemos

$$h = h^* + B_0 \ln \frac{P}{P^*} + B_{00} (P - P^*) + \frac{1}{2} B_{000} (P^2 - P^{*2}) + \dots \quad (9.5)$$

#### 9.1.2. El experimento de Joule

Consiste en hacer que el gas atraviese un tapón poroso en forma adiabática. Se demuestra que la entalpía del gas a la entrada es igual que a la salida,  $H(T_e, P_e) = H(T_s, P_s)$ . Si luego

calentamos o enfriamos el gas hasta que su temperatura a la salida sea igual que a la entrada, manteniendo la presión constante, tendremos que agregar un calor igual a

$$Q = H(T_e, P_s) - H(T_s, P_s) = H(T_e, P_s) - H(T_e, P_e) = H(P_s) - H(P_e). \quad (9.6)$$

Se observa experimentalmente que para todas las temperaturas el calor es aproximadamente proporcional a  $P_s - P_e$  y no muy sensible al valor de  $P_e$ . Sin duda no tiende a infinito cuando  $P_s$  tiende a cero. Debemos concluir que

$$B_0 = 0 \Rightarrow A_0 - T \frac{dA_0}{dT} = 0 \Rightarrow A_0 \text{ es proporcional a } T. \quad (9.7)$$

A la constante de proporcionalidad se la denomina  $R$  expresando la cantidad en moles, y  $k$ , constante de Boltzmann, expresándola en número de moléculas.  $R$  es independiente de la temperatura y del tipo de gas.

### 9.1.3. La función de Helmholtz

Aplicando lo anterior:

$$v = \frac{RT}{P} + A_{00} + A_{000}P + \dots, \quad P = \frac{RT}{v} \left( 1 + \frac{A_{00}}{v} + \frac{A_{00}^2 + RT A_{000}}{v^2} + \dots \right). \quad (9.8)$$

Integrando con respecto a  $V$ :

$$F = n\mu^* - nRT + nRT \ln \frac{nRT}{P^*V} + \frac{n^2 RT A_{00}}{V} + \dots \quad (9.9)$$

donde  $X^*$  significa que la variable es considerada a la presión de referencia  $P^*$ .

## 9.2. Gases de dos componentes

Partiendo de una representación  $(T, V)$  podemos extender la expresión de la energía libre  $F$  para dos componentes:

$$F = n_1 \left( \mu_1^* - RT + RT \ln \frac{n_1 RT}{P^* V} \right) + n_2 \left( \mu_2^* - RT + RT \ln \frac{n_2 RT}{P^* V} \right) + \frac{RT}{V} \left( n_1^2 A_{11} + 2n_1 n_2 A_{12} + n_2^2 A_{22} \right) + \dots \quad (9.10)$$

Como  $P = - \left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T, n_1, n_2}$  y  $n = n_1 + n_2$ ,

$$PV = nRT + \frac{RT}{V} \left( n_1^2 A_{11} + 2n_1 n_2 A_{12} + n_2^2 A_{22} \right) + \dots \quad (9.11)$$

Para llegar a  $V(P)$  despreciamos términos de segundo orden y reemplazamos los  $n$  por  $x_1 = n_1/n$  y  $x_2 = n_2/n$ :

$$Pv = RT + \left( x_1^2 A_{11} + 2x_1 x_2 A_{12} + x_2^2 A_{22} \right) P, \quad (9.12)$$

y podemos obtener los potenciales químicos, la función de Gibbs, la entalpía y la entropía.

### 9.3. El aire húmedo

Expondremos las ecuaciones para el aire húmedo, agregando un término extra para el vapor de agua.

$$\text{Volumen: } Pv = RT - \left( x_a^2 A_{aa} + 2x_a x_w A_{aw} + x_w^2 A_{ww} \right) P - x_w^3 A_{www} P^2 \quad (9.13)$$

$$\begin{aligned} \text{Potencial del agua: } \mu_w = \mu_w^o + RT \ln P + RT \ln x_w - 2P (x_w A_{ww} + x_a A_{aw}) \\ + P \left( x_w^2 A_{ww} + x_w x_a A_{aw} + x_a^2 A_{aa} \right) - \frac{3}{2} x_w^2 P^2 A_{www} \end{aligned} \quad (9.14)$$

$$\begin{aligned} \text{Potencial del aire: } \mu_a = \mu_a^o + RT \ln P + RT \ln x_a - 2P (x_a A_{aa} + x_w A_{aw}) \\ + P \left( x_w^2 A_{ww} + x_w x_a A_{aw} + x_a^2 A_{aa} \right) \end{aligned} \quad (9.15)$$

$$\text{Entalpía: } h = x_a h_a^o + x_w h_w^o - \left( x_a^2 B_{aa} + 2x_a x_w B_{aw} + x_w^2 B_{ww} \right) P - \frac{1}{2} x_w^3 B_{www} P^2 \quad (9.16)$$

$$\begin{aligned} \text{Entropía: } s = x_a s_a^o + x_w s_w^o - R \ln P - R (x_a \ln x_a + x_w \ln x_w) \\ + \left( x_a^2 C_{aa} + 2x_a x_w C_{aw} + x_w^2 C_{ww} \right) P + \frac{1}{2} x_w C_{www} P^2 \end{aligned} \quad (9.17)$$

Ecuaciones útiles:

$$h_x^o = \mu_x^o - T \frac{d\mu_x^o}{dT}, \quad s_x^o = -\frac{d\mu_x^o}{dT}, \quad h = g + Ts, \quad g = x_1 \mu_1 + x_2 \mu_2, \quad \mu_1 = g + x_2 \left( \frac{\partial g}{\partial x_1} - \frac{\partial g}{\partial x_2} \right). \quad (9.18)$$

### 9.4. Potenciales químicos del agua con aire disuelto

Cuando el agua pura está en equilibrio con su vapor,  $\mu^l(T, P_v(T)) = \mu^{vapor}(T, P_v(T))$ . Esta ecuación es importante pues conocemos  $P_v(T)$ . Fuera de la presión de equilibrio, a una temperatura dada,

$$\mu^l(T, P) = \mu^{vapor}(T, P_v(T)) + \int_{P_v(T)}^P v dP. \quad (9.19)$$

Considerando al agua como una mezcla líquida ideal de agua y aire,  $\mu_w^l = \mu^l + RT \ln y_w$ , y si  $v^l(T, P)$  es casi independiente de la presión para el agua líquida:

$$\mu_w^l = \mu^{vapor}(T, P_v(T)) + v^l (P - P_v(T)) + RT \ln y_w. \quad (9.20)$$

### 9.5. Equilibrio agua–aire

Para encontrar las concentraciones de equilibrio igualamos los potenciales químicos. La ecuación de potenciales del gas en ambas fases se reemplaza por la de la solubilidad del aire en agua,  $(1 - y_w) = KP_x$ . Igualando los potenciales químicos del agua en ambas fases y reemplazando  $y_w$  se llega, con  $P_x = x_w P$  y  $f_s = P_x / P_v$ , a

$$\begin{aligned} RT \ln f_s = P \left( 1 - \frac{P_x}{P} \right)^2 (2A_{aw} - A_{aa}) \\ + A_{ww} P \left( 2 \left( \frac{P_x}{P} - \frac{P_v}{P} \right) + \frac{P_v}{P} - \left( \frac{P_x}{P} \right)^2 \right) \\ + A_{www} P^2 \left( \frac{P_v}{P} \right)^2 \left( \frac{3}{2} (f_s^2 - 1) - \left( 1 - \frac{P_v}{P} f_s^3 \right) \right) \\ + V_l P \left( 1 - \frac{P_v}{P} \right) - RT \ln \left( 1 - k \left( 1 - f_s \frac{P_v}{P} \right) P \right) \end{aligned} \quad (9.21)$$

donde  $V_l$  es el volumen del líquido y  $k$  la solubilidad del aire en agua. Esta ecuación debe iterarse, pero haciendo  $f_s = 1$  se obtiene de entrada una primera aproximación bastante buena; así procede

[7], que escribe la ecuación con esta simplificación y reemplaza el logaritmo por una aproximación. Psicro itera desde  $f_s = 1$ , pues con muy pocos ciclos converge (`psicro_prop_fs`);  $x_s = f_s p_{ws}/p$ . Con la opción `--fs1` (o `calcula_fs1=1` en el entorno) se toma  $f_s = 1$ , como hacían las versiones 4.0 y 5.0 hasta la 5.0-7. Esta es la ecuación del modelo histórico (`--hw`); la formulación RP-1485 usa la misma estructura con los viriales actuales, la compresibilidad del líquido y la constante de Henry (sección 9.6.6); ambas dan  $f_s$  dentro de  $3 \cdot 10^{-4}$  entre  $-18$  y  $60$  °C a presión atmosférica.

## 9.6. Datos numéricos

### 9.6.1. Escalas y unidades

Se ha utilizado el SI (m, kg, s, K, mol) salvo indicación en contrario cuando se toman ecuaciones de otro artículo. La temperatura  $T$  es en K y  $t$  en °C, siendo la diferencia 273,15. Las constantes dependen del modelo: con RP-1485,  $R = 8,314472$  J/(mol K) (CODATA 2006),  $M_a = 0,028966$  y  $M_w = 0,018015268$  kg/mol (ASHRAE), de modo que  $M_w/M_a = 0,621945$ ; con `--hw`, las del código histórico:  $R = 8,31441$ ,  $M_a = 0,0289645$  y  $M_w = 0,01801534$  kg/mol. Las conversiones entre fracción molar  $x$  y humedad  $W$  usan las del modelo activo.

Todas las correlaciones de este capítulo (presión de vapor de Hyland y Wexler 1983, coeficientes viriales, entalpías y entropías ajustadas al Brochure de 1977, solubilidad y volumen del agua) están en la escala de temperatura IPTS-68; las de RP-1485 y las de la IAPWS, en ITS-90. Los termómetros y las tablas actuales usan la ITS-90. La diferencia  $t_{90} - t_{68}$  es pequeña y casi lineal: 0 en 0 °C,  $-0,005$  en 20 °C,  $-0,013$  en 50 °C y  $-0,026$  en 100 °C; como la presión de saturación crece un 5 a 7 % por kelvin, el efecto sobre la humedad de saturación va del 0,03 % a 20 °C al 0,13 % cerca del hervor. Desde la versión 5.0-6, psicro toma y devuelve las temperaturas (`t`, `td`, `tbh`, `th`) en ITS-90. Por dentro trabaja en la escala de las correlaciones del modelo activo: con RP-1485 es la ITS-90 y no hay conversión; con `--hw` es la IPTS-68 y las convierte con el polinomio de Rusby (1991) [9],  $t_{90} - t_{68} = \sum_{i=1}^8 b_i (t_{90}/630)^i$ , válido de  $-200$  a  $630$  °C, y de vuelta a la salida. La opción `--ipts68` declara que las temperaturas de entrada y salida están en IPTS-68, para comparar con tablas anteriores a 1990 como las del capítulo 10: con `--hw` suprime la conversión y con RP-1485 la invierte.

