

Universidad Nacional Autónoma de México

FACULTAD DE QUIMICA



SIMULADOR DE BALANCES DE MATERIA Y ENERGIA
EN OPERACIONES UNITARIAS CON EQUILIBRIO
FISICO

TESIS MANCOMUNADA
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A N

Salvador
Ricardo

Durán
Trejo

Sánchez
Barrera



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

| CONTENIDO. | Pág. |
|---|------|
| Capítulo I: INTRODUCCION. | 1 |
| Capítulo II: GENERALIDADES. | 3 |
| II.1.- Generalidades sobre equilibrio físico. | 3 |
| II.2.- Generalidades sobre Operaciones -- Unitarias que implican relaciones de fases en equilibrio físico. | 23 |
| Capítulo III: MODELO | 27 |
| III.1.- Comparación de las ecuaciones de balances de Materia y Energía entre las diferentes operaciones. | 27 |
| III.2.- Proposición de un modelo que comprenda a todas las operaciones en sus diferentes formas de operación. | 31 |
| Capítulo IV: APLICACIONES DEL MODELO. | 46 |
| IV.1.- Construcción de un simulador para el modelo propuesto. | 46 |
| IV.2.- Aplicación del modelo a la solución de diferentes problemas en diversas Operaciones Unitarias. | 80 |
| IV.3.- Aplicaciones al diseño de equipo. | 106 |
| Capítulo V: CONCLUSIONES. | 121 |
| BIBLIOGRAFIA. | 125 |

CAPITULO I

INTRODUCCION

I.- INTRODUCCION.

Es necesario hacer resaltar la importancia de las Operaciones Unitarias y las diversas relaciones existentes entre ellas para el desarrollo de la Ingeniería Química.

El campo de las Operaciones Unitarias como procesos de separación puede considerarse ilimitado. La agrupación y unificación de diversas operaciones, constituye el paso lógico, -- obligado, en la evolución del concepto referente a las Operaciones Unitarias y de la Ingeniería Química. Esta unificación puede establecerse con base a modelos físicos que representen los principios de funcionamiento y las similitudes básicas de las diversas operaciones agrupadas.

Esta agrupación puede considerarse mas eficiente para la enseñanza, mas económico en tiempo, mas adecuado en la presentación de lo fundamental, y mas efectivo para el entrenamiento que conduzca a la definición y a la solución de los problemas en operaciones que abarquen ese agrupamiento.

En el presente trabajo, se estudian y unifican diversas Operaciones Unitarias relacionadas con el concepto de equilibrio físico, en procesos de separación discontinuos o por etapas con funcionamiento continuo.

I.1.- OBJETIVO.

El principal objetivo de esta tesis es el de proponer un modelo matemático general que represente modelos específicos provenientes de balances de materia y energía en Operaciones Unitarias con equilibrio físico.

El trabajo se inicia con un analisis del comportamiento físico existente en las diversas operaciones, seguido por el establecimiento de un modelo físico apropiado. Posteriormente se escribe una relación matemática fundamental utilizando el modelo, y se procede a resolverla. La expresión general así obtenida, se aplica entonces a Operaciones Unitarias específicas.

cas.

La proyección del modelo propuesto se visualiza en una aplicación sencilla al diseño de equipo para una torre de absorción.

Dado que el diseño de estos modelos matemáticos implican un estudio de simulación, es indispensable utilizar una computadora debido a la gran cantidad de datos y cálculos que se requieren, por lo que se incluye la estructura de la programación para efectuar las operaciones involucradas en la determinación de los parámetros de los modelos propuestos.

El lenguaje que se utilizó para esta programación es el FORTRAN IV, que está basado en gran parte en el lenguaje FORTRAN propuesto como patrón por la American Standards Association, publicado en la edición de octubre de 1964 de las COMUNICACIONES de la Asociación de las Máquinas Computadoras.

CAPITULO II

GENERALIDADES

II.1.- GENERALIDADES SOBRE EQUILIBRIO FISICO.

En esta sección se propone presentar brevemente los principios en los cuales se basan las relaciones de equilibrio, su comportamiento bajo determinadas condiciones y los procedimientos mediante los cuales puede predecirse.

Cuando un material homogéneo, ya sea un gas, un líquido o un sólido, contiene dos o más componentes cuyas concentraciones varían de un punto a otro, existe cierta tendencia a la transferencia, de modo que las concentraciones se hagan uniformes.

La transferencia depende de la marcha del sistema al equilibrio y el tratamiento cuantitativo de este proceso requiere del conocimiento de los estados de equilibrio del sistema.

EQUILIBRIO: Es un estado constante en el que aparentemente no hay ningún cambio en las propiedades medibles del sistema es decir, que para cualquier combinación de fases existe una condición en la cual no hay intercambio de propiedades. Si éstas combinaciones no están en equilibrio, la diferencia entre la concentración de alguna propiedad existente entre ellas y aquella que debe existir en la condición de equilibrio es un gradiente o diferencia de potencial que tiende a alterar el sistema y llevarlo a las condiciones de equilibrio, por lo tanto un sistema en equilibrio es aquel que existe bajo condiciones tales que no hay tendencia a un cambio y en el cual todos los potenciales o gradientes están perfectamente balanceados.

II.1.1.- REGLA DE LAS FASES. La velocidad de transferencia de materia de un punto cualquiera es proporcional a la diferencia de potencial que viene dada por la separación del equilibrio en dicho punto. Por consiguiente el conocimiento del equilibrio entre fases es importante para evaluar gradientes de concentración.

El principio de la regla de las fases establecida por -- V. W. Gibbs se puede expresar por medio de la ecuación

$$V = c - p + 2$$

donde: V = No. grados de libertad

c = No. de componentes

p = No. de fases presentes em equilibrio

Una fase es la porción de un sistema, uniforme en todo -- lo que refiere a su composición química y a sus propiedades físicas, la cual está separada de otras partes homogéneas -- del sistema por superficies límites, esta porción puede ser por consiguiente un sólido, un líquido o un gas. En todos -- los casos de transferencia de masa intervienen 2 fases y se encuentran todas las combinaciones posibles excepto 2 fases gaseosas ó 2 fases sólidas.

La regla de las fases es un método para interpretar y -- clasificar el equilibrio entre fases, y da el número de va-- riables independientes que pueden fijarse arbitrariamente -- para establecer el estado intensivo del sistema, sin embargo no define su naturaleza física, ni composición exacta ni cantidad total.

II.1.2.- TIPOS DE EQUILIBRIOS: Los tres estados de agrega-- ción de la materia permiten seis contactos posibles entre fa-- ses, algunos no tienen aplicación importante pero otros son la base de las más importantes operaciones de separación de mezclas.

II.1.2.a.- EQUILIBRIO GAS-GAS.- Con muy pocas excepciones -- todos los gases son completamente solubles entre si, por lo cual la existencia de fases y de un equilibrio es práctica-- mente imposible.

II.1.2.b.- EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR.- Para aplicar los dife-- rentes principios sobre equilibrio físico vapor-líquido sera conveniente explicar la influencia que sufre el equilibrio -- bajo diferentes condiciones. Una breve revisión será hecha y

estará basada en una mezcla binaria.

Consideremos esta mezcla binaria como ordinaria, lo cual significa que los componentes líquidos forman soluciones homogéneas las cuales no son necesariamente ideales y ninguna complicación azeotrópica aparece. En esta mezcla el componente "A" de la mezcla binaria A-B será el más volátil y la presión de vapor del componente puro "A" a cualquier temperatura será mayor que la presión de vapor del componente puro -- "B". Para la concentración "X" en el líquido y "Y" en el vapor serán las fracciones mol del componente más volátil "A".

Una completa representación gráfica del equilibrio requiere un diagrama tri-dimensional, como en la Fig. [II.1]. La curva " P_A " es la curva de la presión de vapor de "A", colocada enteramente en el plano $X=1$.

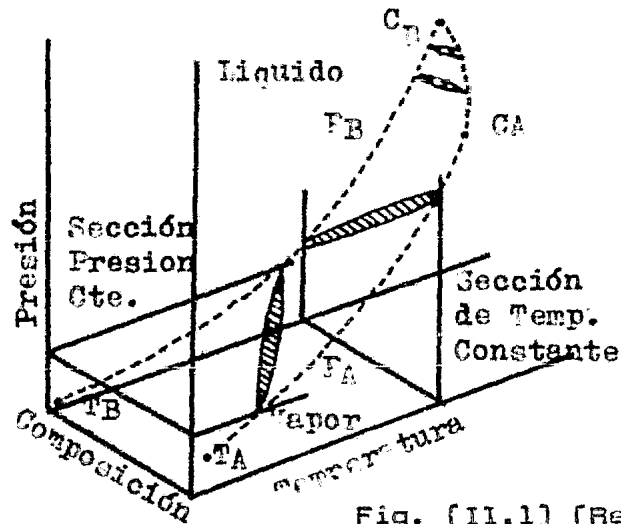


Fig. [II.1] [Ref. 4]

La curva se extiende de su punto crítico " C_A " hasta su punto triple " T_A ", pero las complicaciones de la fase sólida no serán consideradas. Similarmente la curva " P_B " representa la presión de vapor del componente puro "B", en el plano -- " $X = 0$ ".

Consideremos primero una sección a presión constante -- [Fig. (II.2)]. La Fig. (II.2) representa el diagrama del punto de ebullición a presión constante, para las mezclas del componente "A", que hierve a la temperatura " T_A ", y el componente "B", que hierve a la temperatura " T_B ".

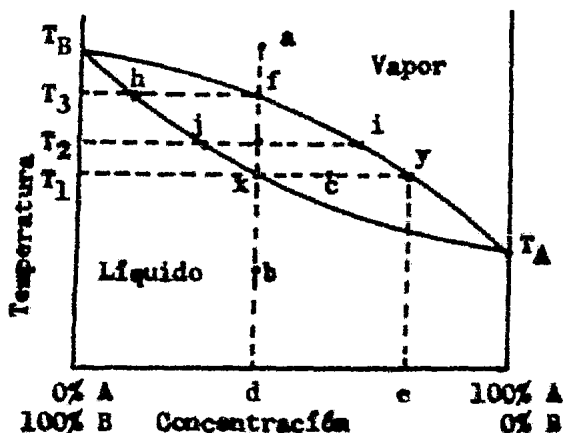


Fig.(II.2) Diagrama del punto de ebullición (4)

Un punto, tal como "y", representa vapor que comienza a condensar a la temperatura " T_1 ". La concentración de la primera gota de líquido que se forma está representada por el punto "d". La línea superior se llama curva del punto de rocío. Cualquier punto, tal como "x", de la curva inferior, representa el líquido que comienza a hervir a la temperatura " T_1 ". La concentración de la primera burbuja estará dada por "e". La curva inferior se llama curva del punto de burbuja. Cualquier punto situado sobre la misma línea horizontal, -- como "x" e "y", representa concentraciones de líquido y vapor en equilibrio. El punto "a" representa mezclas formadas totalmente por vapor y el punto "b" mezclas formadas por líquidos. El punto "c", comprendido entre las dos curvas, está constituido parcialmente por líquido y parcialmente por vapor.

Supongamos que una mezcla líquida, tal como b, se calienta lentamente. Comenzará a hervir a la temperatura " T_1 ". Si

más mezcla es vaporizada, la temperatura llegará a " T_2 ", donde las concentraciones de equilibrio en el líquido estarán dadas por "j" y en el vapor por "i". Si el calentamiento prosigue la última gota de líquido vaporizará en " T_3 ". Un sobrecalentamiento de la mezcla originará la mezcla de vapor dada por "a".

Para diferentes incrementos en la presión la Fig. (II.3) hace una representación en un solo plano

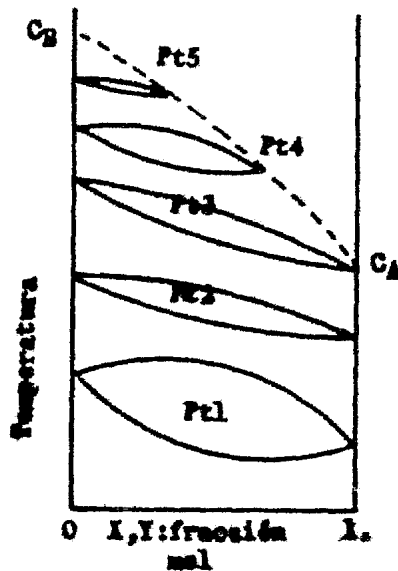


Fig. (II.3)
(Ref. 4)

En la figura se puede notar que las curvas existen a elevadas temperaturas, pero también generalmente éstas llegan a ser más estrechas para diferentes presiones. Esto ocurre --- cuando la presión crítica de un componente es excedida y no existe una distinción entre vapor y el líquido para ese componente. Esto se puede observar a presiones mayores de " $Pt3$ ", que es la presión crítica para el componente "A" de la mezcla ordinaria "A-B" [Fig.(II.3)].

Otra sección del diagrama de fases tridimensional es el mostrado en la Fig.(II.4). Esta es una gráfica de presión -- contra concentración o temperatura constante. Contiene dos -

curvas las cuales se extienden desde la presión de vapor del componente puro "B" hasta la presión de vapor del componente puro "A". Existen entre ellas un número infinito de líneas de unión, tales como "T-V", las cuales unen al vapor "V" en equilibrio con el líquido en "T". Un punto, como "W", representa una mezcla de líquidos y si la presión es reducida a temperatura constante, la primera burbuja de vapor se formará en "U", una completa vaporización ocurre en "S", y posteriores reducciones de presión originarán un vapor sobrecalentado como "R".

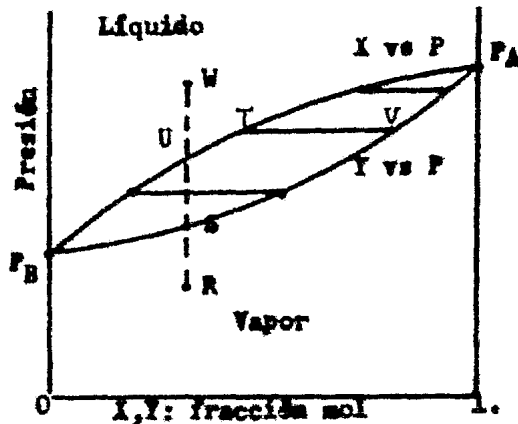


Fig.(II.4)
[ReF. 4]

SOLUCIONES IDEALES: El equilibrio vapor líquido se calcula fácilmente para las soluciones ideales, esto es, las que siguen la ley de Raoult, y, si son aplicables las leyes de los gases ideales, los únicos datos necesarios son las presiones o tensiones de vapor de los componentes puros. Si la fase líquida es ideal, la presión parcial de cualquier componente "P" en el vapor es igual al producto de su fracción mol en el líquido "x" por la presión de vapor " P_1 " del componente puro a la misma temperatura. Así, para los sistemas de cualquier número de componentes:

$$P_1 = P_1 \times_1 \quad P_2 = P_2 \times_2 \quad \text{etc.} \quad \text{Ec. (II.1)}$$

Si la fase gas es ideal, estos siguen la ley de Dalton. Esta ley establece que la presión parcial " p_1 " de cualquier componente en el vapor es igual a su fracción mol en el vapor " y_1 " multiplicado por la presión total del sistema " P_T ". Así para cualquier número de componentes:

$$p_1 = P_T y_1 \quad p_2 = P_T y_2 \quad \text{etc.} \quad \text{Ec. (II.2)}$$

Combinando Ecuaciones (II.1) y (II.2)

$$\alpha_{12} = \frac{y_1 / x_1}{y_2 / x_2} = \frac{P_1}{P_2} \quad \text{Ec. (II.3)}$$

en la cual α_{12} es la volatilidad relativa de los componentes 1 y 2 para los gases y líquidos ideales o perfectos.

Ley de Henry y Ley de Raoult para soluciones diluidas: La Ley de Henry establece que la cantidad de gas disuelto en una cantidad dada de disolvente o de solución es directamente proporcional a su presión parcial sobre la solución, esto es:

$$P_A = H_A x$$

donde " H_A " es la constante de Henry, esta varía con la temperatura y con la naturaleza del gas y del disolvente y, en menor grado con la presión. Su valor numérico depende de las unidades en que se expresan la presión y la concentración.

La Ley de Henry es aplicable, tanto a los componentes individuales de una mezcla gaseosa como a un gas puro único, -siendo la concentración de cada componente disuelto según la ley, proporcional a su propia presión parcial y no a la presión total del gas.

Si bien son muchas las sustancias que se comportan de acuerdo con las Leyes de Raoult y Henry, y otras de una manera aproximada, pero con suficiente exactitud para los cálculos de ingeniería, en muchos casos las desviaciones son importantes. Las soluciones reales en cuanto mas diluidas están, se comportan mas acerde con las leyes de soluciones ---

ideales.

MEZCLAS NO IDEALES DE LIQUIDOS: Para soluciones con mucha aproximación a la idealidad, los datos experimentales no son necesarios ya que es aplicable la Ley de Raoult. Para mezclas no ideales de líquidos es conveniente conocer los principios físicos en los cuales se basan los datos de equilibrio con el fin de disponer de procedimientos para verificar la confianza que merecen los datos experimentales disponibles, para permitir la aplicación de esos datos a diferentes condiciones, como para otras temperaturas, y proporcionar datos de equilibrio teóricos en ausencia de datos experimentales completos.

En el caso de fases donde los gases se comportan idealmente y hay desviaciones con respecto al estado líquido ideal, las predicciones del equilibrio se tratan comodamente por factores cuya significación termodinámica es la de Coeficientes de Actividad, definidos por las relaciones:

$$P_T y_1 = \gamma_1 P_1 x_1 \quad P_T y_2 = \gamma_2 P_2 x_2 \quad \text{etc.} \quad \text{Ec. (II.4)}$$

Los coeficientes de actividad γ_1 , γ_2 , etc., son funciones especiales de la concentración y varían en grados diferentes con la temperatura. Existen desviaciones positivas, esto es, que los coeficientes de actividad son mayores que la unidad y desviaciones negativas donde los coeficientes de actividad son fracciones menores de 1. Los coeficientes de actividad se acercan a la unidad a medida que la concentración del componente dado se acerca a la unidad y las desviaciones suelen ser extremas cuando la concentración del componente se acerca a cero.

Existe una serie de ecuaciones que sirven para predecir los coeficientes de actividad tanto en función de la concentración como de la temperatura. Ecuaciones y relaciones termodinámicas complicadas que salen del objetivo de este trabajo.

CALCULO DEL EFECTO DE LAS DESVIACIONES CON RESPECTO A LA LEY DE LOS GASES: A presiones elevadas, las desviaciones respecto a la ley de los gases afectan el equilibrio vapor-líquido de una manera notable, tanto si el sistema es o no ideal en el líquido. Incluso a la presión atmosférica puede existir un ligero efecto que debe tenerse en cuenta en trabajos minuciosos. Entre los límites de presiones moderadas, se dispone de convenientes generalizaciones que permiten predecir el efecto de la compresibilidad para los sistemas sobre los cuales se carece de datos experimentales relacionados con el equilibrio vapor-líquido. A presiones proximas a la crítica no son aplicables las generalizaciones y son necesarios datos experimentales sobre los sistemas reales.

Para sistemas con desviaciones con respecto a la ley de los gases y para soluciones ideales líquidas se tienen correlaciones de las fugacidades de los vapores, principalmente para sistemas de mezclas de hidrocarburos, que fueron estudiadas primero por Lewis y Luke [Trans. Am. Soc. Engrs., 54, 55 (1932)] y por Souders, Selheimer y Brown [Ind. Eng. Chem., 24, 517(1932)]. Según los últimos, la relación de equilibrio vapor-líquido, para cualquier componente, se expresa por:

$$k = \frac{y}{x} = \frac{f_L}{f_V} \quad \text{Ec. (II.5)}$$

en la cual:

y , x = fracción mol de componentes en el vapor y el líquido respectivamente.

f_L = fugacidad del componente puro en la fase líquida a su presión de vapor correspondiente a la temperatura del sistema.

f_V = fugacidad del componente puro en el vapor a la temperatura y la presión del sistema.

k = relación de equilibrio.

En soluciones ideales el término "k" es independiente de la composición, siendo función tanto de la temperatura como -

de la presión, para cualquier componente dado. Para soluciones reales, "k", depende de la composición, de la temperatura y de la presión.

En la evaluación de las fugacidades se han estudiado diferentes correlaciones proporcionadas por Gamson y Watson [Nat. Petroleum News, Tech, Sec. 36, R 554, 2 de agosto, 1944]; --- también las de Watson y Smith [ibid., 28, 1 de julio, 1936] y las de Kirkbride [petroleum Refiner 24, diciembre 1945].

Existen aproximaciones para el comportamiento de los líquidos no ideales cuando el gas no se comporta idealmente, --- términos de corrección para presiones moderadas con diferentes restricciones. Para consultas véase: Scatchard y Raymond, V. Am. Chem. Soc., 62, 1278 [1944]; Benedict, Johnson y Rubin, Trans. Am. Inst. Engrs., 41, 371 [1945]; y Wohl, ibid., 42, --- 215, [1946].

II.1.2,c.- EQUILIBRIO LIQUIDO-LIQUIDO.- Un par de líquidos --- pueden ser miscibles en un intervalo dado de temperatura, --- esto es, solubles en todas las proporciones, parcialmente --- miscibles, o inmiscibles. La temperatura tiene un efecto pronunciado sobre la solubilidad mutua, mientras que el efecto --- de la presión, en las condiciones ordinarias, es pequeño. Tomando como base el efecto de la temperatura sobre su solubilidad mutua, dos líquidos muestran diferentes tipos de comportamiento. Estos pueden representarse por medio de diagramas sencillos de fase en los que se transporta la composición en relación con la temperatura a presión constante.

Tipo 1.- La solubilidad mutua aumenta con la temperatura --- Fig. [II.5.a]. Al efectuar la mezcla, a la temperatura " t_1 ", --- se forman dos capas: una solución saturada de "B" en "A" y --- una de "A" en "B". Al elevarse la temperatura, aumenta la solubilidad mutua, las composiciones de las dos capas se aproximan la una a la otra, y se llega al punto " C_u ", en el que es posible la miscibilidad en todas las proporciones. Esta temperatura se denomina temperatura crítica de solución o consolu-

ta.

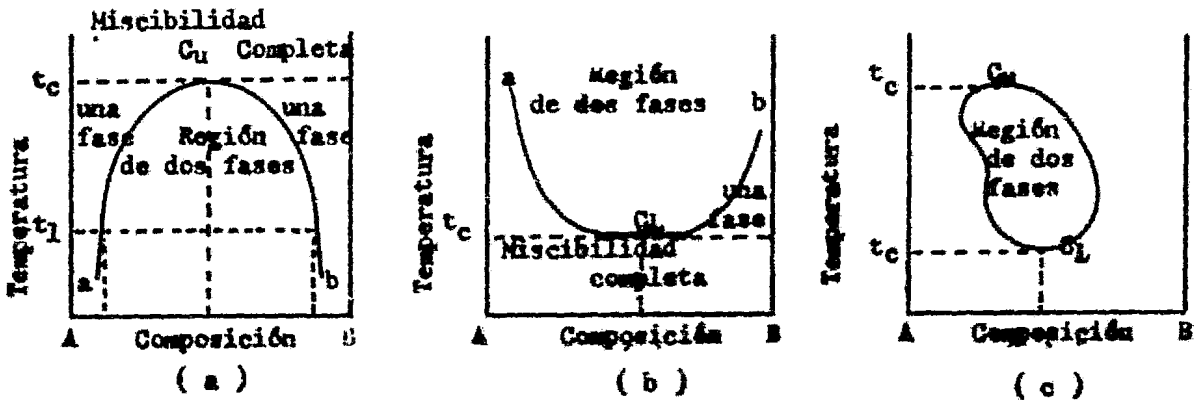


Fig. (II.5) [Ref. 1]

Tipo 2.- La solubilidad disminuye con la temperatura [Fig. --- (II.5.b)]. En algunos casos la solubilidad mutua de dos líquidos disminuye con la temperatura, y existe una mínima temperatura crítica de solución " t_L " por debajo de la cual son miscibles los dos en todas las proporciones.

Tipo 3.- Se conocen algunos casos en que los dos líquidos muestran a la vez una máxima temperatura crítica de solución y una mínima [Fig. (II.5.c.)].

Otros casos.- Existen casos en los que no se ve que exista una temperatura consoluta máxima o mínima. En algunos la solubilidad del primer líquido en el segundo disminuye con la temperatura, mientras la del segundo en el primero aumenta.

La presencia de impurezas, por ejemplo, un tercer componente altera bastante la solubilidad mutua de dos líquidos, la forma de la curva de saturación y la temperatura consoluta. En algunos casos, una cantidad relativamente pequeña de una tercera sustancia puede bastar, a una temperatura dada, para hacer que dos líquidos parcialmente miscibles lo sean completamente, mientras en otros casos se obtiene el efecto opuesto.

En la extracción líquida-líquido, los equilibrios de fase que interesan son los que representan la distribución de un soluto "c" entre dos líquidos inmiscibles o parcialmente misci-

bles "b" y "c". Vamos a considerar dos casos: primeramente, -- cuando la solubilidad mutua de los líquidos "b" y "c", aún en presencia del componente "a", es despreciable, y segundo, cuando esta solubilidad no se puede ignorar.

Cuando en el equilibrio la capa "b" (mas algo de "a" disuelto) no contiene prácticamente "c", y la capa de "c" mas "a" no contiene "b", el equilibrio se transforma en una relación sencilla entre las concentraciones del soluto entre las dos fases. Este caso es idéntico al de la absorción de gases. En soluciones diluidas se cumple la ley de Henry. Lo mismo ocurre para la solubilidad de gases en líquidos, el equilibrio es también en este caso sensible a la temperatura. Sin embargo, - contrariamente a los equilibrios gas-líquido, los equilibrios líquido-líquido son prácticamente independientes de la presión.

Para fines de cálculos en ingeniería, los datos de solubilidad y de equilibrio, para los sistemas ternarios, cuyos componentes todos son en cierto grado, al menos parcialmente, mutuamente solubles, son mas útiles cuando se representan gráficamente sobre diagramas en un plano a temperatura y presión constante. La gráfica sobre triángulo equilátero proporciona la representación mas completa. En este tipo de gráficas los vértices representan los componentes puros, y sobre los lados del triángulo se colocan respectivamente las escalas representativas de las composiciones binarias de los tres pares posibles. - Las composiciones terciarias se sitúan dentro del triángulo. - Se pueden emplear para la representación los porcentajes en peso o molares.

Los diagramas de fases que se encuentran en los sistemas donde existe solubilidad mutua entre todos los pares posibles para los sistemas de tres componentes varían según que: 1).- Dos de los pares binarios sean totalmente miscibles, 2).- Uno sea totalmente miscible y los otros dos parcialmente miscibles y, 3).- Los tres pares binarios sean parcialmente miscibles. -

Examinaremos el comportamiento típico de estos líquidos.

1).- Un par de líquidos parcialmente miscibles. La Figura ---- [II.6.a] es típica de este caso. La mayor parte, con mucho, de los casos mas comunes sobre los que se dispone de datos están en esta clase. La forma, la posición y el área de la curva de saturación, y de la región de dos fases, varían según el caso de que se trate.

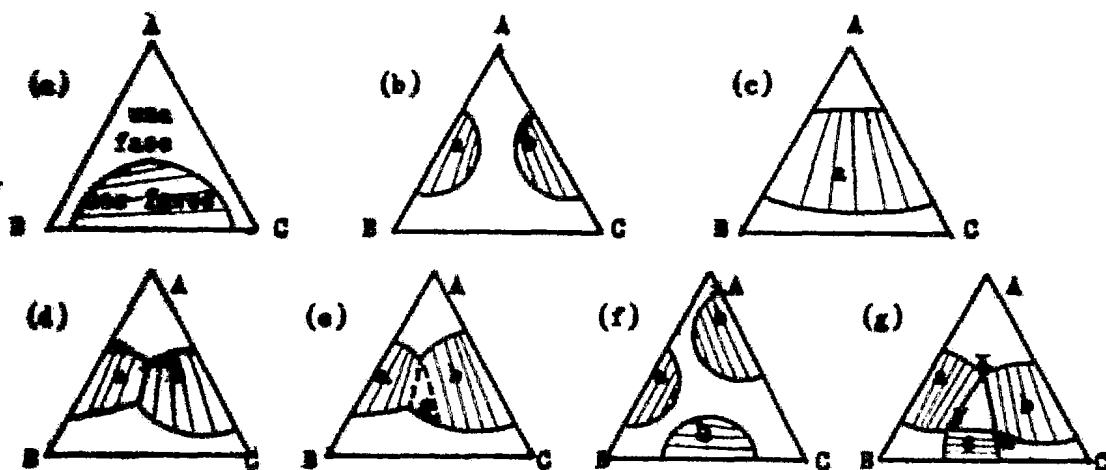


Fig. (II.6)

[Ref. 1]

2).- Dos pares binarios son parcialmente miscibles. Pueden --- existir dos regiones heterogéneas rodeadas por un campo homogéneo, como en la Fig. (II.6.b), o bien la región de dos fases -- puede ser una banda continua, como en la Fig. (II.6.c). En las Figuras (II.6.d) y (II.6.e) se ilustran otras variantes que -- suelen encontrarse.

3).- Los tres pares binarios son parcialmente miscibles. Son -- diagramas típicos de este caso la Fig. (II.6.f), en la que -- existen tres regiones heterogéneas distintas, y la Figura --- (II.6.g), en la que esas regiones se solapan y se forma una re-- gión de composición tal que existen tres capas líquidas en e-- quilibrio. En la región limitada por "x" "y" "z", cualquier -- mezcla se separa en tres cap: cuyas composiciones, sin consi-- derar la composición general de la mezcla original, están da--

das respectivamente por los puntos "x" "y" "z". Una mezcla que caiga dentro de las fases "a", "b" ó "c", se divide inmediatamente en dos capas líquidas.

SISTEMAS MULTICOMPONENTES: La representación de los equilibrios de fases en los sistemas de más de tres componentes, es para los fines prácticos difícil y, cuando el número de componentes es grande y éstos no pueden identificarse, es imposible en función de los componentes puros. Los procesos de extracción de tales sustancias tienen por objetivo la separación en dos fracciones (un extracto y un refinado) caracterizados por propiedades físicas y químicas distintas más que por el aislamiento de los componentes particulares. Para consideraciones y cálculos de ingeniería, se tratan tales casos como sistemas ternarios empleando una propiedad física del sistema que sea aditivo o se suponga aditivo para el refinado y el extracto exentos de disolvente y que caracterice a las dos fracciones para la separación propuesta. Valores apropiados de la propiedad física seleccionada, situados fuera de los límites afectados por la extracción son entonces utilizados para designar el extracto y el refinado respectivamente, y las curvas de solubilidad mutua y las líneas de enlace se determinan experimentalmente por medio de una serie de extracciones de laboratorio de sustancias en equilibrio.

EFFECTO DE LA TEMPERATURA: La temperatura puede ejercer varios efectos sobre el comportamiento y el tipo de diagrama de un sistema dado. Teóricamente un sistema determinado puede mostrar varios tipos de comportamiento, o todos ellos, en un intervalo de temperatura amplio. Dicho sistema puede caracterizarse por un tipo de diagrama en un intervalo de temperatura y por un segundo tipo en otro intervalo. El sentido de la variación del comportamiento de fase producida en un sistema bajando la temperatura puede ser en otro sistema el resultado de una elevación de aquella.

LEY DE LA DISTRIBUCION ENTRE DOS FASES: En general no es li---

neal la gráfica de la distribución de equilibrio. La ley establece que " $y = mx$ ", siendo, " y " y " x " las fracciones molares del soluto en las dos fases, y " m " el coeficiente de distribución constante independiente de la concentración. Si se verifica la ley, lo que raramente sucede en las extracciones de la práctica, será una constante independiente de la concentración y la curva de distribución de equilibrio se transforma en una recta que pasa por el origen y tiene de pendiente el coeficiente de distribución " m ". Esto es análogo a lo que sucede con la ley de Henry en la absorción de gases. Aún cuando se verifique la ley, debe observarse que, cuando se emplean relaciones en peso o molares, la representación no será lineal a menos que las fases estén muy diluidas.

II.1.2.d.- EQUILIBRIOS SOLIDO-LIQUIDO Y GAS-SOLIDO.- No se ha encontrado aún ningún método satisfactorio para calcular el grado en que un sólido se disolverá en un líquido dado. Se han hecho tentativas para predecir las solubilidades de los no-electrolitos partiendo de datos de presión del vapor y términos, pero no han tenido ninguna utilidad práctica.

Pueden indicarse ciertas generalizaciones útiles relativas a las solubilidades de los sólidos. La solubilidad de un sólido dado depende de la temperatura, de la naturaleza del disolvente líquido y de la naturaleza del sólido. Por regla general la solubilidad de un sólido en un líquido aumenta al elevarse la temperatura, pero la rapidez de este aumento difiere en los distintos sólidos, y en algunos casos disminuye la solubilidad al elevarse la temperatura en ciertos intervalos. Las curvas temperatura-solubilidad son por lo general continuas, pero en algunos casos presentan discontinuidades. Estas suelen ser asociadas a la existencia de diferentes formas hidratadas del sólido en solución, siendo los distintos hidratos estables a diferentes intervalos de temperatura y mostrando diversos grados de variación de su solubilidad con la temperatura.

Se conoce poco en relación con la influencia concreta de la naturaleza del sólido y del líquido sobre la solubilidad. En general, las sustancias estrechamente emparentadas desde el punto de vista químico muestran una tendencia acusada a disolverse mutuamente. La solubilidad de los electrolitos, como las sales inorgánicas, en líquidos orgánicos es de ordinario pequeño y mucho menor que en el agua. A menos que los calores latentes de fusión difieran considerablemente, de dos sólidos, el que tenga su punto de fusión más elevado suele ser menos soluble a una temperatura dada que el de punto de fusión más bajo.

Se ha encontrado que la solubilidad de los sólidos aumenta algo al disminuir el tamaño de sus partículas.

El efecto de la presión sobre la solubilidad de un sólido en un líquido es muy pequeño y puede consistir en aumentar o disminuir la solubilidad. Para las sustancias orgánicas es mucho mayor la variación de la solubilidad con la presión en comparación con las sustancias inorgánicas.

Puede existir una amplia y compleja variedad de relaciones de fase en los sistemas en que intervienen fases sólidas, puesto que la formación entre ellas de compuestos, soluciones sólidas, etc., y el número de fases sólidas que pueden coexistir son ilimitadas.

II.1.2.d.1.- CASOS ESPECIFICOS DE EQUILIBRIO SOLIDO-LIQUIDO y GAS-SOLIDO.

a.- LIXIVIACION: En lixiviación se pueden distinguir dos casos: Cuando el sólido se pone en contacto con una gran cantidad de líquido disolvente, el material soluble contenido en la fase sólida se disuelve totalmente en el líquido. En el equilibrio, la masa global de solución no está saturada con respecto al soluto y posee la misma composición que el líquido residual retenido por la fase sólida. Y cuando la cantidad de disolvente es insuficiente para disolver todo el soluto, queda algo de soluto sin disolver en la fase sólida mientras que la fase lí-

quida está saturada con soluto.

En lo dicho anteriormente se supone que el soluto está mecánicamente disperso en toda la fase sólida y libre para disolverse en el líquido.

b.-CRISTALIZACION: En cristalización el equilibrio se alcanza cuando las aguas madres están saturadas. En la bibliografía se pueden encontrar datos de solubilidad. En la Fig. [II.7] se presentan curvas típicas de solubilidad en función de la temperatura. La mayor parte de los materiales siguen líneas análogas a la curva 1, de forma que la solubilidad aumenta mas o menos con la temperatura. Algunas sustancias se comportan como la curva 2, donde la solubilidad varía poco con la temperatura. Finalmente, otras presentan lo que se llama una curva de solubilidad invertida, o sea que su solubilidad disminuye al aumentar la temperatura.

Muchas sustancias inorgánicas importantes cristalizan con agua de cristalización. En algunos sistemas se forman varios hidratos, dependiendo de la concentración y la temperatura, y los equilibrios pueden ser entonces bastante complicados.

El calor de cristalización es de gran importancia para los balances de calor utilizados en los cálculos de los cristalizadores. Este calor corresponde al calor latente desprendido cuando se forma un sólido a partir de una solución. En gene---

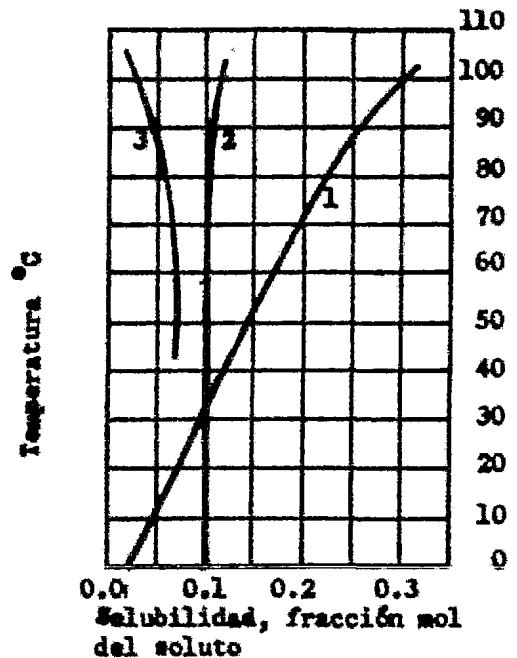


Fig. (II.7)

[Ref. 2]

ral, la cristalización es exotérmica, y el calor de cristalización varía con la temperatura y la presión. Desde un punto de vista riguroso, el calor de cristalización está relacionado -- con el calor de disolución de los cristales en una gran cantidad de disolvente y con el calor de dilución de la solución -- desde la saturación hasta una dilución elevada. En la bibliografía existen datos sobre calores de disolución y dilución, los cuales, juntamente con los datos de calores específicos de soluciones y cristales, se pueden utilizar para obtener el balance de energía en los cristalizadores.

c.- SECADO: Las relaciones de equilibrio importantes en secado son las correspondientes a un sólido y aire húmedo [o un gas húmedo]. Los equilibrios de humedad de sólidos se dan generalmente mediante relaciones entre la humedad relativa del aire o gas y el contenido del sólido en kilogramos de agua por kilogramo de sólido totalmente seco. En la Fig. (II.8) se dan ejemplos de estas relaciones. Las curvas de este tipo son prácticamente independientes de la temperatura.