### 9.6.2. Los coeficientes viriales

$$A_{aa} \cdot 10^6 = -40,70 + 13116/T + 12 \cdot 10^7/T^3 \quad (9.22)$$

$$A_{ww} \cdot 10^6 = -33,97 + 55306/T \cdot 10^{72000/T^2} \quad (9.23)$$

$$A_{www} \cdot 10^6 \cdot 101325 = 0,0348/T^2 A_{ww}^3 \quad (9.24)$$

$$A_{aw} \cdot 10^6 = -29,53 + 0,00669 T \left(1 - e^{-c_1/T}\right) + c_2/T + c_3/T^2 + c_4/T^3 \quad (9.25)$$

con  $c_1 = 4416,5$  K,  $c_2 = 17546$  cm<sup>3</sup> K mol<sup>-1</sup>,  $c_3 = 95300$  cm<sup>3</sup> K<sup>2</sup> mol<sup>-1</sup> y  $c_4 = 8,515 \cdot 10^7$  cm<sup>3</sup> K<sup>3</sup> mol<sup>-1</sup>. Estos coeficientes pueden derivarse para obtener los  $B$  y  $C$ . (El manual de 2008 imprimía 0,0669 en el término de  $A_{aw}$ ; es una errata, el valor que usa el código y el que reproduce la tabla 10.1 es 0,00669.)

### 9.6.3. Entalpías y entropías a presión cero

Como se ve en la formulación, es posible referir todas estas variables al potencial químico; sin embargo se ha procedido tomando los datos de  $h$  y  $s$  independientemente, con ecuaciones

ajustadas a los datos de [7]:

$$h_w^o = -24,27107566 + 0,37621851 t + 0,0001057 t^2 + \frac{1675,81819168}{T} + 24,6462724 \ln T \quad (9.26)$$

$$h_a^o = 42,89510766 + 0,22881637 t + 0,00001861 t^2 + \frac{235,87232451}{T} + 3,84444182 \ln T \quad (9.27)$$

$$s_w^o = -0,153302928 - 0,000061635 t + 0,000000164 t^2 + \frac{1,28522117}{T} + 0,465553696 \ln T \quad (9.28)$$

$$s_a^o = 0,100182446 - 7,60756 \cdot 10^{-5} t + 9,536569128 \cdot 10^{-8} t^2 + \frac{2,307481401}{T} + 0,268927736 \ln T \quad (9.29)$$

Los errores estimados son 0,00038, 0,00045, 0,0000061 y 0,0000043 respectivamente. Estas variables hay que multiplicarlas por 4186,8 y por los pesos moleculares de cada sustancia para obtenerlas en julios por mol. Luego, para referirlas a cero grados, hay que restarles 502553,8088162648, 273231,0581312534, 12671,44847681913 y 6771,39668959704 respectivamente. Además hay que agregar a las del vapor de agua las magnitudes de evaporación en  $h$  y  $s$ : 2500770 y 9155,23.

#### 9.6.4. Presión de vapor del agua pura

Desde la versión 5.0-7 psicro usa por defecto las formulaciones de referencia de la IAPWS, en ITS-90 (con --hw la temperatura interna, en IPTS-68, se convierte antes de evaluarlas). Sobre agua líquida, de 273,16 K al punto crítico, la ecuación de saturación de Wagner y Pruß (1993) [10], que reproduce la ecuación de estado IAPWS-95 dentro del 0,01 %:

$$\ln \frac{p_s}{p_c} = \frac{T_c}{T} \left( a_1 \tau + a_2 \tau^{1,5} + a_3 \tau^3 + a_4 \tau^{3,5} + a_5 \tau^4 + a_6 \tau^{7,5} \right), \quad \tau = 1 - T/T_c, \quad (9.30)$$

con  $T_c = 647,096$  K,  $p_c = 22,064$  MPa y  $a_1 \dots a_6 = -7,85951783, 1,84408259, -11,7866497, 22,6807411, -15,9618719, 1,80122502$ . Sobre hielo Ih, por debajo del punto triple, la ecuación de sublimación de la IAPWS de 2011 (Wagner, Riethmann, Feistel y Harvey) [11]:

$$\ln \frac{p_{\text{subl}}}{p_t} = \frac{1}{\theta} \sum_{i=1}^3 a_i \theta^{b_i}, \quad \theta = T/T_t, \quad T_t = 273,16 \text{ K}, \quad p_t = 611,657 \text{ Pa}, \quad (9.31)$$

con  $a_i = -21,2144006, 27,3203819, -6,10598130$  y  $b_i = 0,003333333333, 1,20666667, 1,70333333$ . Ambas son las que usan la formulación ASHRAE RP-1485 y TEOS-10. Por encima del punto crítico, que solo alcanza un paso desmedido del solver, la curva se continúa linealmente para que el método pueda volver.

Fases. Psicro elige una sola fase según la temperatura, sin considerar la presión: por debajo del punto triple (0,01 °C con la curva IAPWS; 0 °C con Hyland y Wexler, y también para el volumen del agua y la solubilidad del aire de  $f_s$ ) la saturación es respecto del hielo, y por encima respecto del agua líquida. La presión no interviene porque la curva de fusión es casi vertical (0,0074 K por MPa) y porque en el punto de cambio las dos curvas de presión de vapor coinciden, así que el resultado es continuo. No se modela el agua sobreenfriada por debajo de 0 °C (convención meteorológica de la OMM): por decisión del autor, bajo cero es siempre hielo.

Con la opción --pvhw (o calcula\_pvhw=1 en el entorno) se usa la curva anterior de psicro, las ecuaciones de Hyland y Wexler de 1983 que figuran en [1], en IPTS-68. Hasta la versión 5.0-6 esa curva llevaba además un factor  $101325/101418,71683 = 0,999076$  que la bajaba entera un 0,092 % para que el agua hirviera exactamente a 100,000 °C; el factor se eliminó, porque el agua hierve a 101325 Pa a 99,974 °C en ITS-90 y las dos curvas dan ahora el punto triple correcto de 611,657 Pa. Entre 0 y 50 °C Hyland y Wexler difiere de la IAPWS en menos del 0,05 %; sobre hielo a -60 °C en 0,12 %. Para -100 a 0 °C:

$$\ln P_v = \frac{-5674,5359}{T} + 6,3925247 - 9,677843 \cdot 10^{-3} T + 6,22115701 \cdot 10^{-7} T^2 + 2,0747825 \cdot 10^{-9} T^3 - 9,484024 \cdot 10^{-13} T^4 + \quad (9.32)$$

Para 0 a 200 °C:

$$\ln P_v = \frac{-5800,2206}{T} + 1,3914993 - 4,8640239 \cdot 10^{-2} T + 4,1764768 \cdot 10^{-5} T^2 - 1,4452093 \cdot 10^{-8} T^3 + 6,5459673 \ln T \quad (9.33)$$

### 9.6.5. Solubilidad del aire en agua y volumen del agua

Se tomaron datos de [8], según lo recomienda [7]. Para temperaturas menores a 0 °C (hielo):

$$v^s = 0,001091011 + 0,000000188 t + 5,448261998 \cdot 10^{-10} t^2, \quad k = 0. \quad (9.34)$$

Para temperaturas mayores a 0 °C:

$$v^l = 0,000999514 + 0,000000045 t + 4,12205831 \cdot 10^{-9} t^2 \quad (9.35)$$

$$\frac{760}{k \cdot 10^7 \cdot 101325} = 9324,772749563001 + 6,170618604 t - 0,010863724 t^2 - 1661,580087409 \ln T + 0,000014808 t^3 \quad (9.36)$$

Estas ecuaciones fueron calculadas a partir de los datos tabulados; el error estimado es 0,00000029, 0,00000033 y 0,0057 respectivamente.

### 9.6.6. La formulación ASHRAE RP-1485

Desde la versión 5.0-9 el modelo de propiedades por defecto es el del proyecto de investigación ASHRAE RP-1485, de Herrmann, Kretzschmar y Gatley (2009) [12], que es la base de las tablas psicrométricas del *ASHRAE Handbook—Fundamentals* desde 2009 [13] y de la biblioteca CoolProp. Trata al aire húmedo como un gas real con la ecuación virial truncada en el tercer coeficiente, con los datos actuales de cada componente: el aire seco según la ecuación de estado de Lemmon y otros (2000) [14], el agua según la IAPWS-95 (Wagner y Prüss 2002) [15], el segundo virial cruzado  $B_{aw}$  de Harvey y Huang (2007) [16] y los terceros cruzados  $C_{aaw}$  y  $C_{aww}$  de Hyland y Wexler (1983). La presión de vapor es la de la sección 9.6.4. La implementación es el archivo `rp1485.c` de `calcula-6.0/src`, escrito en C99 con solo la biblioteca matemática, aportado por una revisión externa de septiembre de 2026 (dominio público, CC0; el material de la revisión está en `doc/rp1485`) y validado contra CoolProp:  $W$  dentro de  $10^{-6}$ , rocío y bulbo húmedo dentro de 0,005 K a presión ambiente. La batería de regresión lo contrasta además con una versión independiente en Python (`tests/rp1485_lite.py`).