Cuando un sólido húmedo se pone en contacto con aire de menor humedad que la correspondiente a la de equilibrio con el contenido de humedad del sólido, este tiende a perder humedad y secarse hasta alcanzar el equilibrio con el aire. Cuando la humedad del aire es superior a la de equilibrio con el sólido, este absorbe humedad del aire hasta que se alcanza el equilibrio.

HUMEDAD DE EQUILIBRIO Y HUMEDAD LIBRE. El aire que entra en un secadero rara vez está totalmente seco, sino que contiene algo de vapor de agua y posee, por tanto, una determinada humedad relativa. El contenido en humedad del sólido que sale del secadero no puede ser inferior al correspondiente al equilibrio -- con la humedad del aire que entra. Esta porción de agua, contenida en el sólido húmedo, que no puede ser separada por el -- aire de entrada, o causa de su humedad, se llama humedad de equilibrio del sólido.

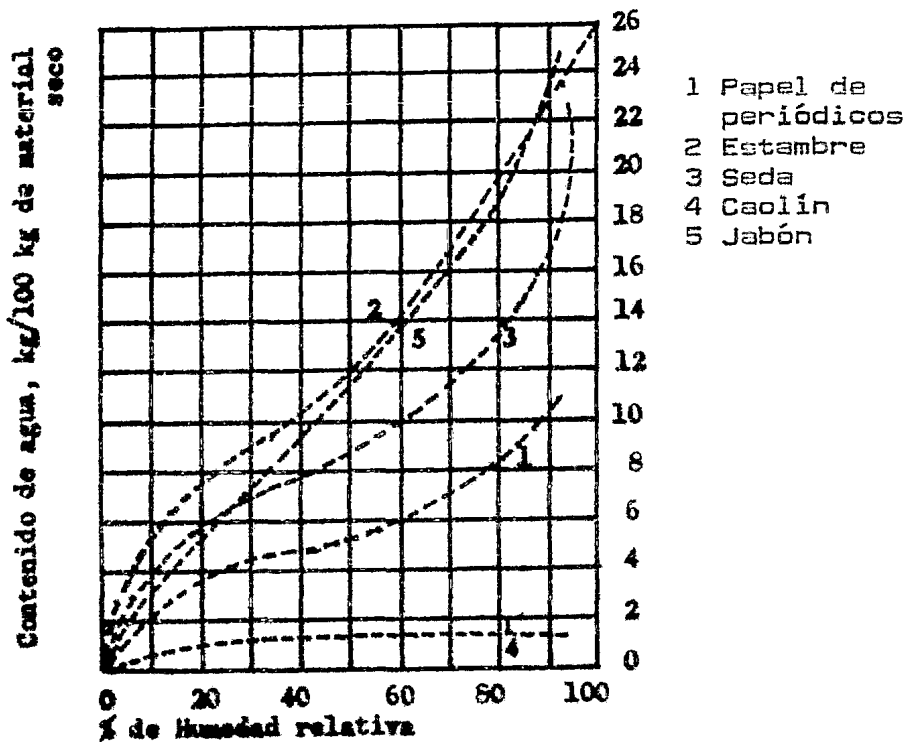


Fig. (II.8)

[Ref. 2]

El agua libre o humedad libre es la diferencia entre el -- contenido total de agua del sólido y el contenido de agua en - el equilibrio.

AGUA LIGADA Y NO LIGADA. Si una curva de equilibrio como la de la Fig. (II.8) se prolonga hasta su intersección con el eje pa ra una humedad relativa del 100 %, la humedad del sólido así - definida es la menor que tiene que tener el material para que el agua contenida en el mismo ejerza una presión de vapor tan grande como la del agua líquida a la misma temperatura. Si el material contiene mas agua que la indicada por esta intersec- ción tendrá una presión de vapor igual a la del agua a la tem- peratura del sistema. Esto permite distinguir entre dos tipos de agua retenida por un determinado material. El agua hasta la menor concentración que está en equilibrio con aire saturado, y que viene dada por la intersección de las curvas de la Fig.

(II.8) con la línea del 100 % de humedad, se llama agua ligada, debido a que ejerce una presión de vapor menor que la del agua líquida a la misma temperatura. Las sustancias que contienen agua ligada se llaman frecuentemente higroscópicas. La condición para la cual madera, cuero, fibras textiles y otros materiales celulares, están en equilibrio con aire saturado se llama punto de saturación de fibra.

El agua ligada puede existir en diversas formas. El agua líquida dentro de capilares delgados ejerce una presión de vapor anormalmente baja debido a la gran curvatura cóncava de la superficie; la humedad contenida dentro de células o paredes fibrosas puede sufrir una disminución de la presión de vapor a causa de los sólidos disueltos; el agua contenida en las sustancias orgánicas naturales se encuentra formando combinaciones físicas y químicas, cuya naturaleza y fuerza depende del tipo de sólido y su humedad.

Por otra parte, el agua no ligada ejerce toda su presión de vapor y esta principalmente contenida en los huecos del sólido.

II.2.- GENERALIDADES SOBRE OPERACIONES UNITARIAS QUE IMPLICAN RELACIONES DE FASES EN EQUILIBRIO FISICO.

En esta sección se hace una breve descripción de las diferentes Operaciones Unitarias que tienen relación con el equilibrio físico.

Una Operación la podemos representar como un paso, etapa o etapa, o como una serie de los mismos, en la cual dos fases diferentes se ponen en contacto íntimo y se procede a separarlas mecánicamente. Durante el contacto se difunden varios componentes de la mezcla, redistribuyéndose entre las fases. Las dos fases resultantes se han aproximado al equilibrio y por lo tanto tienen composiciones diferentes a las de las fases iniciales. Mediante contactos y separaciones sucesivas de fases diferentes (una operación de contacto múltiple) es posible llegar a grandes cambios en la composición de las fases. En el paso de equilibrio, las dos fases están bien mezcladas durante un tiempo suficiente que permita establecer el equilibrio termodinámico entre las fases que se procesan en el paso. En el equilibrio, ningún cambio neto de composición posterior de las fases es posible, dado un conjunto de condiciones de operación ya establecidas.

II.2.1.- DESTILACION.- En esta operación, una fase vapor entra en contacto con una fase líquida y la masa se transfiere tanto del líquido al vapor como del vapor al líquido. El líquido y el vapor contienen generalmente los mismos componentes, pero en cantidades relativamente diferentes. El líquido está en su punto de burbuja y el vapor en equilibrio está en su punto de rocío. La masa se transfiere simultáneamente del líquido por vaporización y del vapor por condensación. El efecto neto es un aumento en la concentración del componente más volátil en el vapor por un aumento en la concentración del componente menos volátil en el líquido. Los líquidos con diferentes presiones de vapor a la misma temperatura, pueden separarse por destilación.

II.2.2.- ABSORCION.- Incluye la transferencia de un componente soluble de una fase gaseosa a un absorbente líquido relativamente no volátil. En el caso mas sencillo de la absorción gaseosa, ninguno de los absorbentes líquidos vaporiza y el gas contiene solamente un constituyente, el cual se disolverá en cualquier cantidad. El absorbente líquido se encuentra por abajo de su punto de burbuja y la fase gaseosa está muy por encima de su punto de rocío.

II.2.3.- AGOTAMIENTO O DESABSORCION.- Es el proceso opuesto a la absorción. En este caso, el gas soluble se transporta del líquido a la fase gaseosa, en virtud de que la concentración en la fase líquida es mayor de la que está en equilibrio con el gas.

II.2.4.- EXTRACCION LIQUIDO-LIQUIDO.- La operación de extracción líquido-líquido es aquella en la cual se realiza la separación de mezclas de distintas sustancias tratándolas con un disolvente líquido selectivo. Al menos uno de los componentes de la mezcla debe ser inmisible o parcialmente miscible con el disolvente líquido selectivo, de tal manera que se formen cuando menos dos fase sobre el intervalo completo de las condiciones de funcionamiento utilizadas. Para que una separación se realice, uno o mas de los componentes tienen que ser disueltos por el disolvente, a partir de la mezcla, con preferencia a los otros. La fase rica en disolvente que contiene el componente disuelto preferentemente, o soluto, se llama capa extracto; la fase residual formada por el componente no disuelto, o diluyente, y que corrientemente contiene un poco de disolvente se le llama capa refinada o residuo. Una y otra capa pueden ser la superior o ligera, o la inferior o pesada según sus densidades relativas. El residuo, o sustancias que quedan exentas de disolvente de las capas extracto y refinado después de eliminar el disolvente se llama a menudo el extracto y el refinado respectivamente. El disolvente puede ser particularmente miscible con uno solo o con ambos de los componentes de la ali

mentación. En casos especiales, encontrados con menos frecuencia en la práctica, el disolvente es esencialmente inmisible con uno de los componentes de la alimentación. Se dice que el disolvente es selectivo para el componente de la alimentación cuya proporción es mayor en el extracto que en el refinado o en la alimentación inicial.

II.2.5.- LIXIVIACION.- La lixiviación es la extracción en la que una mezcla o una fase de sólidos se separa en sus componentes, o en la que un componente valioso se recupera de una masa sólida mediante el tratamiento por un líquido. En general, las operaciones que comprenden el tratamiento de sólidos por disolventes, incluyen cierto número de circunstancias distintas. El sólido suele consistir en una mezcla heterogénea de varios -- constituyentes, uno o más de los cuales pueden ser líquidos o sólidos en disolución, pero puede ser una mezcla homogénea tal como una solución sólida o una sal doble. Los sólidos que se lixivian se hallan en una diversidad de formas físicas, y a menudo se requiere su desintegración para formar una gran superficie de contacto con el disolvente. Cuando ambos de los constituyentes a separar son solubles en el disolvente en grado elevado, la operación se clasifica adecuadamente como una lixiviación fraccionada.

II.2.6.- EVAPORACION.- Es el proceso de concentración de una solución que consta de un soluto no volátil y un líquido volátil. Se lleva a cabo vaporizando una parte del disolvente con el fin de obtener una solución concentrada.

II.2.7.- HUMIDIFICACION Y DESHUMIDIFICACION.- La humidificación es el proceso de la evaporación de un líquido dentro de un gas y consiste, en esencia, en la transferencia a la masa principal del gas, de moléculas de vapor procedentes de la capa de gas en contacto con el líquido y que tienen una presión de vapor prácticamente igual a la de éste. La deshumidificación es el proceso de la condensación de un vapor en porción --

con un gas que no se condensa, y es la opuesta a la humidificación, ya que depende de la transferencia de vapor de la masa del gas a la capa de vapor contigua al líquido, por efecto de un gradiente de la presión parcial. Al mismo tiempo, se producen variaciones de la temperatura del líquido y el gas debido al intercambio de calor entre los fluidos y el calor latente suministrado al vapor transferido o quitado al mismo.

II.2.8.- CRISTALIZACION.- Es la formación de partículas sólidas en el seno de una fase homogénea. Su amplia aplicación se debe al hecho de que a partir de soluciones impuras se forman cristales puros. En la cristalización se transfiere masa de la solución a la superficie del cristal y proporciona un método práctico para obtener sustancias químicas concentradas y puras, ya que un cristal es en si mismo necesariamente puro. Las partículas se pueden formar en una fase gaseosa como en el caso de la nieve, mediante solidificación a partir de un líquido como en la congelación del agua para formar hielo o manufactura de monocristales o bien por cristalización de soluciones líquidas. La sección correspondiente a esta operación está restringida a este último caso.

CAPITULO III

MODELO

III.1.- COMPARACION DE LAS ECUACIONES DE BALANCE DE MATERIA Y ENERGIA ENTRE LAS DIFERENTES OPERACIONES.

La Figura (III.1) es una comparación entre las diferentes clases de los procesos de separación y representa en forma global las propiedades fundamentales que identifican a cada Operación Unitaria.

Esta tabla nos orientará para definir y especificar todas las características y propiedades de cada operación que deberán ser tomadas en consideración para poder deducir en forma óptima tanto el modelo físico como los modelos matemáticos de materia y energía en el proyecto del simulador.

La primera columna, es una clasificación de las diferentes Operaciones Unitarias que se están estudiando. En la segunda columna se listan propiedades físicas características ó principios de separación de cada una. La tercera ilustra el diagrama de flujo y la forma de operar para cada operación, así como el significado de cada corriente. En la última columna se desarrollan los balances de materia y energía para cada diagrama de flujo ilustrado.

Las siguientes observaciones deberán ser aplicadas al desarrollar el simulador, para que este reúna todas las características propias de cada operación y pueda aplicarse a diferentes condiciones específicas, limitadas por el campo de acción del mismo.

La propiedad física que identifica a cada operación es variable, según las distintas relaciones de fases. El concepto de equilibrio físico, considerado en los balances de materia y energía, deberá representar todas las propiedades físicas características de cada operación. Es decir, deberá introducirse en los balances en forma generalizada y en él se podrán representar equilibrios para fases líquido-líquido, gas-líquido, sólido-líquido, etc..

En el modelo físico para el simulador, todos los diferen-


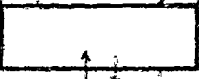
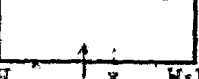

tes diagramas de flujo deberán estar incluidos. Es decir, a -- partir del modelo se podrán deducir los diagramas de las dis-- tintas operaciones.

Las corrientes en los diferentes diagramas de flujo, repre-- sentan distintas fases (sólido, líquido o gas). Al deducir los balances de materia y energía para el simulador, el tratamien-- to que se le otorgará a cada corriente deberá generalizarse o sea, esta será independiente de la fase que represente.

Los balances totales de materia y energía para cada opera-- ción deberán estar incluidos en los balances desarrollados pa-- ra el modelo físico propuesto.

Fig. [III.1]

| OPERACION UNITARIA | PROPIEDAD FISICA QUE IDENTIFICA A LA OPERACION UNITARIA | DIAGRAMA DE FLUJO | A.- EC. PARA EL BALANCE DE MATERIA B.- EC. PARA EL BALANCE DE ENERGIA |
|---------------------|---|---------------------------------------|---|
| DESTILACION | VOLATILIDAD RELATIVA (DIFERENCIA EN VOLATILIDADES) | <p>VAP. LIQ.</p> <p>VAP. LIQ.</p> | <p>A.- $U + V = T + W$</p> <p>B.- $UH_U + VH_V \pm Q = TH_T + WH_W$</p> |
| ABSORCION DESORCION | SOLUBILIDAD | <p>GAS LIQ.</p> <p>GAS LIQ.</p> | <p>A.- $U + V = T + W$</p> <p>B.- $UH_U + VH_V \pm Q = TH_T + WH_W$</p> |
| EXTRACCION | SOLUBILIDAD | <p>LIQ. LIQ.</p> <p>LIQ. LIQ.</p> | <p>A.- $U + V = T + W$</p> <p>B.- $UH_U + VH_V \pm Q = TH_T + WH_W$</p> |
| LIXIVIACION | SOLUBILIDAD | <p>SOLIDO LIQ.</p> <p>SOLIDO LIQ.</p> | <p>A.- $U + V = T + W$</p> <p>B.- $UH_U + VH_V \pm Q = TH_T + WH_W$</p> |

| OPERACION UNITARIA | PROPIEDAD FISICA QUE IDENTIFICA A LA OPERACION UNITARIA | DIAGRAMA DE FLUJO | A. - EC. DEL BALANCE DE MATERIA B. - EC. DEL BALANCE DE ENERGIA |
|-------------------------------------|---|---|---|
| HUMIDIFICACION DESHUMIDIFICACION | HUMEDAD | <p>GAS+VAP. LIQ.</p> <p>$T; H_T$ ↑ ↓ $U; H_U$</p>  <p>V; H_V ↑ ↓ $W; H_W$</p> <p>GAS+VAP. LIQ.</p> | <p>A. - $U + V = T + W$</p> <p>B. - $UH_U + VH_V \pm Q = TH_T + WH_W$</p> |
| EVAPORACION | VOLATILIDAD | <p>VAP. LIQ.</p> <p>$T; H_T$ ↑ ↓ $U; H_U$</p>  <p>↑ Q ↓ $W; H_W$</p> <p>LIQ.</p> | <p>A. - $U = T + W$</p> <p>B. - $UH_U \pm Q = TH_T + WH_W$</p> |
| SECA DO | HUMEDAD | <p>GAS+VAP. SOLIDO+LIQ.</p> <p>$T; H_T$ ↑ ↓ $U; H_U$</p>  <p>V; H_V ↑ ↓ $W; H_W$</p> | <p>A. - $U + V = T + W$</p> <p>B. - $UH_U + VH_V \pm Q = TH_T + WH_W$</p> |
| CRISTALIZACION | SOLUBILIDAD | <p>SOLUCION SOLUCION</p> <p>$T; H_T$ ↑ ↓ $U; H_U$</p>  <p>↓ Q ↑ $W; H_W$</p> <p>SOLIDO</p> | <p>A. - $U = W + T$</p> <p>B. - $UH_U \pm Q = TH_T + WH_W$</p> |

III.2.- PROPOSICION DE UN MODELO QUE REPRESENTA A LAS OPERACIONES UNITARIAS EN SUS DIFERENTES FORMAS DE OPERACION.

En muchos casos cuando se estudian sistemas muy amplios y complicados es recomendable recurrir a modelos que los representen lo más completamente posible para su mayor comprensión. Si bien es cierto, ningún modelo es una imagen exacta de lo que representa, las aproximaciones son siempre necesarias y la precisión requerida dependerá de la amplitud con que sea tratado el tema.

La gran flexibilidad de estos modelos en su diseño y manejo, ofrecen muchas ventajas que pueden ser aprovechadas y aplicadas a resolver situaciones reales, ya sea a través de expresiones matemáticas, o bien a través de una descripción física.

Esta aproximación desarrollará una comprensión de las similitudes básicas entre los principios de las diversas Operaciones Unitarias y agrupará a aquellas operaciones que se llevan a cabo en equipo similar o en el cual tienen lugar funciones similares.

El modelo que a continuación se propone deberá reunir todas las características propias del funcionamiento de cada operación, por lo cual es muy importante analizar y observar cada una de ellas para lograr resultados aceptables.