Con  $y$  la fracción molar de agua,  $B_m = (1 - y)^2 B_{aa} + 2(1 - y)y B_{aw} + y^2 B_{ww}$  y  $C_m = (1 - y)^3 C_{aaa} + 3(1 - y)^2 y C_{aaw} + 3(1 - y)y^2 C_{aww} + y^3 C_{www}$ :

$$p = \frac{RT}{\bar{v}} \left( 1 + \frac{B_m}{\bar{v}} + \frac{C_m}{\bar{v}^2} \right), \quad (9.37)$$

$$\bar{h} = (1 - y) h_a^0 + y h_w^0 + RT \left[ \frac{B_m - T B'_m}{\bar{v}} + \frac{C_m - \frac{1}{2} T C'_m}{\bar{v}^2} \right], \quad (9.38)$$

$$\bar{s} = (1 - y) s_a^0 + y s_w^0 - R \left[ \frac{B_m + T B'_m}{\bar{v}} + \frac{C_m + T C'_m}{2\bar{v}^2} + (1 - y) \ln(1 - y) + y \ln y \right], \quad (9.39)$$

donde la prima es la derivada respecto de  $T$ ,  $\bar{v}$ ,  $\bar{h}$  y  $\bar{s}$  son molares y  $h^0$ ,  $s^0$  las funciones de gas ideal de cada componente (parte ideal de las ecuaciones de estado de Lemmon e IAPWS-95;  $s^0$  incluye  $-R \ln(p/p_0)$ ). El volumen se obtiene de la primera ecuación por Newton desde el gas ideal. El factor de corrección  $f_s$  sale de la ecuación 3.25 de RP-1485, que tiene la misma estructura que la de la sección 9.5 (potencial químico del agua en las dos fases) con los viriales de arriba, el volumen del agua líquida saturada o del hielo, la compresibilidad isotérmica del líquido y la constante de Henry del aire en agua de la IAPWS de 2004, y se resuelve por secante desde  $f_s = 1$ . La entalpía

del agua líquida que entra en la ecuación de bulbo húmedo es  $4186,8 t + (p - p_{ws})/\rho_l$  y la del hielo  $-333,4 + 2,1 t$  kJ/kg. Las constantes son  $R = 8,314472$  J/(mol K), con  $R_w = 8,314371$  en la ecuación de  $f_s$  (la constante con que se ajustó IAPWS-95),  $M_a = 0,028966$  y  $M_w = 0,018015268$  kg/mol; el punto triple es 273,16 K y 611,657 Pa, y por debajo de él la fase condensada es hielo (sección 9.6.4).

Referencia. Es la de la ASHRAE:  $h = s = 0$  para el aire seco a 0 °C y 101325 Pa y para el agua líquida saturada a 0 °C ( $h_g = 2500,9$  kJ/kg para el vapor saturado). Los ajustes de gas ideal de `rp1485.c` (los de CoolProp) dejan en ese estado un residuo de  $-8,6$  J/kg y  $-0,67$  J/(kg K); psicro lo evalúa una vez y lo descuenta del término del aire, proporcional a  $1 - y$ , de modo que el aire seco a 0 °C da exactamente cero. (El modelo histórico daba 0,28 kJ/kg hasta la 5.0-9 por un error del código, no de Hyland y Wexler: el término virial de la entalpía estaba calculado pero anulado por un `dif=0` de depuración, y la constante de referencia  $h_{ar}$  lo suponía; la 5.0-10 lo restituyó, véase la sección 10.)

Rango y detalles de implementación. Los coeficientes  $B_{aa}$ ,  $B_{ww}$ ,  $C_{aaa}$  y  $C_{www}$  son polinomios de grado 7 en  $T$  ajustados por CoolProp, válidos entre 130 y 370 K; fuera de ese intervalo divergen (el ajuste de  $B_{ww}$  cambia de signo a 390 K y con él la entalpía dejaba de ser monótona, lo que daba raíces espurias al solver a 170–230 °C). Psicro los prolonga linealmente desde el borde, con lo que  $B$  y  $B'$  quedan continuos y  $B - TB'$  constante; por encima de 97 °C las correcciones de gas real son por tanto una extrapolación, sin consecuencias a presión atmosférica, donde el aire hierve antes, y pequeñas a las presiones de psicro. Fuera de  $0 \leq y \leq 1$ , adonde solo llega un paso de Newton, los viriales se evalúan en el extremo y la parte ideal se extiende linealmente. El corchete de la búsqueda escalar del bulbo húmedo es ahora  $[-100, t]$  (era  $[-100, 250]$ ).

Comparación con el modelo histórico a 25 °C, 50 % y 101325 Pa:  $W$  0,009926 contra 0,009929;  $h$  50,42 contra 50,44 kJ/kg;  $v$  0,85779 contra 0,85817 m<sup>3</sup>/kg (gas ideal); rocío 13,868 en ambos; bulbo húmedo 17,884 contra 17,883 °C. El caso histórico `tbh=20,wr=.6,alt=0` da  $T = 25,61$  °C en los dos. Las opciones `--pvhw` y `--fs1` actúan sobre ambos modelos; `--hw` restituye por completo el comportamiento de la 5.0-8, incluidas las constantes y la escala interna IPTS-68.

### 9.6.7. El modelo de gas ideal de la ASHRAE

Con `--ideal` (o `calcula_ideal=1`) el sistema psicro usa las “perfect gas relationships” del capítulo de psicrometría del *ASHRAE Handbook—Fundamentals* (edición 2009 y siguientes), que son las de los libros de texto y de la mayoría de las calculadoras. Con  $p$  en Pa,  $t$  en °C y  $W$  en kg/kg de aire seco:

$$W_s = 0,621945 \frac{p_{ws}}{p - p_{ws}}, \quad W = 0,621945 \frac{p_w}{p - p_w}, \quad \phi = \frac{p_w}{p_{ws}}, \quad (9.40)$$

$$v = \frac{R_a T (1 + 1,607858 W)}{p}, \quad R_a = 287,042 \text{ J/(kg K)}, \quad (9.41)$$

$$h = 1,006 t + W(2501 + 1,86 t) \text{ kJ/kg}, \quad (9.42)$$

$$W = \frac{(2501 - 2,326 t^*) W_s^* - 1,006(t - t^*)}{2501 + 1,86 t - 4,186 t^*} \quad (9.43)$$

(bulbo húmedo  $t^*$ ; bajo 0 °C el numerador es  $(2830 - 0,24 t^*) W_s^*$  y el denominador  $2830 + 1,86 t - 2,1 t^*$ ). En la forma molar de psicro son exactamente:  $f_s = 1$  ( $x_s = p_{ws}/p$ ),  $\bar{v} = RT/p$ ,  $\bar{h} = (1 - x) M_a 1006 t + x M_w (2501000 + 1860 t)$  J/mol, y la ecuación termodinámica de bulbo húmedo de la sección 7.2 con esa  $h$  y  $h_l = 4,186 t^*$  ( $-329 + 2,1 t^*$  para el hielo), que es la ecuación de arriba escrita por mol; las constantes son las de RP-1485 ( $0,621945 = M_w/M_a$ ,  $R_a = R/M_a$ ). La presión de vapor es la IAPWS de la sección 9.6.4 (con `--pvhw`, Hyland y Wexler), en ITS-90; el rocío se obtiene invirtiendo  $x_s(t_d) = x$  con esa misma curva, en vez de las correlaciones polinómicas del Handbook. El Handbook no da la entropía; psicro toma la de la mezcla ideal con los mismos  $c_p$  constantes y las referencias ASHRAE (aire seco  $s = 0$  a 0 °C y 101325 Pa; agua

líquida saturada  $s = 0$  a  $0\text{ °C}$ , con lo que el vapor saturado a  $0\text{ °C}$  tiene  $s = 2501/273,15\text{ kJ}/(\text{kg K})$ ).

A  $25\text{ °C}$ ,  $50\%$  y  $101325\text{ Pa}$  el modelo ideal da  $W = 0,009883$  (RP-1485:  $0,009926$ , la diferencia es  $f_s$ ),  $h = 50,33\text{ kJ}/\text{kg}$  ( $50,42$ ),  $v = 0,85805\text{ m}^3/\text{kg}$  ( $0,85779$ ), rocío  $13,865\text{ °C}$  ( $13,868$ ) y bulbo húmedo  $17,889\text{ °C}$  ( $17,884$ ). El capítulo 10 discute estas diferencias.

### 9.6.8. TEOS-10 y el aire sobre agua de mar

Con `--teos10` (o `calcula_teos10=1`) el sistema psicro usa la formulación TEOS-10 del aire húmedo (Feistel, Wright, Kretzschmar, Hagen, Herrmann y Span, *Thermodynamic Properties of Sea Air*, Ocean Science 6, 2010) [17] a través de su biblioteca de referencia SIA (Sea-Ice-Air, versión 4.0.1, Fortran, incluida en `calcula-6.0/src/sia`; véase su LEAME). No hay diferencia de método con Hyland y Wexler ni con el capítulo 9: todo sale de una función de Helmholtz de la mezcla. La diferencia está en la función: TEOS-10 escribe  $f(A, T, \rho) = (1 - A)f_{\text{agua}} + Af_{\text{aire}} + f_{\text{mezcla}}$ , con  $f_{\text{agua}}$  la IAPWS-95 completa (válida para vapor y líquido),  $f_{\text{aire}}$  la de Lemmon y otros (2000) completa, y solo  $f_{\text{mezcla}}$  virial, con los mismos  $B_{aw}$ ,  $C_{aaw}$  y  $C_{aww}$  de RP-1485. El volumen sale de la densidad por Newton sobre  $\partial f/\partial \rho$ ,  $h$  y  $s$  de las derivadas, y la saturación de la igualdad de potenciales químicos del agua en la mezcla y en el líquido (IAPWS-95) o el hielo (IAPWS-06), sin curva de presión de vapor auxiliar ni factor  $f_s$  explícito: psicro define  $f_s = x_s p/p_{ws}$  a partir de la  $x_s$  que devuelve la SIA, y  $p_{ws}$  es también la igualdad de potenciales del agua pura. El puente entre C y Fortran es `sia/psicro_teos.F90` (funciones `teos_pws`, `teos_xs`, `teos_v`, `teos_h`, `teos_s`, `teos_hl`). Constantes:  $R = 8,314472$ ,  $M_a = 0,02896546$  (Picard y otros 2008),  $M_w = 0,018015268$ ; referencia  $h = s = 0$  para el aire seco a  $0\text{ °C}$  y  $101325\text{ Pa}$  y para el líquido en el punto triple. Escala ITS-90.

Los resultados coinciden con RP-1485 dentro de partes en  $10^5$  en el rango de psicro, que es lo esperable: a baja densidad la función completa se reduce a su desarrollo virial, del que RP-1485 toma sus coeficientes. A  $25\text{ °C}$ ,  $50\%$  y  $101325\text{ Pa}$ :  $W$   $0,009927$  (RP-1485:  $0,009926$ ),  $h$   $50,427\text{ kJ}/\text{kg}$  ( $50,424$ ),  $v$   $0,85781$  ( $0,85779$ ), rocío  $13,867$  ( $13,868$ ), bulbo húmedo  $17,884$  ( $17,884$ ). Lo que TEOS-10 agrega es rango (vale hasta  $5\text{ MPa}$  y en el líquido), rigor y el agua de mar.

Agua de mar. Sin `--sal`, `--teos10` es un modelo completo de aire húmedo sobre agua pura (o hielo), alternativo a RP-1485, y es el que corre la batería de regresión; la salinidad es 0 por defecto y solo entra si se la pide. Con `--sal=S` ( $S$  en  $\text{g}/\text{kg}$  de salinidad absoluta, 35 para el océano) la saturación se calcula sobre agua de mar con la función de Gibbs IAPWS-08 [18] (igualdad del potencial químico del agua en el aire y en la solución):  $x_s$  es la del aire en equilibrio con esa agua, y con ella la humedad relativa, el rocío y el bulbo húmedo. Como la actividad del agua de mar de  $35\text{ g}/\text{kg}$  es  $0,981$ , el mismo aire de  $25\text{ °C}$  y  $x = 0,01571$  tiene  $w_r = 0,500$  sobre agua pura y  $0,509$  sobre agua de mar, y su rocío pasa de  $13,87$  a  $14,16\text{ °C}$ . La presión  $p_{ws}$  (variable `pv`) sigue siendo la del agua pura; la salinidad va en  $f_s$ . Vale solo con líquido (sobre el punto triple) y en el rango de IAPWS-08,  $0$  a  $120\text{ g}/\text{kg}$ . Importante: es agua de mar de composición de referencia (la proporción de sales del océano); una solución de una sola sal ( $\text{NaCl}$ ,  $\text{CaCl}_2$ ,  $\text{LiCl}$ ) tiene otra actividad y no se representa con esta opción. El líquido de la ecuación de bulbo húmedo sigue siendo agua pura.

Detalles de implementación. La SIA devuelve un valor de error fuera de su rango (mezcla entre  $193$  y  $473\text{ K}$ ) y cuando su iteración de densidad no converge, lo que ocurre en estados muy sobresaturados ( $x = 0,01$  a  $-60\text{ °C}$ ,  $x = 1$  a  $25\text{ °C}$ ) por los que puede asomarse un paso de Newton, y sobre el punto de ebullición, donde no hay saturación. En esos casos psicro usa el valor de RP-1485 para que el solver siga teniendo una función continua; los estados convergidos, que son físicos, quedan siempre dentro de la SIA. Cada evaluación de la SIA cuesta decenas de microsegundos y psicro hace cientos por punto: un punto tarda unos  $50\text{ ms}$  en vez de  $1\text{ ms}$ , lo que se nota solo en las cartas de Puyuspa. Compilar psicro requiere gfortran y el ejecutable queda enlazado con libgfortran.

## 9.7. Forma exacta y forma aproximada

Las funciones de la biblioteca que reciben el argumento `pre` calculan con la forma exacta descripta (coeficientes viriales) salvo cuando `pre` vale  $-1$ , que selecciona la forma aproximada clásica de gas ideal para la entalpía,

$$h = (1006,05 + 1805 w \cdot 0,9998) t + h_{fg} \cdot 0,9998 w, \quad (9.44)$$

con  $w$  la humedad absoluta. El programa y Puyuspa usan siempre la forma exacta; la aproximada solo es accesible desde la biblioteca. La tabla 10.2 muestra la diferencia entre ambas en la humedad de saturación.

## Capítulo 10

# Exactitud de las fórmulas

Se presenta una comparación entre Psicro y [7], [1] y [19]. También se compara el cálculo exacto y aproximado de  $W_s$ . Las presiones y temperaturas elegidas son las que figuran en la bibliografía y corresponden a números enteros en unidades inglesas. El factor de corrección a la presión de vapor  $f_s$  está en la tabla 10.1; la presión de vapor y la humedad de saturación en la 10.2; el volumen en la 10.3; la entalpía en la 10.4 y la entropía en la 10.5. Las columnas “Calc.” se recalcularon con Psicro 5.0-9, es decir con la formulación RP-1485 de la sección 9.6.6, entrando las temperaturas tal cual en ITS-90 (las referencias de 1985 están en IPTS-68; la diferencia llega a 0,013 K a 50 °C, un 0,07 % en  $p_{ws}$ , y explica que la presión de vapor calculada quede un 0,02 % por encima de la referencia). Las columnas del vapor de agua puro son las del vapor saturado, evaluado en  $p = p_{ws}$ . La entalpía y la entropía del aire seco a 0 °C dan exactamente cero. Con el modelo histórico (--hw) la entalpía daba 0,28 kJ/kg hasta la 5.0-9: no es un defecto de Hyland y Wexler sino un error del código, que calculaba el término virial de la entalpía,  $-p(x_a^2 B'_{aa} + 2x_a x_w B'_{aw} + x_w^2 B'_{ww} + \dots)$  con  $B' = B - T dB/dT$ , y a continuación lo anulaba con un dif=0 de depuración, mientras que la constante de referencia  $h_{ar} = 273231,06$  de la sección anterior se había ajustado con ese término (para el aire seco a 0 °C y 1 atm vale  $-276$  J/kg, exactamente lo que sobraba). La 5.0-10 lo restituyó y con --hw las entalpías quedan como sigue: 0,000, 10,062, 20,126, 30,193, 40,264 y 50,339 kJ/kg para el aire seco de 0 a 50 °C (referencia: 0,000, 10,059, 20,121, 30,185, 40,253, 50,326) y 9,477, 29,365, 57,582, 100,052, 166,757 y 275,453 para el saturado (9,473, 29,352, 57,555, 100,006, 166,683, 275,345). La entropía del modelo histórico no lleva término virial: la expresión que había en el código era la de la entalpía, no la de la entropía, y las constantes de referencia  $s_{ar}$  y  $s_{wr}$  se ajustaron sin él, con lo que la tabla 10.5 ya coincidía con la referencia a cuatro decimales; la entropía residual del gas real ( $-0,0008$  kJ/(kg K) para el aire seco a 1 atm) queda absorbida en la referencia. La diferencia entre las columnas “Calc.” y “Calc. aprox.” de  $W_s$  en la tabla 10.2 es el factor de corrección  $f_s$ : desde la 4.0 hasta la 5.0-7 el código tomaba  $x_s = p_{ws}/p$  sin él (un 0,4 a 0,5 % en  $W$ ); la 5.0-8 lo reincorporó y la tabla 10.1 lo comprueba contra el Brochure, ahora con la ecuación 3.25 de RP-1485.

### 10.1. Contraste contra datos experimentales

Las tablas anteriores comparan contra tablas que son a su vez salidas de un modelo (las de la ASHRAE de 1985 son Hyland y Wexler), así que prueban la implementación, no la física. Para contrastar los cuatro modelos contra mediciones hay un programa aparte, `tests/contrast.py`, que lee los datos de `doc/datos-experimentales` (un CSV por publicación, con temperatura, presión, magnitud, valor e incertidumbre; el formato y las fuentes están en su LEAME) y evalúa cada modelo en cada punto, informando por fuente, magnitud y modelo el desvío medio, el cuadrático medio, el máximo y cuántos puntos caen dentro de la incertidumbre del dato. Las fuentes previstas son las mediciones del factor  $f_s$  (Hyland 1975 [20], Greenspan 1976 [21], Wylie

| $t$ (°C) | Presión (kPa) |          |         |          |         |          |
|----------|---------------|----------|---------|----------|---------|----------|
|          | 33,864        |          | 101,592 |          | 108,364 |          |
|          | Calc.         | Ref. [7] | Calc.   | Ref. [7] | Calc.   | Ref. [7] |
| -17,78   | 1,00164       | 1,0016   | 1,00457 | 1,0047   | 1,00487 | 1,0051   |
| -6,67    | 1,00165       | 1,0016   | 1,00429 | 1,0045   | 1,00455 | 1,0048   |
| 4,44     | 1,00176       | 1,0018   | 1,00408 | 1,0044   | 1,00431 | 1,0047   |
| 15,56    | 1,00198       | 1,0020   | 1,00411 | 1,0044   | 1,00432 | 1,0047   |
| 26,67    | 1,00232       | 1,0023   | 1,00434 | 1,0046   | 1,00453 | 1,0049   |
| 37,78    | 1,00268       | 1,0027   | 1,00475 | 1,0050   | 1,00493 | 1,0053   |
| 48,89    | 1,00286       | 1,0031   | 1,00529 | 1,0055   | 1,00548 | 1,0057   |
| 60       | 1,00236       | —        | 1,00583 | 1,0059   | 1,00604 | 1,0063   |

Cuadro 10.1: Comprobación de  $f_s$ .

| $t$ (°C) | $P_v$ (kPa) |          | $W_s$    |          |           |              |
|----------|-------------|----------|----------|----------|-----------|--------------|
|          | Calc.       | Ref. [1] | Calc.    | Ref. [1] | Ref. [19] | Calc. aprox. |
| 0        | 0,61115     | 0,6112   | 0,003790 | 0,003789 | 0,003788  | 0,003774     |
| 10       | 1,22811     | 1,2280   | 0,007662 | 0,007661 | 0,007658  | 0,007631     |
| 20       | 2,33919     | 2,3389   | 0,014760 | 0,014758 | 0,01475   | 0,014698     |
| 30       | 4,24692     | 4,2462   | 0,027334 | 0,027329 | 0,02731   | 0,027209     |
| 40       | 7,38511     | 7,3838   | 0,049150 | 0,049141 | 0,04911   | 0,048894     |
| 50       | 12,35248    | 12,3503  | 0,086873 | 0,086858 | 0,08678   | 0,086348     |

Cuadro 10.2: Comprobación de la presión de vapor y la humedad de saturación.

| $t$ (°C) | $v_{a.seco}$ (m <sup>3</sup> /kg) |          | $v_{a.sat}$ (m <sup>3</sup> /kg) |          |
|----------|-----------------------------------|----------|----------------------------------|----------|
|          | Calc.                             | Ref. [1] | Calc.                            | Ref. [1] |
| 0        | 0,77334                           | 0,7734   | 0,77804                          | 0,7781   |
| 10       | 0,80175                           | 0,8018   | 0,81160                          | 0,8116   |
| 20       | 0,83015                           | 0,8302   | 0,84979                          | 0,8498   |
| 30       | 0,85855                           | 0,8586   | 0,89614                          | 0,8962   |
| 40       | 0,88694                           | 0,8870   | 0,95673                          | 0,9568   |
| 50       | 0,91532                           | 0,9154   | 1,04251                          | 1,0425   |