III.2.1.- CAMPO DE OPERACION DEL SIMULADOR.

Antes de desarrollar el modelo, será conveniente explicar el campo de operación del simulador para evitar confusiones en su aplicación.

Analizando las Operaciones Unitarias con equilibrio físico, éstas las podemos agrupar en términos de aquellas operaciones que se llevan a cabo en equipo similar de acuerdo a la siguiente clasificación:

- Operaciones de contacto discontinuo o por etapas.
- Operaciones de contacto continuo.

Las operaciones de contacto discontinuo pueden ser clasificadas a su vez de acuerdo al tipo de funcionamiento de sus equipos en las dos siguientes ramas:

- Operación continua o estable. En este tipo de operaciones no hay paros y las condiciones en un punto particular no varían con el tiempo.
- Operaciones intermitentes o inestables. Su ciclo de operación está formado por arranques y paros transitorios y sus condiciones varían con el tiempo.

Considerando aquellas operaciones que se llevan a cabo en equipo similar ó aquellas en donde el tipo de operación es -- muy semejante, definiremos el campo de operación del simulador de la siguiente forma:

- Las Operaciones Unitarias con equilibrio físico.

con las siguientes restricciones:

- Operaciones de contacto discontinuo o por etapas.
- Operaciones en funcionamiento continuo o estable .

En este campo todas las operaciones tendrán relaciones -- bastante intrínsecas con similitudes y principios básicos, y presentarán fundamentos muy similares.

III.2.2.- MODELO FISICO: ETAPA DE EQUILIBRIO O IDEAL.

El modelo propuesto es el artificio en el cual dos corrientes se ponen en contacto, se permite que alcancen un estado de equilibrio y se supone que siempre proporcionará dos corrientes de productos en equilibrio físico una con respecto a la otra. Este tipo de contacto por etapas puede ilustrarse en la siguiente figura:

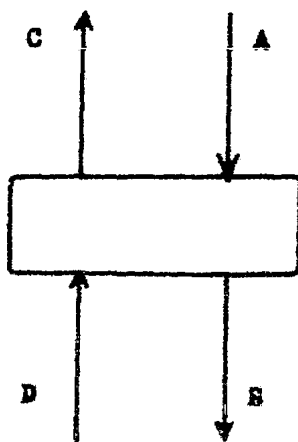


Fig.(III.2)

La Fig. [III.2] representa una etapa de equilibrio estable o estacionario, y será la base para poder desarrollar el modelo físico final. El tratamiento que se le otorgará será generalizado y no requerirá una especificación de la propiedad que va a transferirse o de la naturaleza de las fases que se han contactado. Ejemplo: Cualquiera de las corrientes puede ser gas, líquido o sólido. Por lo tanto, la presentación será hecha en los términos generales más completos posibles.

Este modelo sencillo, para una etapa en equilibrio, representa la base de las estructuras de funcionamiento de las diversas Operaciones Unitarias, según se puede observar en la Figura [III.1]. Si el modelo de la Fig. [III.2] lo generalizamos y adaptamos a cualquier operación, en sus variadas formas de funcionamiento, obtendremos el modelo físico ilustrado en la Fig. [III.3].

Las corrientes de recirculación "J" y "R", así como las corrientes de paso "L" e "I", generalizan el modelo para su aplicación en cualquier operación con variados formas de funcionamiento.

Una separación más completa y eficiente puede obtenerse por la introducción de corrientes de recirculación o de reflujos en uno o ambos extremos de la etapa. Así, las corrientes de recirculación optimizarán los procesos para una mayor separa-

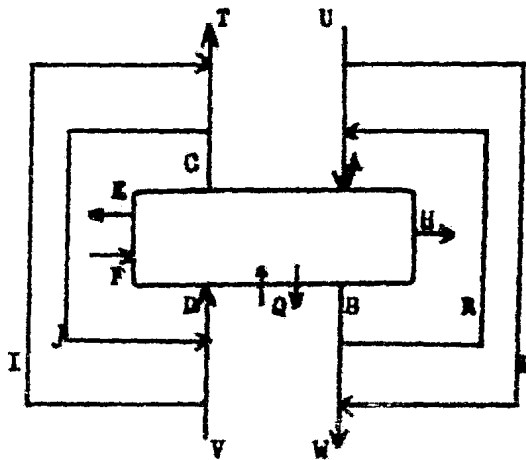


Fig.(III.3)

ción y las corrientes de paso servirán para controlar el grado de esta separación. Es importante aclarar que existen variaciones posibles de combinaciones entre estas corrientes, - ejemplo: "R" podría ocupar el lugar de "L", "J" podría ocupar el lugar de "I", etc., pero si se observa que no es funcional la existencia de una corriente de recirculación y una de paso al mismo tiempo, podrá escogerse la combinación de corrientes ilustrada [Fig. [III.3], que a la vez que representa al proceso, genera un modelo matemático mas simple.

El modelo se complementa con las corrientes "E", "H" y -- "F". Las dos primeras ["E" y "H"] serán corrientes de control y estarán en equilibrio una con respecto a la otra. Además, -- "H" estará en equilibrio con "C", y "E" estará en equilibrio con "B". La corriente "F" representará una corriente extra de alimentación, necesaria por ejemplo al analizar el plato de a limentación en una torre de destilación.

Finalmente el intercambio de energía de nuestro sistema - con sus alrededores, lo representaremos por "Q", que tendrá - signo positivo cuando el sistema gane energía y signo negativo cuando este pierda energía.

III.2.3.- MODELOS MATEMATICOS.

Un punto esencial en el desglose de los balances de materia y de energía, es la introducción del concepto de equilibrio físico en una forma generalizada y aplicable a cualquier sistema de fases dentro de las diferentes Operaciones Unitarias.

Será importante aclarar que este principio de equilibrio físico deberá representar fases vapor-líquido, líquido-líquido, sólido-líquido, etc., y por lo tanto deberá ser introducido bajo un concepto generalizado.

Del análisis de las operaciones como evaporación y destilación, en las cuales las Fases presentes son vapor y líquido, se puede notar que el equilibrio físico está íntimamente relacionado con las diferencias en volatilidad de los compuestos presentes, dichas diferencias dependen de las presiones de vapor de cada uno de los componentes. En operaciones que involucran contacto líquido-líquido (Extracción), el principio de equilibrio físico esta basado en la diferencia de solubilidades de las diferentes especies presentes en las fases líquidas. Para la absorción, la deposición en sistemas de fases gas-líquido se basa en la solubilidad de un gas en un líquido no volátil. En operaciones como lixiviación ó cristalización, el equilibrio se caracteriza por la diferencia de solubilidad de un sólido en diferentes fases líquidas. Finalmente la operación de secado, las fases sólido-gas son separadas por la existencia de un gradiente de presiones parciales en la fase gaseosa.

En todas las operaciones, la separación de fases se lleva a cabo cuando existe un gradiente de la propiedad que lo identifica (potencial). Todas estas propiedades deberán estar representadas en el concepto de equilibrio físico que se requiere para desarrollar los modelos matemáticos. Su finalidad será el definir la relación existente entre las fases en equili

brio, esto es, conocer las especies que las forman y su composición bajo determinadas circunstancias.

El concepto de equilibrio físico propuesto y usado en el desarrollo de los modelos matemáticos es la relación de las concentraciones para el mismo componente en las diferentes fases de salida, las cuales se consideran en equilibrio. De acuerdo con la Fig. (III.4), las relaciones de equilibrio son las siguientes:

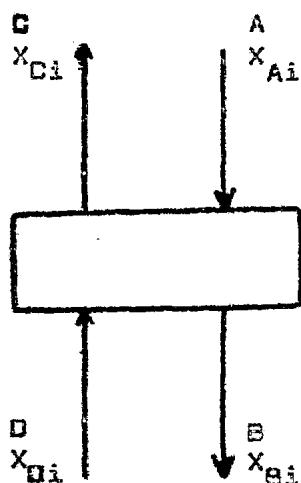


Fig. (III.4)

$$K_1 = \frac{X_{C1}}{X_{B1}},$$

$$K_2 = \frac{X_{C2}}{X_{B2}},$$

⋮

$$K_n = \frac{X_{Cn}}{X_{Bn}}$$

$$K_i = \frac{X_{Ci}}{X_{Bi}} \quad \text{Ec. (III.1)}$$

donde:

X_{Ai} , X_{Bi} , X_{Ci} y X_{Di} : Fracciones de concentración para el componente i .

K_i : Relación de concentraciones para el componente i .

n : Número de componentes ($i = 1, 2, 3, \dots, n$)

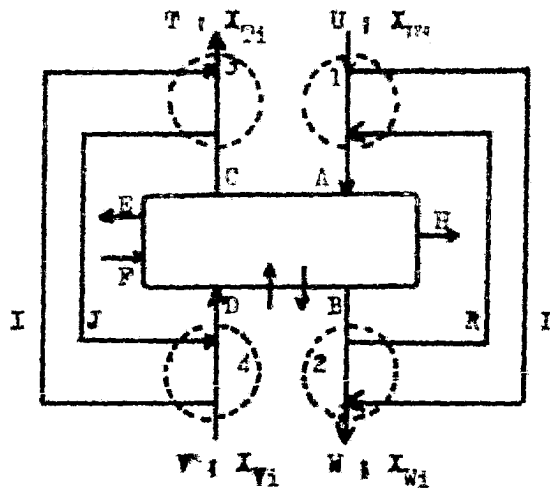
En la Fig. (III.4), las corrientes "B" y "C" son las corrientes en equilibrio físico una con respecto a la otra. La

corriente "C" representará, para sistemas vapor-líquido, la fase vapor, es decir, la mezcla de componentes mas volatiles o la llamada fase ligera, y "B" representará la fase líquida o pesada. Para sistemas líquido-líquido la corriente "C" representará el extracto y "B" el refinado. Para operaciones gas-líquido, "C" significará la Fase gas y "B" la corriente líquida. Etc..

III.2.3.a.- BALANCE DE MATERIA.

En la Fig. (III.5) "V", "U" y "F" se refieren a las corrientes de alimentación; "T", "W", "E" y "H" serán las corrientes de salida; "I" y "L" son de paso, "J" y "R" son de recirculación; "A" y "D" son las corrientes que entran directamente a la etapa, "B" y "C" son las corrientes que salen de la etapa y las cuales, se consideran en equilibrio.

Fig.(III.5)



La composición de cada componente en determinada corriente estará representada por: " X_{Wi} ", " X_{Vi} ", " X_{Ti} ", " X_{Ai} ", etc., donde el subíndice con letra mayúscula identificará la corriente e "i" identificará el componente;

$$i = 1, 2, 3, \dots, n$$

para "n" componentes.

Será importante definir la base de funcionamiento del simulador para demostrar su funcionalidad ante situaciones reales. Se hacen las siguientes observaciones:

- Es común conocer todas las características de las corrientes de alimentación.
- Las corrientes de recirculación "R" y "J" así como las de paso "L" e "I" son corrientes de control. Su masa y composición dependerán de las corrientes de las cuales provienen, es decir, "L" es función de "U", y " X_{Li} " es igual a " X_{Ui} ", etc..

$$\begin{array}{ll} L = F [U] & X_{Li} = X_{Ui} \\ I = F [V] & X_{Ii} = X_{Vi} \\ R = F [B] & X_{Ri} = X_{Bi} \\ J = F [C] & X_{Ji} = X_{Ci} \end{array}$$

- Las dos corrientes de extracción "E" y "H" son estrictamente de control, sus masas deben ser conocidas. La composición será

$$X_{Hi} = X_{Bi}$$

$$X_{Ei} = X_{Ci}$$

- De acuerdo a las condiciones de operación, se conocen las condiciones de equilibrio.
- Se requiere conocer la cantidad y composición de las corrientes de extracción.

En el desarrollo que se presenta a continuación, ha sido escrito, el juego general de ecuaciones que se emplean para definir las condiciones totales de salida.

De la Fig. (III.5), el balance total de materia es:

$$U + V + F = W + T + E + H \quad \text{Ec. (III.2)}$$

El balance total para el componente "i":

$$U(X_{Ui}) + V(X_{Vi}) + F(X_{Fi}) = W(X_{Wi}) + T(X_{Ti}) + E(X_{Ei}) + H(X_{Hi}) \quad \text{Ec. (III.3)}$$

El balance total y parcial en el sistema 2 es:

$$B + L = W + R$$

$$B(X_{Bi}) + L(X_{Li}) = W(X_{Wi}) + R(X_{Ri})$$

El balance total y parcial en el sistema 3 es:

$$C + I = T + J$$

$$C(X_{Ci}) + I(X_{Ii}) = T(X_{Ti}) + J(X_{Ji})$$

Del balance en el sistema 2 resulta:

$$X_{Bi} = \frac{W(X_{Wi}) - L(X_{Li})}{W - L} \quad \text{Ec. (III.4)}$$

Del balance en el sistema 3 :

$$X_{Ti} = \frac{(T - I)(X_{Ci}) + I(X_{Vi})}{T} \quad \text{Ec. (III.5)}$$

De la Ec. (III.1) [Relación de equilibrio], se obtiene:

$$X_{Ci} = K_i (X_{Bi}) \quad \text{Ec. (III.6)}$$

De la Ec. (III.2):

$$T = U + V + F - W - E - H \quad \text{Ec. (III.7)}$$

Sustituyendo las Ecuaciones (III.4), (III.5), (III.6) y (III.7) en la Ec. (III.3), y resolviendo para " X_{Wi} " resulta:

$$X_{Wi} = \frac{U(X_{Ui}) + V(X_{Vi}) + F(X_{Fi}) - I(X_{Vi}) + \frac{L(X_{Li})}{W-L} - [(U+V+F-W-H-I)K_i + H]}{W + \frac{W}{W-L} [(U+V+F-W-H-I)K_i + H]} \quad \text{Ec. (III.8)}$$

Dado que (para la corriente "W"):

$$1 = \sum_{i=1}^n X_{Wi}$$

la Ec. (III.8) se modifica de la siguiente manera:

$$1 = \sum_{i=1}^n \frac{U(X_{Ui}) + V(X_{Vi}) + F(X_{Fi}) - I(X_{Vi}) + \frac{L(X_{Ui})}{W-L}}{W + \frac{W}{W-L} [(U + V + F - W - H - I)K_i + H]}$$

Ec.(III.9)

En procesos isotérmicos, esta ecuación contiene como única incógnita a "W", por lo tanto, si se resuelve la ecuación aplicando un método numérico apropiado, parte del balance de materia esta resuelto. El balance se complementa con las ecuaciones (III.4), (III.5), (III.6), (III.7) y (III.8).

III.2.3.b.- BALANCE DE ENERGIA.

En la Fig. (III.6), " H_W ", " H_U ", " H_F ", etc. representan -- las entalpias respectivas para cada corriente, "H" representa la entalpia y el subíndice con letra mayúscula identifica la corriente.

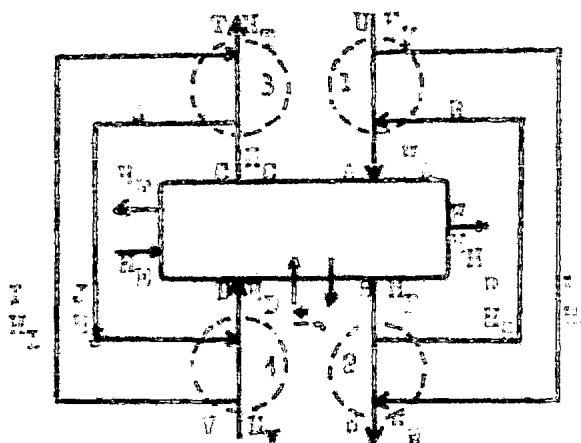


Fig.(III.6)

El problema que resolveremos será calcular la temperatura final de equilibrio al mezclarse las fases, ya sea en un sistema adiabático, endotérmico o exotérmico. Este será el objetivo del simulador. El procedimiento general será:

- Suponer una temperatura de equilibrio de las corrientes de extracción.
- Obtener las relaciones de concentraciones en equilibrio para la temperatura supuesta.
- Realizar el balance de material para las condiciones de equilibrio establecidas por la temperatura.
- Realizar el balance de energía para todas las corrientes y verificar si el valor supuesto cumple con el balance.

a.- CALCULO DE ENTALPIAS.

1.- MEZCLA LIQUIDA.- La entalpia se calculará con la siguiente expresión:

$$H_{Liq} = \Delta H_m + \sum_{i=1}^n X_i \int_{t_0}^{t_L} C_{Li} dt$$

donde: i = El componente referido

n = Número de componentes de la mezcla líquida

X_i = Fracción mol para el componente referido

C_{Li} = Calor específico para el componente referido

ΔH_m = Calor de mezcla a t_L

t_0 = Temperatura de referencia

t_L = Temperatura de la mezcla líquida

Si se consideran valores promedio para los calores específicos de cada componente, obtendremos la siguiente ecuación:

$$H_{Liq} = \Delta H_m + \sum_{i=1}^n X_i \bar{C}_{Li} [t_L - t_0]$$

2.- MEZCLA DE VAPORES.- La entalpia de la mezcla estar  dada por la expresi3n:

$$H_V = \Delta H_m + \sum_{i=1}^n Y_i \left[\int_{t_0}^{t_{Ei}} C_{Li} dt + \lambda_i + \int_{t_{Ei}}^{t_G} C_{Vi} dt \right]$$

donde: H_V = Entalpia de la mezcla de vapores.

C_{Li} = Calores espec ficos de los componentes l quidos puros.

C_{Vi} = Calores espec ficos de los componentes puros en estado de vapor.

λ_i = Calores latentes para cada componente a su temperatura de ebullici3n.

ΔH_m = Calor de mezcla en fase vapor a t_G .

t_G = Temperatura de la mezcla de vapores.

t_{Ei} = Temperatura de ebullici3n para cada componente.

t_0 = Temperatura de referencia.

Y_i = Fracci3n mol de cada componente.

Considerando los calores de vaporizaci3n de los componentes puros a la temperatura final de mezcla, la ecuaci3n anterior se puede escribir en la forma siguiente:

$$H_V = \Delta H_m + \sum_{i=1}^n Y_i \left[\int_{t_0}^{t_G} C_{Li} dt + \lambda_i \right]$$

Considerando calores espec ficos promedio, se obtiene:

$$H_V = \Delta H_m + \sum_{i=1}^n Y_i \left[\bar{C}_{Li} (t_G - t_0) + \lambda_i \right]$$

Si se tomara el calor de vaporizaci3n a la temperatura de referencia " t_0 ", la ecuaci3n para calcular la entalpia de la mezcla de vapores ser a:

$$H_V = \Delta H_m + \sum_{i=1}^n Y_i \left[\bar{C}_{Vi} (t_G - t_0) + \lambda_i \right]$$

3.- MEZCLA DE GASES.- Es similar a la de vapores anulando el término de calor latente.