Cuadro 10.3: Comprobación del volumen.

| $t$ (°C) | $H_{a.seco}$ (kJ/kg) |          | $H_{a.sat}$ (kJ/kg) |          | $H_{H_2O vap}$ (kJ/kg) |          |
|----------|----------------------|----------|---------------------|----------|------------------------|----------|
|          | Calc.                | Ref. [1] | Calc.               | Ref. [1] | Calc.                  | Ref. [1] |
| 0        | 0,0000               | 0,000    | 9,4746              | 9,473    | 2500,960               | 2500,77  |
| 10       | 10,0557              | 10,059   | 29,3512             | 29,352   | 2519,284               | 2519,12  |
| 20       | 20,1162              | 20,121   | 57,5571             | 57,555   | 2537,531               | 2537,38  |
| 30       | 30,1817              | 30,185   | 100,0156            | 100,006  | 2555,670               | 2555,52  |
| 40       | 40,2523              | 40,253   | 166,7067            | 166,683  | 2573,640               | 2573,49  |
| 50       | 50,3283              | 50,326   | 275,3865            | 275,345  | 2591,370               | 2591,27  |

Cuadro 10.4: Comprobación de la entalpía.

| $t$ (°C) | $S_{a.seco}$ (kJ/kg K) |          | $S_{a.sat}$ (kJ/kg K) |          | $S_{H_2O vap}$ (kJ/kg K) |          |
|----------|------------------------|----------|-----------------------|----------|--------------------------|----------|
|          | Calc.                  | Ref. [1] | Calc.                 | Ref. [1] | Calc.                    | Ref. [1] |
| 0        | 0,00000                | 0,0000   | 0,03643               | 0,0364   | 9,15450                  | 9,1553   |
| 10       | 0,03612                | 0,0362   | 0,10779               | 0,1078   | 8,89866                  | 8,8995   |
| 20       | 0,07101                | 0,0711   | 0,20560               | 0,2057   | 8,66515                  | 8,6658   |
| 30       | 0,10475                | 0,1048   | 0,34802               | 0,3481   | 8,45147                  | 8,4518   |
| 40       | 0,13741                | 0,1375   | 0,56483               | 0,5649   | 8,25544                  | 8,2554   |
| 50       | 0,16906                | 0,1692   | 0,90781               | 0,9077   | 8,07506                  | 8,0747   |

Cuadro 10.5: Comprobación de la entropía.

y Fisher 1996 [22]), que son las que distinguen a los modelos en  $W$ ; la presión de vapor en el punto triple (Guildner, Johnson y Jones 1976 [23]); la densidad del aire húmedo según la fórmula CIPM-2007 (Picard, Davis, Gläser y Fujii 2008 [24], metrología de masa, incertidumbre relativa  $2,2 \cdot 10^{-5}$ ), que el programa evalúa sobre una grilla de 48 estados entre 15 y 27 °C, 60 y 110 kPa y humedad relativa 0 a 0,8; y la humedad de equilibrio sobre soluciones salinas (Greenspan 1977 [25]) para la opción `--sal`. Al cierre de esta edición están cargados el punto triple, la fórmula CIPM, la formulación de Hyland 1975 (204 valores de su tabla 8, de 0,25 a 20 bar, con sus incertidumbres) y sus siete mediciones directas a 20–35 bar, y Wylie y Fisher 1996: sus 15 mediciones de 1,5 a 14 MPa y los 23 valores de su formulación de 0,1 a 5 MPa; faltan las sales. Resultado (desvíos calculado menos dato; los de  $f$  absolutos en unidades de  $10^{-4}$ , los demás relativos):

| Dato                                                          | Modelo        | Desvío medio         | Máximo               | Dentro d |
|---------------------------------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|----------|
| Densidad CIPM-2007, 48 estados, 15–27 °C                      | TEOS-10       | $+1,3 \cdot 10^{-5}$ | $+1,9 \cdot 10^{-5}$ | 48/48    |
|                                                               | RP-1485       | $+3,6 \cdot 10^{-5}$ | $+4,1 \cdot 10^{-5}$ | 0/48     |
|                                                               | Hyland-Wexler | $-3,6 \cdot 10^{-4}$ | $-5,0 \cdot 10^{-4}$ | 0/48     |
|                                                               | Gas ideal     | $-3,1 \cdot 10^{-4}$ | $-4,6 \cdot 10^{-4}$ | 0/48     |
| $p_{ws}$ punto triple, Guildner 1976                          | los cuatro    | $< 4 \cdot 10^{-6}$  |                      | 1/1      |
| $f$ , formulación de Wylie-Fisher 1996, 23 valores, 0,1–5 MPa | RP-1485       | +2,5                 | +76                  | 8/23     |
|                                                               | TEOS-10       | +6,2                 | +53                  | 12/23    |
|                                                               | Hyland-Wexler | +94                  | +271                 | 1/23     |
|                                                               | Gas ideal     | −604                 | −2003                | 0/23     |
| $f$ , formulación de Hyland 1975, 204 valores, 0,25–20 bar    | RP-1485       | +6,6                 | +107                 | 137/204  |
|                                                               | TEOS-10       | +7,2                 | +103                 | 100/204  |
|                                                               | Hyland-Wexler | +18                  | +107                 | 30/204   |
|                                                               | Gas ideal     | −170                 | −1240                | 0/204    |
| $f$ , mediciones de Wylie-Fisher 1996, 15 puntos, 1,5–14 MPa  | RP-1485       | +159                 | +628                 | 4/15     |
|                                                               | TEOS-10       | +85                  | +271                 | 4/15     |
|                                                               | Hyland-Wexler | +488                 | +1179                | 0/15     |
|                                                               | Gas ideal     | −2041                | −5135                | 0/15     |
| $f$ , mediciones de Hyland 1975, 7 puntos, 20–35 bar          | RP-1485       | +32                  | +69                  | 1/7      |
|                                                               | TEOS-10       | +32                  | +67                  | 1/7      |
|                                                               | Hyland-Wexler | +136                 | +207                 | 0/7      |
|                                                               | Gas ideal     | −815                 | −1268                | 0/7      |

Lo que importa para psicro es la presión atmosférica, y ahí el cuadro es nítido. Contra la formulación de Wylie y Fisher a 0,1 MPa, de 0 a 80 °C (incertidumbre  $1,3 \cdot 10^{-4}$  con  $k = 1$ ), RP-1485 queda dentro de  $\pm 0,4 \cdot 10^{-4}$ , TEOS-10 entre  $+0,4$  y  $+0,8 \cdot 10^{-4}$ , el modelo histórico entre  $+2$  y  $+3 \cdot 10^{-4}$  (fuera: son los viriales de 1973 del Brochure) y el gas ideal entre  $-40$  y  $-58 \cdot 10^{-4}$  (el  $f_s$  que le falta). Contra la formulación de Hyland 1975 a 1 bar, RP-1485 queda  $+1,3 \cdot 10^{-4}$  y TEOS-10  $+2 \cdot 10^{-4}$ , al borde de la incertidumbre (optimista) que Hyland asignó: Hyland es  $1,5 \cdot 10^{-4}$  más bajo que Wylie y Fisher, que lo señalan en su artículo, y Harvey y

Huang 2007, los  $B_{aw}$  de RP-1485, se ajustaron a estos últimos. En la densidad, el histórico y el gas ideal, que toman el volumen como gas ideal, quedan 15 veces fuera de la incertidumbre de la CIPM; TEOS-10 cae dentro en todos los estados, en parte porque usa la misma masa molar del aire que la CIPM (Picard 2008), y RP-1485 apenas afuera por su  $M_a$  de 0,028966 contra 0,02896546.

A presiones de 1,5 a 14 MPa (las mediciones de Hyland y de Wylie y Fisher) todos los modelos se van por encima de los datos, cada vez más con la presión: RP-1485 y TEOS-10 truncan la mezcla en el tercer virial y no están hechos para eso (RP-1485 declara 5 MPa), y psicro tampoco. Esas filas sirven para marcar el límite, no para elegir modelo.

## Capítulo 11

# Propagación de errores en la medición de humedad

### Resumen

Se analiza la propagación de errores en el cálculo de la humedad del aire cuando se miden la temperatura y la temperatura de bulbo húmedo. El conocimiento preciso de la humedad absoluta es de fundamental importancia para la realización de balances de masa y energía y en la determinación de constantes de transferencia de masa en sistemas que utilizan el aire húmedo y donde no se pueda medir la cantidad transferida por otros métodos. Se analiza el efecto de los distintos factores de error, como la presión y el método de cálculo usado.

### 11.1. Introducción

Para determinar la humedad o diferencias de humedad con psicrómetros se miden dos temperaturas, la de bulbo húmedo y la de bulbo seco. Conocidas las mismas hay que realizar una serie de cálculos para determinar la humedad, que pueden efectuarse con métodos de distinta aproximación. Se ha contrastado el cálculo con las fórmulas de los gases perfectos contra el cálculo más exacto [7], que utiliza ecuaciones de gases reales y considera varios factores de corrección; para este último se desarrolló la biblioteca de rutinas y el programa Psicro que automatiza el procedimiento.

En los cálculos de propagación de errores se utilizarán las fórmulas que consideran al aire húmedo como gas ideal. Se ha notado como  $Err_X$  a los errores existentes en las correlaciones de las distintas propiedades del aire húmedo. Los errores de las fórmulas exactas serán estimados como la diferencia entre los resultados entregados por Psicro y las tablas de ASHRAE; en definitiva estos errores demuestran ser insignificantes comparados con los otros.

### 11.2. Las fuentes del error

#### 11.2.1. La temperatura: medición y error

El error en la medición de temperatura se divide en dos sumandos: el error de cada medida, asociado con el tipo de termómetro, y el error asociado con la precisión del sistema de calibración, uniforme para todos los termómetros:  $\Delta_T t_i = \Delta t_i + \Delta_C t$ . El  $\Delta_C t$ , error en la calibración, se estima en una décima de grado, lo que se puede conseguir con un sistema de calibración basado en termómetros certificados. El error de cada medida se estima en seis centésimas de grado, alcanzable con resistencias de platino o con un buen termistor.

### 11.2.2. Errores en la temperatura termodinámica de bulbo húmedo

Frecuentemente se utiliza la temperatura del bulbo húmedo como la temperatura termodinámica de bulbo húmedo. La diferencia causada por esta suposición disminuye considerablemente si se usan puntas chicas, blindadas y con una corriente de aire aspirada de buena velocidad [19]. Se estima el error como  $\pm 0,3$  °C, válido en las condiciones especificadas. El cálculo de la propagación se realiza bajo la mencionada suposición.

### 11.2.3. La presión atmosférica: medición, estimación y error

Se toma como ejemplo la ciudad de Salta (El Aybal), a 1220 m de altura. La presión atmosférica estimada según el modelo de la atmósfera estándar (sección 8.1) es de 87503,8 Pa. En realidad la presión oscila entre 89000 y 85700 Pa, con medias mensuales entre 875,7 y 878,8 hPa para enero y agosto y anual de 877,4 hPa. Si para determinar la humedad estimamos la presión como la media anual podemos cometer un error  $\Delta_e P_a / P_a = 0,02$ . Si en cambio se mide con un barómetro de mercurio se puede llegar a  $\pm 13$  Pa, o sea  $\Delta_m P_a / P_a = 0,00015$ . El error es mucho mayor si no se toma en cuenta la altitud del lugar; ese error no se calcula.

### 11.2.4. El error en la presión de vapor

$P_v = P_v(t) \pm Err_{P_v}$ . No se estima  $Err_{P_v}$  pues  $P_v$  se utiliza solo para calcular  $W$  y se estima  $Err_W$  globalmente. Diferenciando la regresión de  $P_v$  en sus valores extremos:

| $t$ | $P_v$    | $\frac{1}{P_v} \frac{dP_v}{dt}$ |
|-----|----------|---------------------------------|
| 10  | 1227,94  | 0,067                           |
| 50  | 12309,60 | 0,050                           |

### 11.2.5. El error en la humedad de saturación

$$W = k \frac{P_v}{P_a - P_v} \pm Err_W, \quad k = \frac{PM_{H_2O}}{PM_{aire}} = \frac{18,013}{28,964} = 0,622. \quad (11.1)$$

Del capítulo 10 se determina que  $Err_W / W = 3 \cdot 10^{-4}$  si se utiliza la fórmula exacta y  $Err_W / W = 6 \cdot 10^{-3}$  con la aproximada. Propagando errores:

$$\frac{dW}{W} = \frac{1}{1 - \frac{P_v}{P_a}} \left[ \left( 1 - 2 \frac{P_v}{P_a} \right) \frac{dP_v}{P_v} + \frac{dP_a}{P_a} \right] \pm Err_W. \quad (11.2)$$

Rangos de variación:

| $P_a$ | $P_v$ | $\frac{P_v}{P_a}$ | $1 - 2 \frac{P_v}{P_a}$ | $\frac{1}{1 - P_v/P_a}$ | $\frac{1 - 2P_v/P_a}{1 - P_v/P_a}$ |
|-------|-------|-------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------------------|
| 89000 | 1228  | 0,014             | 0,972                   | 1,0284                  | 0,945                              |
| 85700 | 12300 | 0,143             | 0,714                   | 1,1669                  | 0,833                              |

### 11.2.6. Errores en la entalpía

De [19] se toma la ecuación aproximada a efectos de propagar errores:

$$H = 1005 t + 1884 w t + 2502300 w \pm Err_H, \quad (11.3)$$

con  $Err_H / H = 1,2 \cdot 10^{-5}$  según el capítulo 10; no se estima el error de las fórmulas aproximadas para la entalpía. Derivando,  $\frac{\partial H}{\partial t} = 1005 + 1884 w$  y  $\frac{\partial H}{\partial w} = 2502300 + 1884 t$ . Es necesaria una función inversa de la entalpía,  $WH(t, H)$ , con

$$\frac{\partial WH}{\partial t} = - \frac{\frac{\partial H}{\partial t}}{\frac{\partial H}{\partial w}}, \quad \frac{\partial WH}{\partial H} = \frac{1}{\frac{\partial H}{\partial w}}, \quad Err_{WH} = \frac{Err_H}{\frac{\partial H}{\partial w}}. \quad (11.4)$$

Se tabulan con su rango de variación:

| $t$ | $W$   | $\frac{\partial H}{\partial t}$ | $\frac{\partial H}{\partial w}$ | $\frac{\partial H}{\partial t} / \frac{\partial H}{\partial w}$ | $H$    | $H / \frac{\partial H}{\partial t}$ |
|-----|-------|---------------------------------|---------------------------------|-----------------------------------------------------------------|--------|-------------------------------------|
| 10  | 0,006 | 1016                            | 2521140                         | 0,000403                                                        | 25176  | 0,009                               |
| 10  | 0,02  | 1043                            | 2521140                         | 0,000414                                                        | 60473  |                                     |
| 50  | 0,006 | 1005                            | 2596500                         | 0,000391                                                        | 65829  |                                     |
| 50  | 0,02  | 1043                            | 2596500                         | 0,000406                                                        | 102180 | 0,039                               |

Se toman  $\frac{\partial H}{\partial w} = 2521140$  (el menor) y  $\frac{\partial H}{\partial t} / \frac{\partial H}{\partial w} = 0,000414$  (el mayor). Se hace notar que el punto 10 °C, 0,02 no existe, y que los valores están sobreestimados. El cociente máximo entre dos posibles  $\frac{\partial H}{\partial t} / \frac{\partial H}{\partial w}$  es 1,06, y en realidad el cociente que interesa es siempre entre dos puntos con la misma  $H$ ; se lo establece igual a 1.

### 11.3. Errores en la determinación de humedad

Además de calcular con las ecuaciones aproximadas se desprecia la entalpía del agua involucrada; entonces  $W = WH(t_s, H(t_w, W(P, P_v(t_w))))$ . Se nota  $f(s)$  la función evaluada en el aire con su humedad y temperatura  $t_s$ , y  $f(w)$  la evaluada para el aire saturado a  $t_w$ ; luego se aproxima igualando  $f(w) = f(s) = f$ . Las primeras diferenciales:

$$\Delta W = -\frac{\frac{\partial H(s)}{\partial t}}{\frac{\partial H(s)}{\partial W}} \Delta t_s + \frac{\frac{\partial H(w)}{\partial w}}{\frac{\partial H(s)}{\partial w}} \Delta w(P_v, P_a) + \frac{\frac{\partial H(w)}{\partial t}}{\frac{\partial H(s)}{\partial W}} \Delta t_w + \frac{Err_H(s) + Err_H(w)}{\frac{\partial H(s)}{\partial W}} \quad (11.5)$$

Aproximando y desarrollando  $\Delta w(P_v)$ :

$$\Delta W = \frac{\frac{\partial H}{\partial t}}{\frac{\partial H}{\partial W}} (\Delta t_w - \Delta t_s) + \frac{W}{1 - \frac{P_v}{P_a}} \left[ \left( 1 - 2 \frac{P_v}{P_a} \right) \frac{1}{P_v} \frac{dP_v}{dt} \Delta t_w + \frac{\Delta P_a}{P_a} + \frac{Err_W}{W} \right] + 2 \frac{Err_H}{\frac{\partial H}{\partial W}} \quad (11.6)$$

Ordenando por fuente de error:

$$\begin{aligned} \Delta w = \Delta t_w & \left[ \frac{\frac{\partial H}{\partial t}}{\frac{\partial H}{\partial W}} + W \left( \frac{1 - 2P_v/P_a}{1 - P_v/P_a} \right) \frac{1}{P_v} \frac{dP_v}{dt} \right] \\ & + \Delta t_s \frac{\frac{\partial H}{\partial t}}{\frac{\partial H}{\partial W}} + \Delta_c t W \left( \frac{1 - 2P_v/P_a}{1 - P_v/P_a} \right) \frac{1}{P_v} \frac{dP_v}{dt} \\ & + \frac{\Delta P_a}{P_a} \left( \frac{W}{1 - P_v/P_a} \right) + \frac{Err_W}{1 - P_v/P_a} + \frac{2 Err_H}{\frac{\partial H}{\partial w}} \end{aligned}$$

### 11.4. Conclusiones

En la tabla 11.1 se analizan los valores y se maximiza el error relativo en  $w$  para  $w$  entre 0,006 y 0,02.

Los términos de  $\Delta_c t$  y de  $\Delta P_a$  se hacen cero para mediciones de diferencias de humedad, multiplicándose los otros por dos; y para procesos adiabáticos donde no varía  $t_w$  se hace cero ese término. Como comprobación se corrió Psicro y se calculó la humedad en función de  $t$ ,  $t_w$  y la presión, cambiándolas de a una; además se simuló una variación de la temperatura de referencia modificando  $t$  y  $t_w$  simultáneamente. Los resultados están en la tabla 11.2; no coinciden exactamente porque los cálculos analíticos se hacen en forma genérica para toda la zona de

| Error                | Valor               | $\Delta w / \Delta M$         | máx ( $\frac{\Delta w}{w} \frac{1}{\Delta M}$ ) | 100 $\Delta w / w$ |
|----------------------|---------------------|-------------------------------|-------------------------------------------------|--------------------|
| $\Delta t_w$         | 0,36                | $4,1 \cdot 10^{-4} + 0,067 w$ | 0,14                                            | 5,04 %             |
| $\Delta t_s$         | 0,06                | $4,1 \cdot 10^{-4}$           | 0,07                                            | 0,41 %             |
| $\Delta_c t$         | 0,1                 | $0,067 w$                     | 0,07                                            | 0,67 %             |
| $\Delta_m P_a / P_a$ | 0,00015             | $1,17 w$                      | 1,17                                            | 0,02 %             |
| $\Delta_e P_a / P_a$ | 0,02                | $1,17 w$                      | 1,17                                            | 2,34 %             |
| $Err_H / H$          | $1,2 \cdot 10^{-5}$ | 0,08                          | 13,30                                           | 0,02 %             |
| $Err_{W_{ex}} / W$   | $3 \cdot 10^{-4}$   | $1,2 w$                       | 1,20                                            | 0,04 %             |
| $Err_{W_{ap}} / W$   | $6 \cdot 10^{-3}$   | $1,2 w$                       | 1,20                                            | 0,72 %             |

Cuadro 11.1: Cálculo de errores.

| Variable variada | Cantidad | $w$  | $\Delta w / w$ |
|------------------|----------|------|----------------|
| $t_w$            | +0,36    | 9,02 | 4,60 %         |
| $t$              | -0,06    | 8,65 | 0,34 %         |
| $t_c$            | +0,10    | 8,69 | 0,81 %         |
| $P_a$            | -2 %     | 8,84 | 2,55 %         |

Cuadro 11.2: Cálculo de errores con Psicro.

trabajo. El valor de referencia se tomó en  $t = 20$  °C,  $t_w = 15$  °C,  $P = 101325$  Pa; la humedad de referencia es 8,62 g/kg.