4.- MEZCLA DE SÓLIDOS.- Si se requiere la entalpia de una mezcla de sólidos, puede aplicarse la siguiente ecuación:

$$H_{\text{Sólido}} = \Delta H_m + \sum_{i=1}^n X_i \int_{t_0}^t C_i dt$$

donde: i = Componente referido.

n = Número de componentes de la mezcla sólida.

X_i = Fracción mol para el componente referido.

C_i = Calor específico para el componente referido.

ΔH_m = Calores de mezcla [sólido en agua] ó un calor de formación referido a t_0 .

t_0 = Temperatura de referencia.

t = Temperatura de la mezcla sólida.

Si se consideran valores promedio para los calores específicos de cada componente, se obtiene la siguiente ecuación:

$$H_{\text{Sólido}} = \Delta H_m + \sum_{i=1}^n X_i \bar{C}_i (t - t_0)$$

b.- BALANCE.

Al aplicar un balance de energía al modelo propuesto, será importante observar lo siguiente:

- Las temperaturas de las corrientes de equilibrio "C", -- "B", "H", "E", "R" y "J" corresponderán a la temperatura de equilibrio del sistema. Las entalpias por unidad de masa de estas corrientes tendrán las siguientes relaciones:

$$H_B = H_H = H_R$$

$$H_C = H_E = H_J$$

y a su vez:

$$H_U = H_L$$

$$H_V = H_I$$

- Al conocerse la temperatura de cada corriente de alimentación, podrán determinarse las entalpías correspondientes.
- Se conoce el calor que gana o pierde el sistema.

Un balance total de energía efectuado para todo el sistema, representado en la Fig. (III.6), genera la siguiente ecuación:

$$FH_F + UH_U + VH_V \pm Q = WH_W + TH_T + EH_C + MH_B \quad \text{Ec. (III.11)}$$

A su vez, un balance para los sistemas 2 y 3, de la misma figura, conducirá a las siguientes dos ecuaciones:

$$WH_W = WH_B - LH_B + LH_U \quad \text{Ec. (III.12)}$$

$$TH_T = TH_C - IH_C + IH_V \quad \text{Ec. (III.13)}$$

Sustituyendo las Ecuaciones (III.12) y (III.13) en la Ec. (III.11) y despejando para "Q" obtenemos:

$$Q = (W-L+H)H_B + (T-I+E)H_C + LH_U + IH_V - FH_F - UH_U - VH_V \quad \text{Ec. (III.14)}$$

Esta ecuación, se puede resolver simultáneamente con las ecuaciones del balance de materia para definir las propiedades de nuestro sistema.

La entalpia de las corrientes "W" y "T" se obtendrán aplicando las siguientes ecuaciones:

$$H_W = \frac{WH_B - LH_B + LH_U}{W} \quad \text{Ec. (III.15)}$$

$$H_T = \frac{TH_C - IH_C + IH_V}{T} \quad \text{Ec. (III.16)}$$

Las temperaturas de estas corrientes de salida dependerán del tipo de fases que representen, así, la temperatura para la corriente que representa una mezcla de líquidos será:

$$t_L = t_o + \frac{H_{Liq} - \Delta H_m}{\sum_{i=1}^n X_i \bar{C}_{Li}} \quad \text{Ec. [III.17]}$$

La temperatura para una corriente que representa una mezcla de gases y ó vapores será:

$$t_G = t_o + \frac{H_{Vap} - \Delta H_m - \sum_{i=1}^n Y_i \lambda_i}{\sum_{i=1}^n Y_i \bar{C}_{Vi}} \quad \text{Ec. [III.18]}$$

Y la temperatura para una corriente que representa una mezcla de sólidos será.

$$t = t_o + \frac{H_{SOLIDOS} - \Delta H_m}{\sum_{i=1}^n X_i \bar{C}_i} \quad \text{Ec. [III.19]}$$

CAPITULO IV

APLICACIONES DEL MODELO

IV.- APLICACIONES DEL MODELO.

IV.1.- CONSTRUCCION DE UN SIMULADOR PARA EL MODELO PROPUESTO.

Una vez desarrollado el modelo matemático que representa a las distintas Operaciones Unitarias, surge la necesidad de tener una forma de manejar sencilla, rápida y eficientemente dicho modelo. Lo anterior implica el disponer de técnicas de solución de dicho modelo, haciendo uso de los recursos existentes.

La reflexión anterior nos condujo a seleccionar técnicas numéricas para la resolución del modelo, por lo que fue necesario el uso de una computadora.

IV.1.1.- BREVE DESCRIPCION DE LOS DIFERENTES ALGORITMOS USADOS EN LA RESOLUCION DE ECUACIONES ALGEBRAICAS NO LINEALES:

Una parte importante en la aplicación de los modelos matemáticos, es el resolver las ecuaciones que se desarrollan tanto en el balance de materia como en el de energía. Ecuaciones algebraicas muy complicadas, del tipo no lineal, y que generalmente pueden resolverse aplicando un método apropiado de convergencia.

Estos métodos de convergencia, son planes sistemáticos de prueba y error para encontrar la solución de una ecuación no lineal. Consisten en suponer valores de la variable desconocida hasta encontrar un valor por el cual la ecuación se satisface.

Existen diversos métodos numéricos que pueden ser de mucha utilidad, cada uno presenta características propias en su aplicación, por lo cual, la elección satisfactoria de uno de ellos es de mucha importancia para obtener resultados satisfactorios. A continuación se presenta una breve descripción de los diferentes algoritmos utilizados en nuestro sistema.

a.- METODO DE APROXIMACIONES SUCESIVAS: Considerese la fun---

ción:

$$F [X] = Y$$

donde "f(X)" representa una función continua y "Y" es el valor que tiene la función para un valor dado de "X". El algoritmo es el siguiente:

- 1.- Suponer un valor inicial de "X[1]" para la raíz y calcular el valor de "Y[1]" para la función.
- 2.- Calcular un segundo valor de "X[2]" para la raíz, adicionando al valor de "X[1]" un incremento definido por " ΔX ". Calcular "Y[2]".
- 3.- Las siguientes posibilidades pueden presentarse:

| | |
|----------------------|----------------------|
| a) $Y[1] > Y[2] > Y$ | d) $Y[1] > Y > Y[2]$ |
| b) $Y[2] > Y[1] > Y$ | e) $Y > Y[2] > Y[1]$ |
| c) $Y[2] > Y > Y[1]$ | f) $Y > Y[1] > Y[2]$ |

Si los casos "a" y "e" se presentan, seguir adicionando incrementos " ΔX " al valor de "X[I]", hasta lograr que " $Y > Y[I]$ " para el caso "a", y " $Y[I] > Y$ " para el caso "e". Si se presentan los casos "b", "c", "d" y "f", cambiar de signo el valor del incremento " ΔX " y seguir adicionando valores a la raíz "X[I]", hasta lograr que " $Y > Y[I]$ " para los casos "b" y "c", y " $Y[I] > Y$ " para los casos "d" y "f".

- 4.- Calcular un nuevo incremento con la siguiente ecuación:

$$X_{\text{nuevo}} = [-1.] \frac{\Delta X_{\text{anterior}}}{3.}$$

- 5.- Seguir adicionando incrementos " ΔX_{nuevo} " al valor de la raíz buscada "X[I]", hasta lograr que "Y[I]" revase nuevamente o iguale con una cierta exactitud el valor de "Y".- Si es necesario regresar al punto 4.

6.- METODO DEL MEDIO INTERVALO: Nuestra función representada por la ecuación:

$$F [X] = Y$$

tendrá una solución particular entre dos valores límites conocidos para "X", que serán representados por "A" y "B". El método es el siguiente:

- 1.- Calcular "F(X)" cuando "X = A" y "X = B" para obtener -- "F(A)" y "F(B)".
- 2.- Calcular un nuevo valor de "X(I)" con la siguiente ecuación:

$$X(I) = \frac{A + B}{2}$$

y definir "F(X(I))".

- 3.- El valor de la raíz buscada quedará restringido a la mitad del intervalo original al obtener una nueva raíz por cualquiera de las dos siguientes ecuaciones:

$$X(I+1) = \frac{A + X(I)}{2}$$

$$\text{ó : } X(I+1) = \frac{X(I) + B}{2}$$

El nuevo intervalo será: "A" y "X(I)", si el valor de "Y" está comprendido entre "F(A)" y "F(X(I))", ó "X(I)" y "B" si el valor de "Y" se encuentra entre "F(X(I))" y "F(B)".

- 4.- Calcular "F(X(I+1))", y definir un nuevo intervalo de posibles valores para la raíz buscada. El proceso se repite, el intervalo se irá reduciendo sucesivamente hasta obtener el valor buscado de "X", con una exactitud de un número razonable de dígitos según se requiera.

IV.1.1.a.- CONVERGENCIA DE LOS METODOS NUMERICOS.

A.-USO DEL METODO NUMERICO DEL MEDIO INTERVALO EN EL BALANCE DE MATERIA.

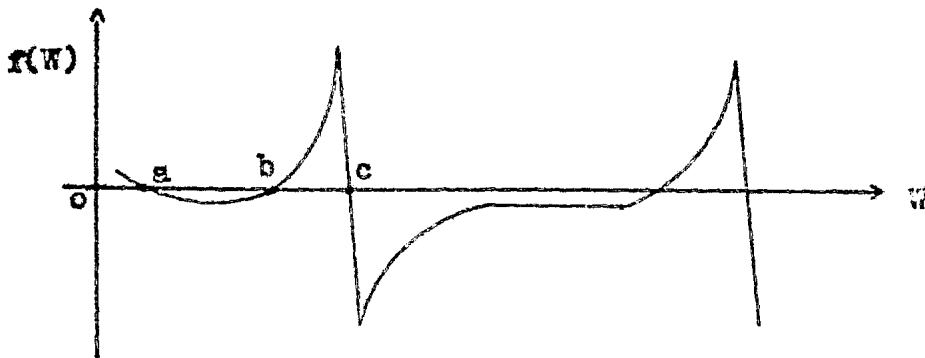
Al utilizar la Ec. (III.9) para resolver el balance de materia en cualquier tipo de sistemas, siempre se tendrá como única variable desconocida a "W". Esta incógnita al no poder

se despejar, sera conocida al aplicar un apropiado metodo de convergencia.

Si la Ec. (III.9) se representa en la forma de la siguiente función:

$$F(W) = 0$$

Sucesivas aplicaciones de diversos balances en las distintas operaciones, originan funciones similares a la graficada en la siguiente figura:



La función " $F(W) = 0$ " tendrá solución cuando la curva cruce en el eje de las abscisas, ese sera el valor de " W " que satisfaga la ecuación. El tipo de ecuación graficada es oscilatoria y los puntos " a ", " b " y " c ", son posibles soluciones para la incógnita de la función. El punto " a " representa la real solución buscada para la Ec. (III.9); el punto " b " representa la suma de todas las corrientes de alimentación ($F+V+U$), valor de " W " para el cual también la Ec. (III.9) se satisface; y el punto " c " significará otra solución para la ecuación, pero fuera de interés para nosotros, ya que este punto cae fuera de los límites de los posibles valores para " W ", los cuales tienen como límite máximo el punto " b ".

El hecho de que la función sea oscilatoria, y la estructura de la Ec. (III.9), la cual no es muy manejable, por ejemplo que no se pueda derivar muy fácilmente respecto a " W ", ó

que no se pueda representar en la forma " $F(W)=W$ ", limita el uso de muchos métodos numéricos.

La anterior situación condujo a utilizar el método numérico del Medio Intervalo. La forma en que funciona este método no necesita comprobación de que la raíz encontrada sea la buscada, ya que parte inicialmente de los límites inferior y superior, reduciéndolos en torno al valor real de la raíz " W " pero siempre dentro de los límites iniciales.

B.- USO DEL METODO NUMERICO DE APROXIMACIONES SUCCESIVAS EN LOS BALANCES SIMULTANEOS DE MATERIA Y ENERGIA.

En los cálculos para los balances simultaneos, las ecuaciones involucradas son la (III.9), (III.14) y las ecuaciones de las entalpías para cada corriente. El sistema de cálculo establece una temperatura de equilibrio del sistema, -- con ésta se realiza el balance de materia y despues el de energía; se compara el calor adicionado o quitado que se ha calculado, con el real del sistema, segun la siguiente ecuación:

$$\text{CALOR CALCULADO} - \text{CALOR REAL} = 0$$

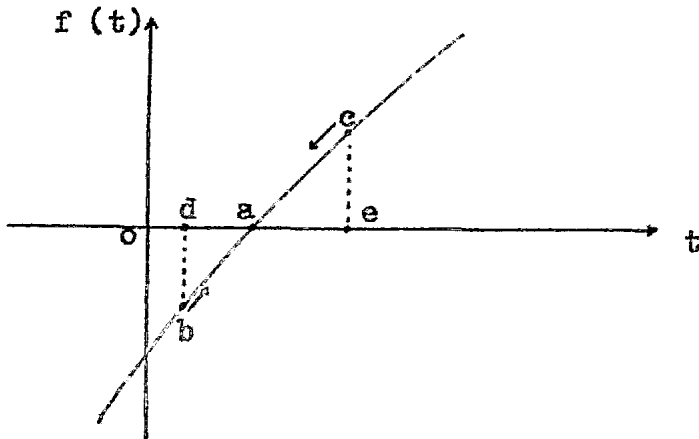
Las temperaturas supuestas se establecen aplicando el método numérico.

Las anteriores ecuaciones pueden representarse por la siguiente función:

$$F(t) = 0$$

donde " t " represente la temperatura y es la raíz desconocida.

Sucesivos cálculos simultaneos de materia y energía originan curvas similares a la graficada en la siguiente figura;



La función tendrá una única solución que estará representado por el punto "a" y corresponderá al valor de "t" cuando $f(t) = 0$ como requisito de su método de solución.

La anterior situación condujo a desarrollar una subrutina que optimizara el método numérico por aproximaciones sucesivas y permitiera una sencilla y rápida aplicación del método, así como a la convergencia de la solución buscada.

El uso de la subrutina se inicia con una suposición inicial de la temperatura que pueden ser "d" ó "e", los cuales originan respectivamente "b" o "c". Posteriormente, con otra suposición, la subrutina identifica la dirección hacia la solución. Cuando las iteraciones rebasen el punto "a", viniendo de cualquier dirección, el método empieza a oscilar en torno al punto de solución hasta converger.

IV.1.2.-USO DE LA COMPUTADORA (DESCRIPCION DEL PROGRAMA).

A continuación se desarrolla un programa de computadora para el uso de los técnicas numéricas mencionadas en la resolución de problemas para los diversos Operaciones Unitarias.

Se explica el funcionamiento del programa para resolver balances de materia y energía, aplicando el lenguaje científico

co FORTRAN IV. La primera parte comprende únicamente el programa y las subrutinas usadas en el balance de materia, posteriormente se integra al programa principal los programas usados para los balances simultaneos de materia y energía.

a.- PROGRAMA PRINCIPAL (PRIMERA PARTE).

La Fig. [IV.1] ilustra el programa usado para calcular el balance de materia para el modelo propuesto en el caso isotérmico.

Las tarjetas 3, 4, 5, 6 y 7, representan bloques de datos que se alimentan en el programa principal, posteriormente se explicará su significado.

La tarjeta No. 8, es una tarjeta de lectura con formato abierto. Las claves "DELTAT" y "SOLREA" se usan para dirigir el proceso del programa, así, "DELTAT = 0." cuando se están calculando únicamente balances de materia, y "DELTAT = 1. ---" cuando se realizan balances simultaneos de materia y energía. Esta clave se usará posteriormente cuando se integre al programa principal el balance de energía para el modelo. La clave "SOLREA = 0.", se usa para calcular el balance de materia en sistemas donde el equilibrio físico es función de la naturaleza de los componentes, de la temperatura y de la presión, y "SOLREA = 1." se usará en cálculos donde el equilibrio es función también de la concentración.

Toda la explicación del programa, estará en concordancia con la nomenclatura usada para el modelo físico propuesto, según las Figuras [III.5] y [III.6].

a.1.- BALANCE DE MATERIA PARA CASOS DONDE EL EQUILIBRIO FISICO ES FUNCION DE LA NATURALEZA DE LOS COMPONENTES, DE LA TEMPERATURA Y DE LA PRESION.- El programa tiene para este tipo de sistemas una capacidad de 17 componentes por cada corriente de alimentación o de descarga del simulador. Esta capacidad puede ser aumentada ó disminuida variando la tarjeta No.1.

```

1      DIMENSION XU(17),XV(17),XF(17),EK(17),XW(17),XT(17),
      CXB(17),XC(17),XE(17),XH(17)
2      DIMENSION AA(25),BB(25),CC(25),DD(25),EE(25)
3      DATA(AA(II),II=1,14)/1.,2.,3.,4.,5.,6.,7.,8.,9.,10.,
      11.,12.,13.,14./
4      DATA(BB(II),II=1,14)//      /
5      DATA(CC(II),II=1,14)//      /
6      DATA(DD(II),II=1,14)//      /
7      DATA(EE(II),II=1,14)//      /
8      READ(5,/)DELTAT,SOLREA
9      READ(5,/)N,U,V,F,H,E,RI,RL
10     READ(5,/) (XU(I),I=1,N), (XV(I),I=1,N), (XF(I),I=1,N),
      C(EK(I),I=1,N)
11     IF(DELTAT.EQ.1.) GO TO 308
12     IF(SOLREA.EQ.1.) GO TO 22
13     CALL BALMAT(XU,XV,XF,XW,XT,XB,XC,EK,N,U,V,F,H,RI,
      GRU,E,W,ICONT,T)
14     GO TO 4
15     22 READ(5,/) NH,XSUP
16     IJC=0.;IMC=0.
17     Y6YC=0.;Y5YC=0.;Y4YC=0.
18     Y3YC=0.;Y2YC=0.;Y1YC=0.
19     DELTAC=(BB(NN)-BB(1))/10.
20     DO 21 I=1,100
21     EK(1)=FUN1(XSUP,NN,BB,AA)/XSUP
22     EK1=EK(1)
23     EK(2)=FUN1(EK1,NH,CC,DD)
24     EK(3)=FUN1(EK1,NN,CC,EE)
25     CALL BALMAT(XU,XV,XF,XW,XT,XB,XC,EK,N,U,V,F,H,RI,
      GRU,E,W,ICONT,T)
26     SUMY=XSUP-XB(1)
27     IF(ABS(SUMY.LT..00001) GO TO 4
28     CALL DURSS(I=1,100,SUMY,IJC,IMC,Y6YC,Y5YC,Y4YC,Y3YC,Y2YC
      C,Y1YC,0.,DELTAC,XSUP,DSUMC)
29     21 CONTINUE
30     4 CALL ESCRIT(F,V,U,W,T,H,E,HFL,HVV,HUL,HWL,HTV,HHL
      CHEV,TLF,TVV,TLU,TLW,FVF,TLH,TVE,TLB,XF,XV,XU,XW,XT,
      CXB,XE,XB,XC,EK,N,DELTAT)
31     CALL EXIT
32     END

```

Fig. [IV.1]

Para realizar el balance de materia para una mezcla de fases de este tipo, se deberán suministrar los datos que aparecen en las tarjetas de lectura 9 y 10. El significado de las constantes leídas es el siguiente:

- N - No. total de componentes (≤ 17).
- U - Flujo de la corriente "U", según el modelo físico - propuesto (Fig. (III.5).
- V - Flujo de la corriente "V".
- F - Flujo de la corriente "F".
- E, H - Flujos de las corrientes "E" y "H" respectivamente.
- RI, RL - Flujos de las corrientes "I" y "L" respectivamente.
- XU(I) - Fracciones de la corriente "U" (X_{Ui}).
- XV(I) - Fracciones de la corriente "V" (X_{Vi}).
- XF(I) - Fracciones de la corriente "F" (X_{Fi}).
- EK(I) - Constantes de equilibrio ó relaciones de concentraciones en equilibrio para los componentes (K_i)

Posteriormente el programa principal llama la subrutina "BALMAT" (tarjeta 11), la cual se explica posteriormente, y realiza el balance de materia. La nomenclatura de los datos que se obtienen de la subrutina "BALMAT" es la siguiente:

- W - Flujo de la corriente "W".
- T - Flujo de la corriente "T".
- XW(I) - Fracciones de la corriente "W" (X_{Wi}).
- XT(I) - Fracciones de la corriente "T" (X_{Ti}).
- XB(I) - Fracciones de la corriente "B" (X_{Bi}).
- XC(I) - Fracciones de la corriente "C" (X_{Ci}).

Finalmente la tarjeta 12 manda el proceso a la proposición # 4 (tarjeta 30), que representa el llamado a la subrutina de impresión de resultados (subrutina "ESCRIT").

La Fig. (IV.2) representa el diagrama de flujo lógico para estos cálculos.

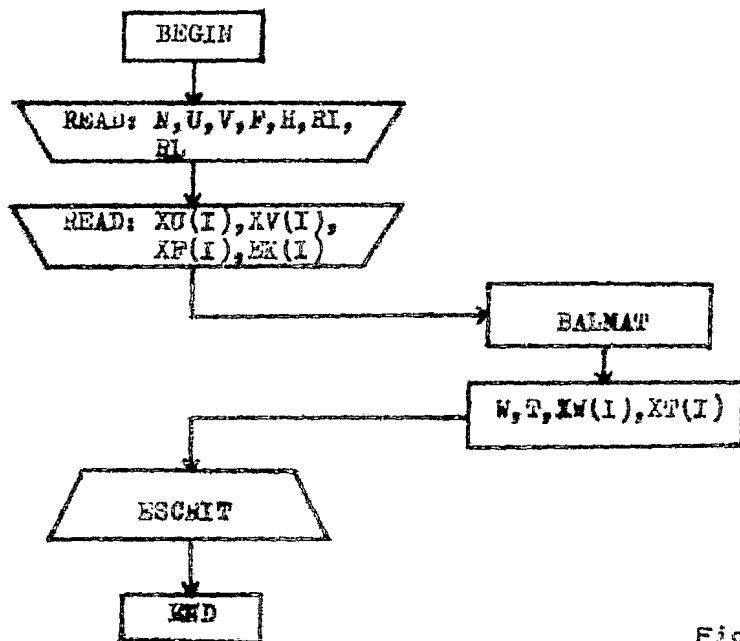


Fig. [IV.2]

a.2.- BALANCE DE MATERIA PARA SISTEMAS DONDE EL EQUILIBRIO FÍSICO ES FUNCIÓN DE LA NATURALEZA DE LOS COMPONENTES, DE LA TEMPERATURA, DE LA PRESIÓN Y DE LA CONCENTRACION.- En relaciones de fases donde el equilibrio físico es función de la temperatura, de la naturaleza de los componentes, de la presión y también de la concentración, el balance de materia no es posible calcularlo aplicando únicamente la subrutina "BALMAT". En estos sistemas el equilibrio está influenciado por una variable extra, la concentración, esto provoca la inclusión de un circuito extra iterativo.

La ecuación (III.9) representa el balance de materia aplicado al modelo. En esta ecuación no están definidos el valor de "W" y se desconocen también las relaciones de equilibrio " K_i ", que satisfacen la ecuación para originar valores de las fracciones de concentración en equilibrio físico de las fases de descarga.

Consideremos el equilibrio de fases de hasta 3 componentes. Tendremos un arreglo de datos de fracciones de concentraciones en equilibrio para el componente 1, que será el soluto transferido ó componente base de cálculo. Estos serán representados por "AA" y "BB", donde "AA" define las concentraciones " X_{C1} " de la fase ligera y "BB" las concentraciones " X_{B1} " de la fase pesada.

Asignaremos como "CC" la serie de datos de relaciones de concentraciones en equilibrio para el componente 1; "DD" representará las relaciones de equilibrio para el componente 2; y "EE" las relaciones de equilibrio para el componente 3. Estos datos estarán en equilibrio físico uno con respecto a los otros.

Una gráfica de "BB" vs "AA", originará la curva de equilibrio para el componente 1, representada por la línea continua de la Fig. [IV.3].

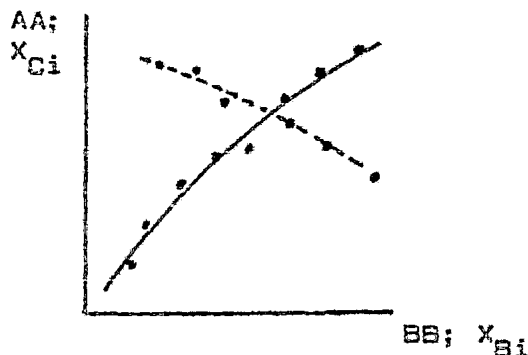


Fig. [IV.3]

Si se suponen valores de " X_{B1} " en la serie de datos "BB" y se interpola su valor respectivo en equilibrio físico " X_{C1} " en la serie "AA", podrá calcularse la relación de concentraciones " K_1 " y por interpolación en los arreglos "CC", "DD" y "EE", conocer " K_2 " y " K_3 ". Con estos valores es posible resolver la Ec. [III.9], la cual originará nuevos valores de " X_{B1} " y " X_{C1} ". Para cálculos sucesivos de este tipo, obtendremos un lote de datos de fracciones " X_{B1} " y " X_{C1} ", que pueden estar o no estar en equilibrio, los cuales graficados originan

rán la curva punteada de la Fig. (IV.4) y representará la ecuación para el balance de materia del componente 1.

La intersección, en la Fig. (IV.4), de las líneas de equilibrio y de balance de materia, es el punto que satisface la Ec. (III.9), y en el cual, los valores supuestos de " K_1 ", " K_2 " y " K_3 " originan valores de las fracciones de concentraciones de las corrientes de descarga en equilibrio físico una con respecto a la otra.

Los pasos sistemáticos usados para encontrar el punto de intersección de las dos curvas, y resolver el balance de materia a sistemas donde la concentración influye sobre el equilibrio físico, con la restricción de un máximo de 3 componentes por fase, serán los siguientes:

- 1.- Suponer un valor inicial de " X_{B1} " para la fase pesada en equilibrio.
- 2.- Identificar el valor para la fracción " X_{B1} " para la fase ligera en equilibrio.
- 3.- Calcular " K_1 ", y con este valor identificar " K_2 " y " K_3 ".
- 4.- Realizar el balance de materia aplicando la Ec. (III.9).
- 5.- Si el valor calculado de " X_{B1} " es igual al valor supuesto, el punto de intersección de las curvas ha sido encontrado y las relaciones de concentraciones de equilibrio supuestas son las correctas. Si no es así, regresar al punto 1.

El método iterativo de convergencia usado para encontrar los valores de las relaciones de equilibrio, que satisficieren la Ec. (III.9), es el de Aproximación Sucesiva, representado por la subrutina "SURSS" y explicado en el Capítulo (IV.2.4.1). Este método se escogió por su facilidad de funcionamiento y el menor tiempo de uso por las computadoras.

La Fig. (IV.1) muestra el programa utilizado para el balance de materia en este tipo de sistemas. Los datos necesari-

rios se suministran en las tarjetas 8, 9 y 15, el significado de las constantes leídas en las tarjetas 6 y 9 ya fué descrito, y los valores de la tarjeta 15 son:

NN - Número total de datos leídos para "AA(II)", "BB(II)", "CC(II)", etc. en las proposiciones "DATA" de las tarjetas 3, 4, 5, 6 y 7.

XSUP - Suposición inicial suministrada para la concentración del componente No. 1 en la corriente de salida "B" ó "W" en equilibrio.

También son necesarios alimentar los bloques de datos suministrados por las proposiciones "DATA", donde:

AA(II) - Serie de datos que representan las posibles fracciones en equilibrio " X_{B1} " para el componente 1.

BB(II) - Serie de datos que representan las posibles fracciones de concentraciones " X_{C1} " por el componente 1. - En equilibrio con los datos "AA(II)".

CC(II) - Serie de datos que representan las relaciones de equilibrio para el componente 1 (AA(II)/BB(II)).

DD(II), EE(II) - Series de datos que representan las relaciones de equilibrio para los componentes 2 y 3 respectivamente.

Las tarjetas 16, 17 y 18 representan variables que toman diferentes valores en el circuito iterativo. Son usadas por la subrutina "OURSS" llamada en la tarjeta 28. "DELTA C" es el intervalo inicial de valores para los diferentes suposiciones de "XSUP" que calculará "OURSS", en este caso, se escogió como intervalo inicial, el rango posible de valores que puede tomar "XSUP" dividido entre 10, la siguiente ecuación representó el valor escogido:

$$\text{DELTA C} = (\text{BB}[\text{NN}] - \text{BB}[1]) / 10.$$

El circuito iterativo se inicia en la tarjeta No. 20. El

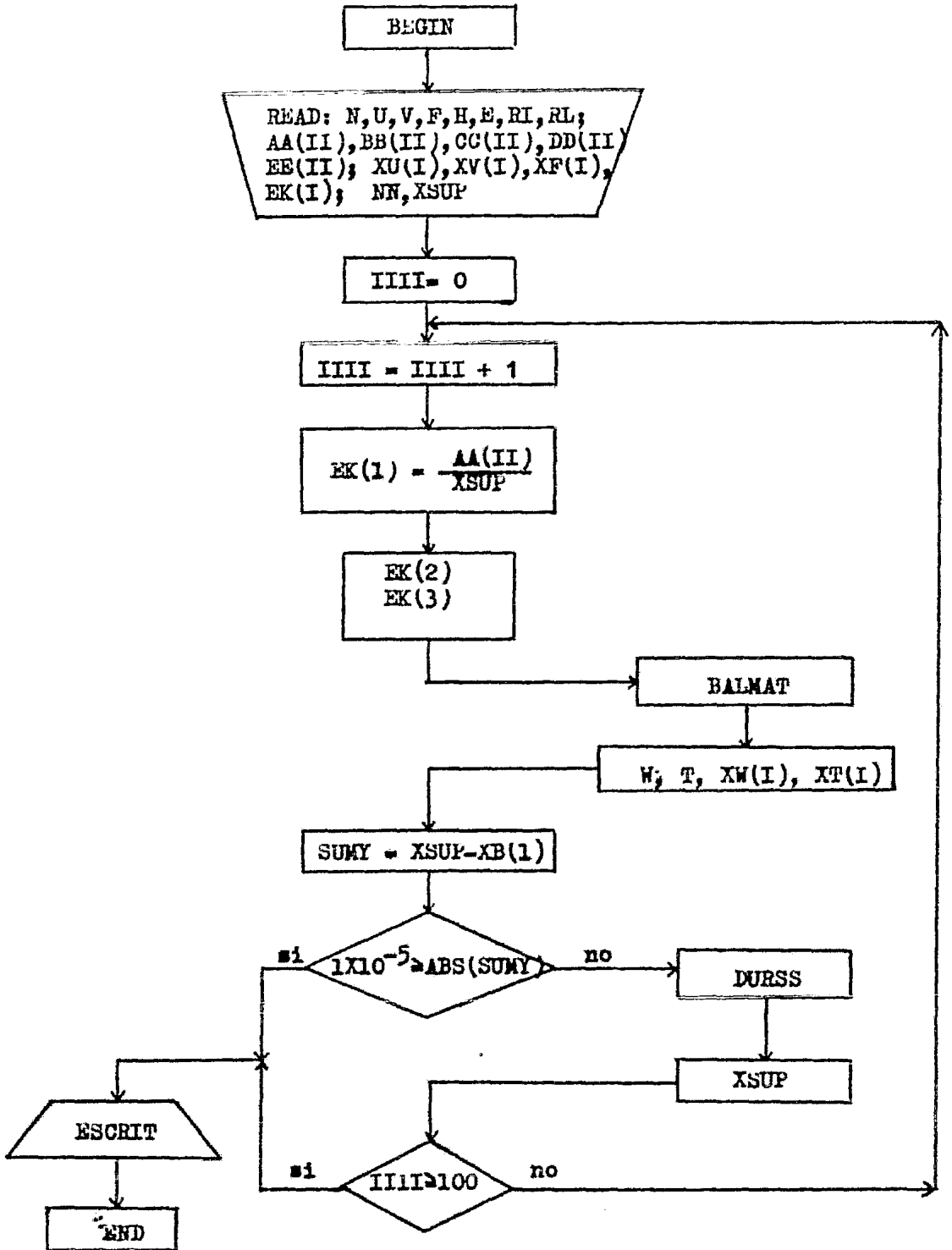


Fig. (IV.4)

cálculo de las relaciones de equilibrio (EK[1], EK[2] y - - - EK[3]), se hace en las tarjetas 21, 23 y 24, usando la subrutina "FUN1", la cual se explica posteriormente. En la tarjeta 25 se llama la subrutina "BALMAT", donde se realiza el balance de materia.

Se calcula:

$$\text{SUMY} = \text{XSUP} - \text{XB}[1]$$

donde "XSUP" es el valor supuesto de la fracción en equilibrio de la fase pesada para el componente 1, y "XB[1]" es el valor calculado para la misma fracción por la subrutina - - - "BALMAT". Si "SUMY" es menor o igual que 0.00001, el programa va a la proposición No. 4 (tarjeta 30) y llama la subrutina - "ESCRIT" para imprimir resultados, si no es así, en la tarjeta 28 se llama la subrutina "OURSS", origina un nuevo "XSUP" y se regresa a la tarjeta 20. El proceso continua hasta alcanzar la convergencia ó terminar el número de posibles iteraciones que es de 100.

La Fig. [IV.4] ilustra el diagrama de flujo lógico para estos cálculos.

b.- SUBROUTINA FUN1.

Esta subrutina permite realizar una interpolación lineal para una serie de coordenadas de varios puntos. Las coordenadas de cada punto son almacenadas en un arreglo definido por "X" y "Y" en el programa principal. La subrutina "FUN1" puede ser así utilizada para calcular un valor de "Y" para un particular valor de "X". Esto se logra localizando las coordenadas adyacentes alrededor de "X", estos son: "X_i" y "Y_i", y "X_j" - con "Y_j" [Ver Fig. [IV.5]]. El punto "Y" se obtiene aplicando una interpolación lineal entre estos puntos:

$$Y = Y_i + \frac{X - X_i}{X_j - X_i} [Y_j - Y_i]$$

En el caso de que el valor fijo de "X", sea menor que el primer punto ó mayor que el último punto, el valor obtenido de "Y" ["FUN1"] será el primer punto ["Y₁" por ejemplo] ó el último de la serie ["Y_N"] respectivamente.

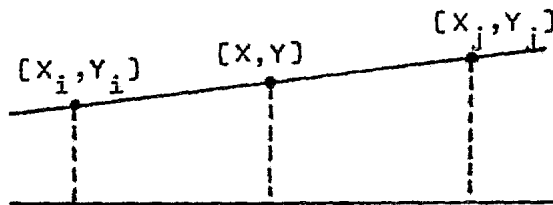


Fig.(IV.5)

La Fig. (IV.6) representa la subrutina "FUN1", donde "A" es el valor de la variable Fijada "X", "N" es el número total de puntos; "X" y "Y" definen el arreglo de coordenadas para cada punto; y "FUN1" representa el valor que se obtiene del punto interpolado. Las líneas 4 y 5 analizan el valor de "A" contra el primer y último punto de las coordenadas suministradas. La localización de los puntos adyacentes al valor de "A", se hace en el circuito "DO" que se inicia en la tarjeta 10. - La interpolación lineal es calculada en la línea 13.

```

1      C SUBROUTINA DE INTERPOLACION LINEAL
2      FUNCION FUN1(A,N,X,Y)
3      DIMENSION X(2),Y(2)
4      IF(A-X(1)) 5,5,6
5      6 IF(A-X(N)) 1,2,2
6      2 FUN1=Y(N)
7      RETURN
8      5 FUN1=Y(1)
9      RETURN
10     1 DO 3 I=2,N
11     IF(A.LT.X(I)) GO TO 4
12     3 CONTINUE
13     4 FUN1=Y(I-1)+(A-X(I-1))*(Y(I)-Y(I-1))/
      C(X(I))-X(I-1))
14     RETURN
15     END

```

Fig. (IV.6)

Es evidente, por el funcionamiento de la subrutina, que - las coordenadas suministradas deben ser en valores ascendentes de "X", independientemente de los valores de "Y".

c.- SUBROUTINA DURSS.

Esta subrutina representa el método de convergencia por - aproximaciones sucesivas. El método ya fue descrito en un capítulo de este trabajo.

La Figura [IV.7] ilustra la subrutina "DURSS".

Este programa debe trabajarse dentro de un circuito iterativo [por ejemplo un circuito "DO"] por la forma en que se - presenta el programa. La variable "ICONT" representará el número de iteraciones del circuito dentro del cual funcionará - la subrutina; "J", "M", "Y6Y", "Y5Y", "Y4Y", "Y3Y", "Y2Y" y "Y1Y" son valores que se originan y usan dentro de la subrutina; la variable "SUM" representa el valor de la función cuando el valor de la raíz es "W"; cuando "ICONT" = 1" la asignación "DSUM" toma el valor de "SUM". Este valor es usado únicamente en forma interna por la subrutina; "RES" es el valor -- que debe tomar la función "SUM" cuando la raíz "W" satisface la ecuación; "DELTA" representa los incrementos ó disminuciones que se le hacen a la raíz.