Como se observa (tabla 11.3), es de suma importancia reducir el error en la determinación de la temperatura termodinámica de bulbo húmedo; para ello se debe analizar detalladamente el efecto de la velocidad del aire, el tamaño del bulbo, etc., condiciones que dependen del diseño físico del psicrómetro (fórmulas de corrección en [19]). También es importante el conocimiento de la presión en el momento de la medida siempre que no interesen solamente diferencias de humedades. En tercer lugar es significativo el error producido por la utilización de fórmulas aproximadas: este es el error más barato de evitar.

|               | Medición de diferencias de humedad | Medición de humedad |
|---------------|------------------------------------|---------------------|
| Midiendo $P$  | 11 %                               | 6,2 %               |
| Estimando $P$ | 11 %                               | 8,5 %               |

Cuadro 11.3: Errores en la medición de  $W$ .

# Parte II

## Puyuspa 6.0

## Capítulo 12

# Introducción a Puyuspa

Puyuspa es la interfaz web de Calcula: una página que se abre en el navegador para cada sistema. Está publicada en

<https://www.psicro.org/puyuspa/>

donde está la lista de sistemas. Cada uno tiene su página, `/puyuspa/sistema.html`; la del sistema psicro es la calculadora psicrométrica gráfica, con la carta: <https://www.psicro.org/puyuspa/psicro.html>. Las direcciones de Puyuspa 5.0 (`/psicro/puyuspa.html` y el nombre histórico `psicrocalc.html`) redirigen a ella. Funciona en cualquier navegador de 2021 en adelante, también en teléfonos y tabletas, y no carga nada de otros sitios.

La página del sistema psicro tiene cuatro secciones: *Datos del punto*, *Resultados del punto*, *Carta psicrométrica* y *Registro de respuestas de calcula*. Arriba tiene el enlace *Todos los sistemas* a la lista, y en *Datos del punto* un selector para ir a la página de otro sistema.

## Capítulo 13

# Cálculo de un punto

En *Datos del punto* se eligen tres variables de la tabla 4.1 con sus valores, la base de los resultados (sección 5.4.3) y el modelo de propiedades (sección 9.6.6 y siguientes: TEOS-10 con agua pura por defecto, RP-1485, el histórico de Hyland y Wexler o el gas ideal de la ASHRAE; el modelo vale también para la carta), y se pulsa *Calcular*, que muestra los resultados, o *Calcular y marcar*, que además marca el punto en la carta. El punto del formulario se calcula solo al abrir la página, sin marcarlo. Los resultados aparecen en la sección siguiente tal como los imprime *Calcula* (sección 5): la tabla de los cuatro estados y las magnitudes derivadas. Con *Calcular y marcar*, si la altura del punto coincide con la de la carta, el punto queda marcado en ella con un círculo y su etiqueta  $T$ ,  $W$ , y se tilda la casilla *puntos marcados*, que muestra u oculta todos los puntos marcados. Si no hay solución, la línea de estado lo dice y los mensajes de error quedan en los resultados.

Los valores por defecto son  $t = 25\text{ °C}$ ,  $t_{bh} = 20\text{ °C}$ ,  $alt = 0$ .

## Capítulo 14

# La carta psicrométrica

La carta tiene la temperatura de bulbo seco en el eje horizontal y la humedad absoluta  $W$  (kg de agua por kg de aire seco) en el vertical, a la derecha, como en las cartas clásicas. Se dibuja al cargar la página y cada vez que se pulsa *Dibujar carta*, con los controles:

**T máx., W máx.** límites de los ejes (los mínimos son 0).

**Altura** en metros; determina la presión y por lo tanto todas las curvas.

**Paso bulbo húmedo, paso hum. relativa, paso entalpía** separación entre líneas de cada familia.

Familias de curvas, todas calculadas por Psicro con la forma exacta:

- la **curva de saturación**, azul gruesa (81 puntos);
- la grilla de **isotermas**, recortadas en la saturación, y de **líneas de humedad constante**, que empiezan en su punto de rocío;
- **bulbo húmedo constante**, en rojo a trazos, con la etiqueta **t<sub>bh</sub>** junto a la saturación;
- **humedad relativa constante**, en azul, del paso elegido hasta 90 %, etiquetadas con el porcentaje;
- **entalpía constante**, en verde punteado, en kJ por kg de aire seco, etiquetadas junto al borde por donde salen.

Las casillas *Mostrar* prenden y apagan bulbo húmedo, humedad relativa, entalpía y los puntos calculados sin recalcular. Con TEOS-10, la primera vez que se dibuja una carta para una altura y unos límites el servidor tarda unos quince segundos: mientras tanto se muestra una carta provisoria con RP-1485, que difiere en la quinta cifra, y se reemplaza sola al llegar la de TEOS-10. Las líneas de bulbo húmedo y de entalpía se trazan como rectas entre dos puntos exactos, el de saturación y el borde: son casi rectas en realidad, no exactamente.

### 14.1. Clic para calcular

Con la herramienta *Psicro* (la seleccionada al abrir la página), un clic dentro de la carta calcula el estado en esa temperatura y humedad y rellena el formulario con los datos usados, y lo marca en la carta. Si el clic cae por encima de la saturación la página avisa que ese estado no existe, sin consultar al servidor. *Borrar puntos* elimina las marcas; también se vacían si se redibuja la carta a otra altura.

## Capítulo 15

# Dibujar sobre la carta

La fila *Herramienta* ofrece *Libre* (trazo a mano alzada), *Línea*, *Rectángulo*, *Elipse* y *Texto*. Se elige la herramienta y se arrastra sobre la carta; con *Texto* se escribe el texto en el campo, se elige el tamaño y se hace clic donde va. Color, ancho y la casilla *lleno* (relleno semitransparente) se aplican al próximo trazo. *Deshacer* y *Rehacer* (también Ctrl-Z y Ctrl-Y) recorren la historia de dibujos; *Borrar dibujos* los elimina todos, y también se puede deshacer.

Los dibujos quedan fijados a las coordenadas de temperatura y humedad: si se cambian los límites de la carta y se redibuja, se reubican solos, y se incluyen en los tres formatos de exportación. Funciona con ratón y con pantalla táctil.

## Capítulo 16

# Exportar la carta

Tres botones guardan la carta con todo lo que tiene: curvas, puntos y dibujos.

**Guardar SVG** La carta como imagen vectorial, con sus estilos, tal como se ve. Se abre en Inkscape o en cualquier navegador, y se puede incluir en documentos.

**Guardar DXF** Para AutoCAD, LibreCAD y QCAD. Formato R12, el más compatible. Las coordenadas tienen sentido: X es la temperatura en °C e Y la humedad en gramos de agua por kg de aire seco, así el dibujo tiene proporciones razonables y las cotas se leen directamente. Nueve capas (marco, grilla, saturación, bulbo húmedo, humedad relativa, entalpía, puntos, dibujos, textos) con colores estándar, que se pueden prender y apagar en el programa de CAD. Las elipses van como polígonos de 72 lados porque R12 no las tiene.

**Guardar gnuplot** Un script autocontenido con las series como bloques de datos y las curvas, etiquetas, puntos y dibujos como órdenes de gnuplot. Se ejecuta con `gnuplot -persist archivo.gp` y reproduce la carta en una ventana; anteponiendo por ejemplo `set terminal pdfcairo; set output 'carta.pdf'` produce un archivo. Es la vía para retocar la carta con todas las posibilidades de gnuplot.

## Capítulo 17

# Las páginas de los demás sistemas

Cada sistema que no es psicro tiene una página genérica, `/puyuspa/sistema.html`, con el formulario de sus datos (tantos como grados de libertad tiene el sistema; cualquier variable puede ser dato), los resultados, y los gráficos que declara su configuración web: para cada uno, las variables de los ejes y las *familias* de líneas que dibuja (por ejemplo, la energía perdida al conectar dos capacitores en función de la capacidad, una línea por cada carga inicial). Los gráficos tienen las mismas herramientas de dibujo que la carta, límites editables, casillas para apagar familias, un clic para calcular y marcar el punto en esas coordenadas y exportación a SVG, DXF (una capa por familia; X en las unidades del eje, Y por un factor que da las proporciones de la pantalla, anotado en el archivo) y gnuplot. Como en la carta, *Calcular* muestra los resultados y *Calcular y marcar* además marca el punto, con su número, en los gráficos; si cae fuera del rango de un gráfico, el rango se amplía hasta incluirlo y las líneas se recalculan para que lleguen a él. El rango de un gráfico es solo lo que se muestra: los valores válidos los fija el dominio del modelo (sección 6.1). El péndulo dinámico tiene el mismo gráfico que el compilado, y los circuitos muestran además su esquema (las direcciones viejas `circuito.html` y `circuito-conexion.html` llevan a `circuito-carga.html`). Un sistema de Calcula sin configuración web también tiene su página, sin gráficos.

Desde Puyuspa 6.0-21:

- *Buscar el límite*, en todas las páginas: se elige uno de los datos y el sentido, y desde el punto del formulario se avanza hasta el borde de lo que se puede resolver (la opción `--limite` de Calcula); el formulario queda en el borde y se explica el motivo (un dominio, una restricción o que el cálculo deja de converger).
- Los gráficos pueden tener escalas logarítmicas; el del péndulo, de 1 mm a 1 km, muestra la ley  $t \propto \sqrt{l}$  como una recta de pendiente 1/2.
- El esquema de un sistema se abre en grande al tocarlo, para leerlo en el teléfono.
- El editor de sistemas (`editor.html`, enlazado desde la lista y desde la página de cada sistema dinámico) permite escribir un archivo `.din` o cambiar uno existente sin tocar el instalado, revisarlo (lo que Calcula leyó, con los dominios declarados y deducidos) y resolverlo, con el cuadro del modelo; cada cálculo tiene límite de tiempo y no se admiten los bucles ni las asignaciones de ExprTk. *Guardar .din* descarga el archivo; nada queda en el servidor.