Los únicos valores que deben suministrarse son "SUM", --- "RES", "W" y "DELTA". Se hace una suposición inicial de "W", se calcula "SUM" y se alimentan al subprograma. Este originará un nuevo valor de "W", el cual producirá un nuevo valor de "SUM". El primer valor inicial de "DELTA" que se alimenta al subprograma es muy importante para acelerar la convergencia y ahorrar tiempo en el uso de las computadoras.

```

SUBROUTINE DURSS (ICONT,SUM,J,M,
CY6Y,Y5Y,Y4Y,Y3Y,Y2Y,Y1Y,RES,DELTA,W,DSUM)
IF(ICONT.NE.1) GO TO 250
DSUM=SUM
250 IF(ICONT.GE.3) GO TO 110
IF(SUM.LT.RES) J=1
IF(SUM.GT.RES) M=1
ICONM=M-J
IF(ICONM.NE.0) GO TO 240
DELTA=DELTA/3
M=0;J=0
IF(SUM.LT.RES) J=1
IF(SUM.GT.RES) M=1
240 IF(SUM.GT.RES) GO TO 120
IF(ICONT.EQ.1) GO TO 130
IF(DSUM.GT.SUM) GO TO 140
130 Y2Y=1.
Y1Y=0.;Y3Y=0.;Y4Y=0.
W=W-DELTA
GO TO 100
140 Y3Y=1.
Y1Y=0.;Y2Y=0.;Y4Y=0.
W=W+DELTA
GO TO 100
120 IF(ICONT.EQ.1) GO TO 150
IF(DSUM.LT.SUM) GO TO 160
150 Y1Y=1.
Y2Y=0.;Y3Y=0.;Y4Y=0.
W=W-DELTA
GO TO 100
160 Y4Y=1.
Y1Y=0.;Y2Y=0.;Y3Y=0.
W=W+DELTA
GO TO 100
110 IF(ICONT.NE.3) GO TO 180
IF(Y1Y.EQ.1..OR.Y2Y.EQ.1.) Y5Y=1.
IF(Y3Y.EQ.1..OR.Y4Y.EQ.1.) Y6Y=1.
180 CONTY=Y5Y-Y6Y
IF(SUM.GT.RES) M=1
IF(SUM.LT.RES) J=1
ICONM=M-J
IF(ICONM.NE.0) GO TO 190
DELTA=DELTA/3.
M=0;J=0
IF(SUM.GT.RES) M=1
IF(SUM.LT.RES) J=1

```

```

190 IF(CONTY) 200,100,210
200 IF(ICONM.EQ.0) GO TO 220
230 Y6Y=1.
    Y5Y=0.
    W=W+DELTA
    GO TO 100
210 IF(ICONM.EQ.0) GO TO 230
220 Y5Y=1.
    Y6Y=0.
    W=W-DELTA
100 RETURN
    END

```

Figura (IV.7)

d.- SUBROUTINA BALMAT.

En esta subrutina se realiza el balance de materia aplicado al caso isotérmico, para el modelo propuesto. Para ello, se aplica el método de convergencia del medio intervalo. Método que se escogió por su facilidad de funcionamiento y el menor tiempo de uso en la computadora sobre otros métodos probados.

El balance de materia aplicado al simulador es discutido en el capítulo (II.2). El problema en general, esta enfocada a resolver la Ec. (III.9) presentada a continuación:

$$I = \sum_{i=1}^n \frac{U(X_{Ui}) + V(X_{Vi}) + F(X_{Fi}) - I(X_{Vi}) + \frac{L(X_{Ui})}{W-L} - [(U+V+F-W-H-I)K_i + H]}{W + \frac{W}{W-L} [(U+V+F-W-H-I)K_i + H]}$$

En esta ecuación la única variable desconocida es "W", -- cantidad que estará determinada al aplicar el método de convergencia.

Los pasos sistemáticos a seguir para encontrar el valor de "W", son los siguientes:

- 1.- Suponer un valor de la corriente "W".
- 2.- Calcular el valor de las fracciones en la corriente "W".
- 3.- Si la suma de las fracciones es igual a una, con una determinada exactitud, el valor de la corriente "W" es el -

supuesto.

4.- Si la suma de las fracciones no es igual a uno, regresar al punto 1.

El balance se complementa con las siguientes ecuaciones:

$$X_{Wi} = \frac{U(X_{Ui}) + V(X_{Vi}) + F(X_{Fi}) - I(X_{Vi}) + \frac{L(X_{Ui})}{W-L} - [(U+V+F-W-H-I)K_i + H]}{W + \frac{W}{W-L} [(U+V+F+W-H-I)K_i + H]}$$

Ec. (III.8)

$$T = U + V + F - W - E - H$$

Ec. (III.7)

$$X_{Bi} = \frac{W(X_{Wi}) - L(X_{Ui})}{W - L}$$

Ec. (III.4)

$$X_{Ci} = K_i [X_{Bi}]$$

Ec. (III.6)

$$X_{Ti} = \frac{(T - I)(X_{Ci}) + I(X_{Vi})}{T}$$

Ec. (III.5)

La definición de las variables utilizadas en la subrutina "BALMAT", según el balance de materia desarrollado para el simulador en el Capítulo (III.2), son los siguientes:

| | |
|--------|----------------------------|
| U = U | XU(I) = X _{Ui} |
| V = V | XV(I) = X _{Vi} |
| F = F | XF(I) = X _{Fi} |
| H = H | XB(I) = X _{Bi} |
| E = E | XC(I) = X _{Ci} |
| W = W | XW(I) = X _{Wi} |
| T = T | XT(I) = X _{Ti} |
| RI = I | EK(I) = K _i |
| RL = L | N = n (No. de componentes) |

En la Fig. (IV.6) se presenta la subrutina "BALMAT". En las tarjetas de la 3 a la 26 se aplica el método de convergen


```

1      SUBROUTINE BALMAT(XU,XV,XF,XW,XT,XB,XC,EK,H,U,V,F,
2      GH,RI,RL,E,W,ICONT,T)
3      DIMENSION XU(17), XV(17),XF(17),XW(17),XT(17),XB(17),
4      CXG(17),EK(17)
5      A=(U+V+F)*.00001
6      B=U+V+F
7      EPS1=1.E-06
8      DO 100 ICONT=1,200
9      W=(A+B)/2.
10     IF(ICONT.EQ.1) W=(U+V)*F*.00001
11     IF(ICONT.EQ.2) W=U+V+F
12     SUM=0.
13     DO 2 I=1,N
14     2 SUM=SUM+((W-RL)*(UXU(I)+VXV(I)+FXF(I)-RIXV(I))+RL
15     CXU(I)*(UEK(I)+VXEK(I)+FXEK(I)-WXEK(I)-HXEK(I)-RIE
16     CEK(I)+H))/((W-RL)*W+W*(UEK(I)+VXEK(I)+FXEK(I)-WXEK(I)
17     C-HXEK(I)-RIEK(I)+H))
18     SUMBAL=SUM-1.
19     IF(ICONT.EQ.1)SUMINC=SUMBAL
20     IF(ICONT.EQ.2) SUMFIN=SUMBAL
21     IF(ICONT.LE.2) GO TO 100
22     IF(SUMBAL) 12,10,11
23     12 IF(SUMBAL+EPS1) 3,10,10
24     11 IF(SUMBAL-EPS1) 10,10,3
25     3 IF(SUMBAL*SUMINC) 5,10,6
26     5 B=W
27     SUMFIN=SUMBAL
28     GO TO 100
29     6 A=W
30     SUMINC=SUMBAL
31     100 CONTINUE
32     10 IF(W.GE.(U+V+F-EPS1)) GO TO 260
33     T=U+V+F-W-E-H
34     DO 7 I=1,N
35     XW(I)=((W-RL)*(UXU(I)+VXV(I)+FXF(I)-RIXV(I))+RL*
36     CXU(I)*(UEK(I)+VXEK(I)+FXEK(I)-WXEK(I)-HXEK(I)-RIE
37     C+H))/((W-RL)*W+W*(UEK(I)+VXEK(I)+FXEK(I)-WXEK(I)-H
38     XEK(I)+H))
39     XB(I)=(W*XW(I)-RLEXU(I))-(W-RL)
40     XC(I)=EK(I)*XB(I)
41     XF(I)=(UXU(I)+VXV(I)+FXF(I)-W*XW(I)-E*EK(I))*XB(I)+
42     GR*XB(I))/T
43     7 CONTINUE
44     260 RETURN
45     END

```

Fig.[IV.8]

cia del Medio Intervalo, el cual nos resuelve la Ec. (III.9) para conocer la corriente de descarga "W".

En el desarrollo aparece la constante "EPS1", que representa nuestra tolerancia o grado de exactitud a la convergencia; las variables "A", "B", "SUMINC" y "SUMFIN", las cuales toman diferentes valores durante los cálculos; las variables "SUM" y "SUMBAL", que también toman diferentes valores, pero en la convergencia "SUM = 1." y "SUMBAL = 0.", ya que:

$$\text{SUM} = \sum XW(I)$$

$$\text{SUMBAL} = \sum XW(I) - 1.$$

La Fig. (IV.9) ilustra el diagrama de flujo lógico para encontrar el valor de "W" aplicado en el subprograma "BALMAT".

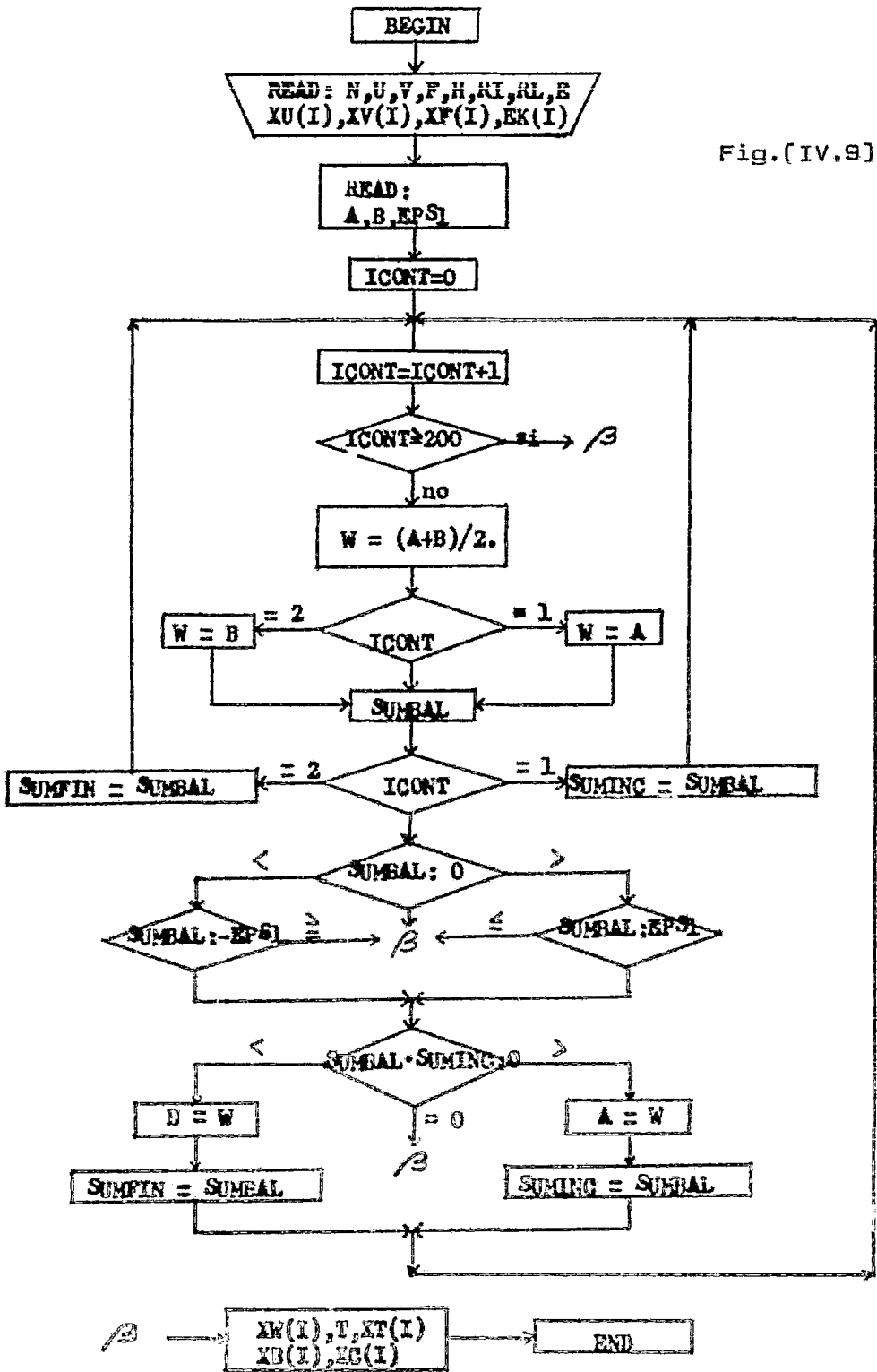
Inicialmente dos valores posibles para "W" son proporcionados:

$$A = [U + V + F] 0.000001$$

$$B = U + V + F$$

El valor de "A" será nuestro límite inferior y representará el 0.0001 % de la suma total de las corrientes de alimentación. No es posible fijar "A = 0." para evitar que en el cálculo de la sumatoria "SUM", la computadora reporte un error al dividir entre cero. El segundo valor límite para "W", representado por "B", equivale a la suma total de las corrientes de alimentación y corresponderá al límite superior. Para cada uno de estos valores es calculada la sumatoria "SUM" y la variable "SUMBAL". Al valor de "SUMBAL", originado cuando "W = A", se le asignará la variable "SUMINC" y el valor que adquiere cuando "W = B" se definirá por "SUMFIN" [Tarjetas 14 y 15].

Un tercer valor de "W" es obtenido al tomar la mitad del intervalo original [tarjeta 7], el cual originará un nuevo valor a "SUMBAL". Este nuevo par de valores suplirán a los de "SUMINC" y "A" ó "SUMFIN" y "B", dependiendo del valor de ---



C SUBROUTINA DE IMPRESION DE RESULTADOS

```

SUBROUTINE ESCRIT( F, V, U, W, T, H, E, HFL, HVV, HUL, HWL, HTV, HHL, HEV,
CTLF, TVV, TLU, TLW, TVT, TLHL, TVL, TLB, XF, XV, XU, XW, XT, XH, XE, XB, XC,
CEK, N, DELTAT)
DIMENSION XU(17), XV(17), XF(17), XW(17), XT(17), XB(17), XC(17),
CEK(17), XH(17), XE(17)
PRINT 304
304 FORMAT(1HL, //, 50X, "XXXX      DATOS Y RESULTADOS      XXXX",
C///)
PRINT 305
305 FORMAT(31X, "CORRIENTES DE ALIMENTACION", 41X, "CORRIENTES DE SA
CLIDA")
PRINT 306
306 FORMAT(18X, ".....", 8X,
C".....")
PRINT 307
307 FORMAT(2X, "CORRIENTES..", 7X, "( F )", 9X, "( V )", 9X, "( U )",
C14X, "( W )", 9X, "( T )", 9X, "( H )", 9X, "( E )", /)
PRINT 308, F, V, U, W, T, H, E
308 FORMAT(2X, "MASA O MOLES", 4X, 1PE11.5, 3X, 1PE11.5, 3X, 1PE11.5, 8X
C, 1PE11.5, 3X, 1PE11.5, 3X, 1PE11.5, 3X, 1PE11.5, /)
IF(DELTA.EQ.0.) GO TO 50
PRINT 309, HFL, HVV, HUL, HWL, HTV, HHL, HEV
309 FORMAT(2X, "ENTALPIA....", 4X, 1PE11.5, 3X, 1PE11.5, 3X, 1PE11.5,
C8X, 1PE11.5, 3X, 1PE11.5, 3X, 1PE11.5, 3X, 1PE11.5, /)
PRINT 310, TLF, TVV, TLU, TLW, TVT, TLH, TVF
310 FORMAT(2X, "TEMPERATURA.", 4X, 1PE11.5, 3X, 1PE11.5, 3X, 1PE11.5, 8X,
C1PE11.5, 3X, 1PE11.5, 3X, 1PE11.5, 3X, 1PE11.5, /)
PRINT 311, TLB
311 FORMAT(///, 2X, "LA TEMPERATURA DE EQUILIBRIO DEL SISTEMA ES ="
C, F10.4)
50 PRINT 312
312 FORMAT(///, 17X, "FRACCIONES ALIMENTADAS", 10X,
C"FRACCIONES DE LAS CORRIENTES DE SALIDA", 7X,
C"FRACCIONES Y CTL. DE EQUILIBRIO")
PRINT 313
313 FORMAT(8X, ".....", 6X,
C".....", 6X,
C".....")
PRINT 314
314 FORMAT(2X, "COMP.", 3X, "XF(I)", 6X, "XV(I)", 6X, "XU(I)", 10X,
C"XW(I)", 6X, "XT(I)", 6X, "XH(I)", 6X, "XE(I)", 10X, "XB(I)", 6X,
C"XC(I)", 6X, "EK(I)", /)
DO 315 I=1, N
315 PRINT 316, I, XF(I), XV(I), XU(I), XW(I), XT(I), XH(I), XE(I), XB(I),
CXG(I), EK(I)
316 FORMAT(3X, I2, 3X, F9.7, 2X, F9.7, 2X, F9.7, 6X, F9.7, 2X, F9.7, 2X, F9.7,
C2X, F9.7, 6X, F9.7, 2X, F9.7, 2X, 1PE10.4, /)
RETURN
END

```

Fig.[IV.10]

"SUMINC" y "SUMFIN" que tenga igual signo a "SUMBAL". Esto nos proporciona un nuevo intervalo posible para "W", que ya está reducido a la mitad del intervalo original, se calcula un nuevo valor para "W" y el proceso se repite hasta lograr que "SUMBAL = 0." con una exactitud de "EPS1".

Cuando el valor de "W" está ya definido, se procede a calcular "T", " X_{Wi} ", " X_{Bi} ", " X_{Ti} " y " X_{Ci} ", esto se hace en las tarjetas 28, 30, 31, 32 y 33 respectivamente.

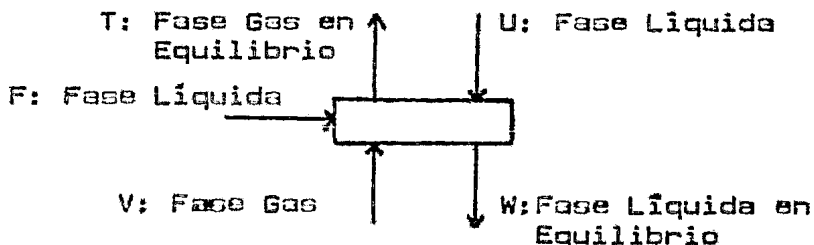
"ICONT" representa el número de iteraciones y tiene un valor límite de 200.

e.- SUBROUTINA ESCRIT.