Al pie de cada página, y también de la carta, un cuadro muestra el modelo del sistema: sus variables con descripción, unidad, dominio y semilla, las constantes y funciones, las ecuaciones y las restricciones. En los sistemas del módulo dinámico sale del mismo archivo `.din` que resuelve Calcula; en los módulos compilados (psicro y pendulo), de una copia escrita a mano con el mismo formato (`sistemas/psicro.modelo` y `sistemas/pendulo.modelo` de Puyuspa), donde

las propiedades del aire húmedo figuran como funciones con su descripción. La configuración de cada sistema es un archivo `sistemas/sistema.json` de Puyuspa, descrito en su documentación técnica.

## Capítulo 18

# Instalación de Puyuspa

### 18.1. Con el paquete

El paquete `puyuspa` (arquitectura `all`) requiere `calcula` y `perl`:

```
sudo apt install ./puyuspa_6.0-21_all.deb
```

Copia las páginas, los CGI, D3 y las imágenes al directorio del sitio `/var/www/simusal.org/public_html/puyuspa/` con un `.htaccess` que publica la página de cada sistema como `/puyuspa/sistema.html` (requiere `mod_rewrite` y que el sitio permita `.htaccess`), y deja en `/psicro/` las redirecciones de las direcciones viejas. No toca la configuración de Apache: el vhost del sitio ya tiene `ExecCGI` y el manejador CGI para `.pl`. En una máquina de desarrollo con Apache el script `publicar-local-puyuspa.sh` lo publica en `http://localhost/puyuspa/`. Si Apache responde “Service Unavailable” al CGI, reinícielo: el demonio de `cgid` solo arranca con el servidor, no con una recarga.

### 18.2. Sin Apache

`servidor-desarrollo.py`, en el directorio `puyuspa-6.0` del repositorio, sirve las páginas y ejecuta los CGI con el `calcula` del PATH en `http://localhost:8081/puyuspa/`, para probar o usar en la propia máquina sin configurar nada.

### 18.3. Cómo funciona

Cada página es un solo archivo HTML con su JavaScript. Para calcular un punto llama a `psicro.pl`, que ejecuta `calcula -s sistema -phtml ...` y devuelve su salida HTML (con el sistema `psicro`, más una minitabla con los valores que la carta necesita). Para la carta llama a `curvas.pl`, que ejecuta `calcula -s psicro` una sola vez con cientos de líneas en modo `imp` (unos 800 cálculos: un cuarto de segundo con RP-1485, unos quince segundos con TEOS-10) y devuelve las series en JSON. `sistemas.pl` da la lista de sistemas y la configuración de cada uno, y `serie.pl` calcula las familias de líneas de los gráficos. Los CGI reciben el modelo elegido (`modelo=teos`, `rp`, `hw` o `ideal`) y lo pasan a `calcula` por el entorno. Las series calculadas se guardan en un caché en `/var/cache/puyuspa`, con clave por parámetros, modelo y versión del ejecutable, así la primera carta de cada altura es la única lenta. El dibujo lo hace la biblioteca D3 en SVG. Los CGI ejecutan `calcula` sin pasar por el shell, así los datos del formulario no pueden inyectar órdenes. La documentación técnica completa, función por función, está en `puyuspa-6.0/DOCUMENTACION.md` del repositorio y en `/usr/share/doc/puyuspa`.

## Capítulo 19

# Limitaciones y problemas conocidos

- $t_{bh} = 0$ ,  $w_r = 1$  no converge a ninguna altura (salto entre las correlaciones de presión de saturación sobre hielo y agua en 0 °C); se informa como error.
- Por encima de la temperatura de hervor el modelo no define la humedad relativa; las curvas se cortan allí.
- Algunas funciones dan problemas por debajo de  $-30$  °C.
- Las combinaciones de bulbo húmedo con entalpía no siempre convergen desde la semilla fija del programa.
- El módulo dinámico no tiene integrador temporal ni comandos propios (bases); los residuos se comparan con tolerancia absoluta.
- Unidades no SI: pendientes. La conversión de unidades con `units`, que ofrecía el programa `unidad` de la 4.0, no está en `Calcula`.
- Puyuspa está solo en castellano.

## Apéndice A

# Licencias

Calcula es software libre bajo la GNU General Public License, versión 3 o superior; Puyuspa, bajo la GNU Affero General Public License, versión 3 o superior. Psicro 5.0 y las versiones anteriores se publicaron bajo la AGPL 3 o superior y así quedan. Este manual es libre bajo la GNU Free Documentation License, versión 1.2 o superior. ExprTk (Arash Partow) se distribuye bajo la licencia MIT y D3 (Mike Bostock) bajo la ISC. Los textos completos están en los archivos COPYING del repositorio y en <http://www.gnu.org/licenses/>.

# Bibliografía

- [1] ASHRAE. *ASHRAE Handbook: 1985 Fundamentals*. American Society of Heating, Refrigerating and Air-Conditioning Engineers, Atlanta, 1985.
- [2] Richard W. Hyland and Arnold Wexler. Formulations for the thermodynamic properties of the saturated phases of  $\text{H}_2\text{O}$  from 173.15 K to 473.15 K. *ASHRAE Transactions*, 89(2A):500–519, 1983.
- [3] Diego Saravia and Graciela Lesino. Open cycle air conditioning system with solar regenerated liquid desiccants. In *Workshop on Materials Science and Physics of Non-conventional Energy Sources*, Buenos Aires, 1992.
- [4] Diego Saravia. SIMUSOL: ecuaciones implícitas con interpretación dinámica, cortes inductivos y lazos capacitivos. *Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente*, 19:08.13–08.24, 2015. ISSN 2314-1433; copia en doc/datos-experimentales/articulos/saravia-2015-simusol.pdf.
- [5] Diego Saravia. SIMUSOL: simulación de diagramas de enlace o Bond-Graphs. *Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente*, 18:08.43–08.50, 2014. copia en doc/IntegradorAsades.pdf.
- [6] David R. Lide, editor. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. CRC Press, Boca Raton, 71 edition, 1990. 1990–1991; atmósfera estándar.
- [7] ASHRAE. *Brochure on Psychrometry*. American Society of Heating, Refrigerating and Air-Conditioning Engineers, New York, 1977.
- [8] Edward W. Washburn, editor. *International Critical Tables of Numerical Data, Physics, Chemistry and Technology*. McGraw-Hill, New York, 1926–1933. 7 volúmenes; solubilidad del aire en agua y volumen del agua.
- [9] R. L. Rusby. The conversion of thermal reference values to the ITS-90. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, 23(12):1153–1161, 1991.
- [10] Wolfgang Wagner and Andreas Pruß. International equations for the saturation properties of ordinary water substance. revised according to the international temperature scale of 1990. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 22(3):783–787, 1993.
- [11] Wolfgang Wagner, Thomas Riethmann, Rainer Feistel, and Allan H. Harvey. New equations for the sublimation pressure and melting pressure of  $\text{H}_2\text{O}$  ice Ih. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 40(4):043103, 2011.
- [12] Sebastian Herrmann, Hans-Joachim Kretzschmar, and Donald P. Gatley. Thermodynamic properties of real moist air, dry air, steam, water, and ice (RP-1485). *HVAC&R Research*, 15(5):961–986, 2009.

- [13] ASHRAE. *ASHRAE Handbook: Fundamentals*. American Society of Heating, Refrigerating and Air-Conditioning Engineers, Atlanta, 2009. Capítulo 1, Psychrometrics: tablas por RP-1485 y relaciones de gas ideal.
- [14] Eric W. Lemmon, Richard T. Jacobsen, Steven G. Penoncello, and Daniel G. Friend. Thermodynamic properties of air and mixtures of nitrogen, argon, and oxygen from 60 to 2000 K at pressures to 2000 MPa. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 29(3):331–385, 2000.
- [15] Wolfgang Wagner and Andreas Pruß. The IAPWS formulation 1995 for the thermodynamic properties of ordinary water substance for general and scientific use. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 31(2):387–535, 2002.
- [16] Allan H. Harvey and Peter H. Huang. First-principles calculation of the air–water second virial coefficient. *International Journal of Thermophysics*, 28(2):556–565, 2007.
- [17] Rainer Feistel, Daniel G. Wright, Hans-Joachim Kretzschmar, Eberhard Hagen, Sebastian Herrmann, and Roland Span. Thermodynamic properties of sea air. *Ocean Science*, 6(1):91–141, 2010.
- [18] Rainer Feistel. A Gibbs function for seawater thermodynamics for  $-6$  to  $80^\circ\text{C}$  and salinity up to  $120\text{ g kg}^{-1}$ . *Deep-Sea Research Part I*, 55(12):1639–1671, 2008.
- [19] James L. Threlkeld. *Ingeniería del ámbito térmico*. Prentice-Hall Internacional, Madrid, 1973. Traducción de Thermal Environmental Engineering, 2.<sup>a</sup> ed., 1970.
- [20] Richard W. Hyland. A correlation for the second interaction virial coefficients and enhancement factors for moist air. *Journal of Research of the National Bureau of Standards, Section A: Physics and Chemistry*, 79A(4):551–560, 1975.
- [21] Lewis Greenspan. Functional equations for the enhancement factors for  $\text{CO}_2$ -free moist air. *Journal of Research of the National Bureau of Standards, Section A: Physics and Chemistry*, 80A(1):41–44, 1976.
- [22] Russell G. Wylie and Robert S. Fisher. Molecular interaction of water vapor and air. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 41(1):133–142, 1996.
- [23] Leslie A. Guildner, Daniel P. Johnson, and Frank E. Jones. Vapor pressure of water at its triple point. *Journal of Research of the National Bureau of Standards, Section A: Physics and Chemistry*, 80A(3):505–521, 1976.
- [24] A. Picard, R. S. Davis, M. Gläser, and K. Fujii. Revised formula for the density of moist air (CIPM-2007). *Metrologia*, 45(2):149–155, 2008.
- [25] Lewis Greenspan. Humidity fixed points of binary saturated aqueous solutions. *Journal of Research of the National Bureau of Standards, Section A: Physics and Chemistry*, 81A(1):89–96, 1977.