Esta subrutina imprime los resultados obtenidos tanto en procesos isotérmicos como en balances simultáneos de materia y energía. Consta de una serie de formatos los cuales originan las presentaciones obtenidas en los diferentes balances. La Fig. (IV.10) ilustra la subrutina "ESCRIT".

f.- PROGRAMA PRINCIPAL (SEGUNDA PARTE).

f.1.- BALANCES SIMULTANEOS DE MATERIA Y ENERGIA EN SISTEMAS DONDE EL EQUILIBRIO FISICO ES FUNCION DE LA TEMPERATURA, DE LA NATURALEZA DE LOS COMPONENTES Y DE LA PRESION.- En esta parte del programa se realizan los balances simultáneos de materia y energía en sistemas donde el equilibrio físico es función de la naturaleza de los componentes, de la temperatura y de la presión. Se establecen los balances únicamente para sistemas de fases gas-líquido, asignándose estas fases a la siguiente nomenclatura del simulador:



Las ecuaciones del balance de energía, desarrolladas y explicadas en el capítulo (III.2), utilizadas conjuntamente con las ecuaciones del balance de materia, son las siguientes:

$$Q = (W-L+H)H_B + (T-I+E)H_C + LH_U + IH_V - FH_F - UH_U - VH_V \quad \text{Ec. (III.14)}$$

$$H_W = \frac{WH_B - LH_B + LH_U}{W} \quad \text{Ec. (III.15)}$$

$$H_T = \frac{TH_C - IH_C + IH_V}{T} \quad \text{Ec. (III.16)}$$

$$t_L = t_o + \frac{H_{Liq} - \Delta H_m}{\sum_{i=1}^n X_i \bar{C}_{Li}} \quad \text{Ec. (III.17)}$$

$$t_G = t_o - \frac{H_{Vap} - \Delta H_m - \sum_{i=1}^n Y_i \lambda_i}{\sum_{i=1}^n Y_i \bar{C}_{Vi}} \quad \text{Ec. (III.18)}$$

También se tienen las ecuaciones para los cálculos de las entalpias de cada corriente:

$$H_V = \Delta H_m + \sum_{i=1}^n Y_i \left[\bar{C}_{Vi} (t_G - t_o) + \lambda_i \right]$$

para mezclas de gases y vapores, y:

$$H_{Liq} = \Delta H_m + \sum_{i=1}^n X_i \bar{C}_{Li} (t_l - t_o)$$

para fases líquidas.

El plan general de los balances simultáneos lo desarrolla

remos de acuerdo a las condiciones de funcionamiento para el modelo, establecidas en el Capítulo (III.2). Los pasos sistemáticos son los siguientes:

- 1.- Suponer una temperatura inicial de equilibrio de las corrientes de descarga.
- 2.- Calcular las relaciones de equilibrio para cada componente a la temperatura supuesta.
- 3.- Realizar el balance de materia.
- 4.- Realizar el balance de energía y obtener la diferencia calorífica del sistema aplicando la Ec. (III.14).
- 5.- Comparar la diferencia calorífica calculada con el valor real del sistema.
- 6.- Si los valores son iguales con una cierta exactitud, el valor supuesto de temperatura es el correcto, si no es así, regresar al punto 1.
- 7.- Calcular la entalpia y temperatura de la corriente líquida "W" y la corriente de gas "T", aplicando las ecuaciones (III.15), (III.16), (III.17) y (III.18).

El método iterativo utilizado para encontrar la temperatura de las fases en equilibrio es el de Aproximación Sucesiva. El cual ya se explicó en el Capítulo (IV.1.1) y está representado por la subrutina "DURSS". Este método se utilizó por su rapidez de convergencia sobre otros métodos probados.

La Fig. (IV.11) ilustra el programa utilizado para realizar balances simultaneos de materia y energía en el tipo especificado de sistemas. El programa tiene un límite máximo de 6 componentes por cada corriente.

Las relaciones de concentraciones en equilibrio a diferentes temperaturas, se alimentan en bloques de datos en las proposiciones "DATA" de las tarjetas 4, 5, 6, 7, 8 y 9. La nomenclatura utilizada es la siguiente:

C PROGRAMA PRINCIPAL
 C BALANCES SIMULTANEOS DE MATERIA Y ENERGIA

```

1     DIMENSION XU(17),XV(17),XF(17),EK(17),XW(17),XT(17),
2     CXB(17),XC(17),XE(17),XH(17)
3     DIMENSION CPL(6),CPV(6),CLAT(6)
4     DIMENSION AA(25),BB(25),CC(25),DD(25),EE(25),FF(25)
5     C,GG(25)
6     DATA(AA(II),II=1,7)/1,2,3,4,5,6,7/
7     DATA(BB(II),II=1,7)/ /
8     DATA(CC(II),II=1,7)/ /
9     DATA(DD(II),II=1,7)/ /
10    DATA(EE(II),II=1,7)/ /
11    DATA(FF(II),II=1,7)/ /
12    READ(5,/) DELTAT,SOLREA
13    READ(5,/) N,U,V,F,H,E,RI,RL
14    READ(5,/) (XU(I),I=1,N),(XV(I),I=1,N),(XF(I),I=1,N),
15    C(EK(I),I=1,N)
16    IF (DELTAT.EQ.1.) GO TO 308
17    -
18    -
19    -
20    308 READ(5,/) NN
21    READ(5,/) TLU,TVV,TLF,TBASE,QCAL,HMBE1,HMBE2
22    READ(5,/) TLB1
23    READ(5,/) (CPL(I),I=1,N),(CPV(I),I=1,N),(CLAT(I),I=1,N)
24    IJ=0; IM=0
25    Y6YH=0.; Y5YH=0.; Y4YH=0.; Y3YH=0.; Y2YH=0.; Y1YH=0.
26    DELTAH=(AA(NN)-AA(1))/10.
27    TLB=TLB1
28    DO 302 III=1,200
29    52 GO TO(55,56,57,58,59,60),N
30    60 EK(6)=FUN1(TLB,NN,AA,GG)
31    59 EK(5)=FUN1(TLB,NN,AA,FF)
32    58 EK(4)=FUN1(TLB,NN,AA,EE)
33    57 EK(3)=FUN1(TLB,NN,AA,DD)
34    56 EK(2)=FUN1(TLB,NN,AA,CC)
35    55 EK(1)=FUN1(TLB,NN,AA,BB)
36    61 CALL BALDAT(XU,XV,XF,XW,XT,XB,XC,EE,N,U,V,F,H,RI,RL,
37    C, n, ICONT, F)
38    HUL=0.; HFL=0.; HVV=0.
39    HCV=0.; HBL=0.
40    DO 1 I=1,N
41    HUL=HUL+XU(I)*CPL(I)*(TLU-TBASE)
42    HFL=HFL+XF(I)*CPL(I)*(TLB-TBASE)
43    HBL=HBL+XB(I)*CPL(I)*(TLB-TBASE)
44    HVV=HVV+XV(I)*(CPV(I)*(TVV-TBASE)+CLAT(I))
45    HCV=HCV+XC(I)*(CPV(I)*(TLB-TBASE)+CLAT(I))
46    1 CONTINUE
47    HUL=HUL+HMBE1
48    HFL=HFL+HMBE1

```



```

42      HBL=HBL+HMEZ1
43      HVV=HVV+HMEZ2
44      HCV=HCV+HMEZ2
45      QCALC=(n-RI+H)*HBL-F*HFL-U*HUL-V*HVV+RI*HUL+RI*HVV+
      C(T-RI+E)*HCV
46      IF(ABS(QCALC-QCAL).LE.(HUL+U+HVV+V+HFL+F)*.005) GO TO 301
47      CALL DURSS (III, QCALC, IJ, IM, Y6YH, Y5YH, Y4YH, Y3YH, Y2YH, Y1Y
      CH, QCAL, DELTAH, FLB, DSUMH)
48      302 CONTINUE
49      301 HTV=(T*HCV-RI*HCV+RI*HVV)/T
50      HWL=(N*HBL-RI*HBL+RI*HUL)/N
51      SUMXCL=0.;SUMXCV=0.;SUMXCF=0.
52      DO 24 I=1,N
53      SUMACL=SUMACL+XT(I)*CLAT(I)
54      SUMXCV=SUMXCV+XT(I)*CPV(I)
55      24 SUMXCF=SUMXCF+XT(I)*CFL(I)
56      TLW=((HWL-HMEZ1)/SUMXCF)+TBASE
57      TVT=((HTV-HMEZ2-SUMXCL)/SUMXCV)+TBASE
58      IF(E.NE.O.) HbV=HCV
59      IF(H.NE.O.) HHL=HBL
60      IF(H.NE.O.) TLH=TLB
61      IF(E.NE.O.) TVE=TLB
62      4 CALL ESCRIT(F,V,U,W,I,H,E,HFL,HVV,HUL,HWL,HTV,HHL,HEV,
      CFLF,TVV,TLU,TLW,TVT,TLH,TVE,TLB,XF,XV,XU,Xw,XT,XH,XE,XB,
      CXC,EK,N,DELTAH)
63      CAL EXIT
64      END

```

Figura [IV.11]

- AA[II] - Temperatura de las diferentes relaciones de equilibrio.
- BB[II] - Relaciones de equilibrio para el componente No. 1.
- CC[II] - Relaciones de equilibrio para el componente No. 2.
- DD[II] - Relaciones de equilibrio para el componente No. 3.
No se alimentan cuando el número de componentes [N] es de 2.
- EE[II] - Relaciones de equilibrio para el componente No. 4.
No se alimentan cuando "N = 3".
- FF[II] - Relaciones de equilibrio para el componente No. 5.
No se alimentan cuando "N = 4".

GG[II] - Relaciones de equilibrio para el componente No. 6.
No se alimentan cuando "N = 5".

Es necesario alimentar al programa los datos que aparecen en las tarjetas de lectura con formato abierto numeros 10, 11 y 12, y 14, 15, 16 y 17. La nomenclatura para los datos leídos en las tarjetas 10, 11 y 12 ya fué explicada en la primera parte de este capítulo del balance de materia. La nomenclatura para los datos de las tarjetas 14, 15, 16 y 17 es la siguiente:

- NN - Número de coordenadas para los bloques de datos -- "AA[II]","BB[II]", etc..
- TLU - Temperatura para la corriente "U".
- TVV - Temperatura para la corriente "V".
- TLF - Temperatura para la corriente "F".
- TBASE - Temperatura de referencia para el cálculo de los cortapiés de las diferentes corrientes.
- QCAL - Calor que se agrega ó quita al sistema.
- HME21 - Calor de mezcla global para todos los componentes de la fase líquida.
- HME72 - Calor de mezcla global para todos los componentes de la fase gaseosa.
- TLB1 - Primera aproximación de la temperatura final de equilibrio de las fases resultantes.
- CPL[1] - Capacidad calorífica promedio en el rango posible de temperaturas finales de equilibrio para cada componente en estado líquido.
- CPV[1] - Capacidad calorífica promedio para cada componente en estado gaseoso o de vapor en el rango posible de temperaturas finales de las mezclas en equilibrio.

CLAT[I] - Calor latente de vaporización referido a la temperatura de referencia "TBASE".

El método iterativo se inicia en las tarjetas 18 y 19, donde las variables "IJ", "IM", "Y6YH", "Y5YH", "Y4YH", "Y3YH", "Y2YH" y "Y1YH" son usadas por la subrutina "OURSS", donde toman diferentes valores y son únicamente manejadas internamente por la subrutina para lograr la convergencia. En la tarjeta No. 20 se calcula:

$$\text{DELTAH} = (\text{AA}[\text{NN}] - \text{AA}[\text{I}]) / 10.$$

donde "DELTAH" representa los incrementos o disminuciones por el método iterativo a "TLB1" ó "TLB" (temperatura de equilibrio supuesta), así, "DELTAH" sufrirá disminuciones conforme se acerque a la convergencia. El inicial valor de "DELTAH" se calcula obteniendo el rango de temperaturas del bloque "AA[II]" dividido entre 10. Es importante establecer este primer valor de "DELTAH" apropiadamente para obtener la convergencia en el menor número posible de iteraciones.

En las tarjetas 24, 25, 26, 27, 28 y 29 se calculan las relaciones de equilibrio para un máximo de 6 componentes. Para ello se usa el subprograma de interpolación lineal "FUN1". En este subprograma "TLB" representa la temperatura de equilibrio supuesta y "FUN1" da la relación de equilibrio interpolada en los bloques "AA[II]" y "BB[II]" ó "CC[II]" ó "CD[II]" ó etc..

El balance de materia se realiza en la tarjeta 31 por la subrutina "BALMAT". De la tarjeta 34 a la 44 se evalúa el balance de energía, aplicando las ecuaciones para el cálculo de las entalpías de las diferentes corrientes.

El calor que absorbe o desprende el sistema se calcula en la tarjeta 45, donde se está aplicando la Ec. (III.14). En la línea 46 se compara el calor calculado con el calor real del sistema. Los límites de convergencia establecidos requieren que la diferencia de ambos calores sea menor del 0.5 % compa-

rado con el calor original que entra el sistema, si esto se cumple, la temperatura de equilibrio supuesta es la buscada y el proceso del programa se dirige a la proposición 301 (tarjeta 49).

Si los límites de convergencia no son cumplidos, en la tarjeta 47 la subrutina "OURSS" establece una nueva temperatura de equilibrio. En esta subrutina "QCALC" representa el valor que se requiere igualar a "QCAL", aplicando incrementos de "DELTAH" a la temperatura anterior supuesta "TLB". El proceso regresa con el nuevo valor de temperatura a la tarjeta 22 y reinicia los cálculos para encontrar la temperatura de las fases en equilibrio.

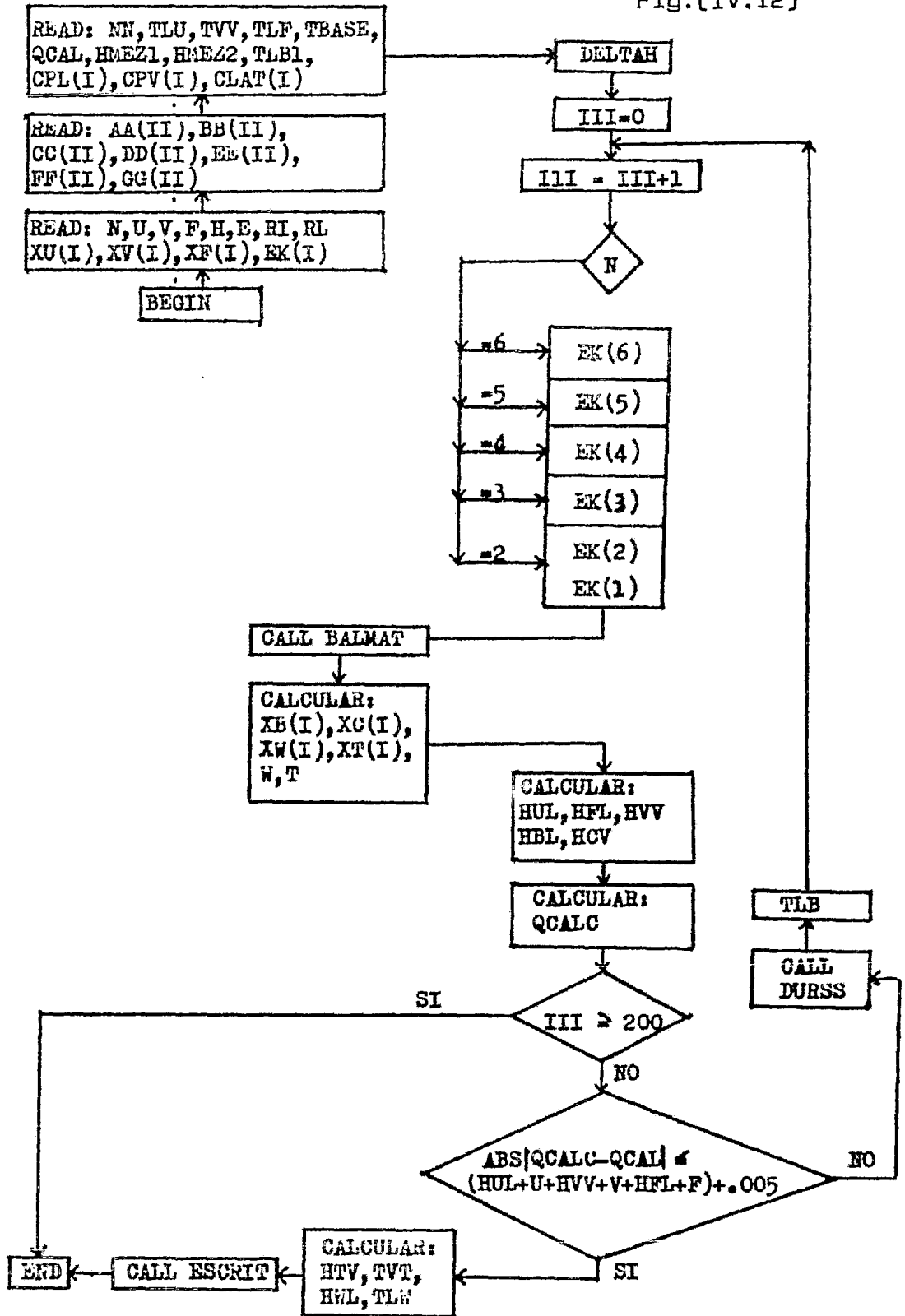
Cuando los límites de convergencia son cumplidos, se procede a calcular la entalpia y temperatura de las corrientes de extracción "W" y "T", aplicando las ecuaciones [III.15], [III.16], [III.17] y [III.18] en las tarjetas 50, 49, 56 y 57 respectivamente.

El proceso continua hasta la proposición No. 4 (tarjeta 62) donde se llama la subrutina "ESCRIT" para imprimir resultados.

La FIG. [IV.12] presenta el diagrama de flujo lógico para estos cálculos.

F.2.- BALANCES SIMULTANEOS PARA CUALQUIER TIPO DE FASES.- El programa anteriormente explicado de balances simultaneos para fases gas-líquido, puede ser ampliado para cualquier tipo de fases. Las ecuaciones para el cálculo de los entalpias de cualquier tipo de fases, pueden ser adicionadas al programa desarrollado para los balances simultaneos para fases gas-líquido. También será necesario agregar un seleccionador de la ecuación respectiva para el cálculo de la entalpia. Este programa de balances simultaneos de materia y energia para cualquier tipo de fases no fué desarrollado.

Fig. (IV.12)



F.3.- BALANCES SIMULTANEOS DE MATERIA Y ENERGIA EN SISTEMAS DONDE EL EQUILIBRIO FISICO ES FUNCION DE LA NATURALEZA DE LOS COMPONENTES, DE LA TEMPERATURA, DE LA PRESION Y DE LA CONCENTRACION.- Los simuladores para los balances simultaneos de materia y energía para estos tipos de sistemas no fueron desarrollados. Es un hecho, que en Operaciones Unitarias, donde el equilibrio físico es función de la naturaleza de los componentes, de la temperatura, de la presión y también de la concentración, la operación se realiza para fines de cálculo, -- isotérmicamente.

En este tipo de sistemas, se tendrá para cada temperatura una serie de datos de concentraciones en equilibrio para una determinada mezcla de fases. Esto implica la inclusión de un circuito extra iterativo en el simulador desarrollado para el balance de materia, donde el equilibrio físico esta influenciado también por la concentración. Este, tendría como finalidad, el encontrar la temperatura de equilibrio del sistema, aplicando el balance de energía.

IV.2.- APLICACION DEL MODELO A LA RESOLUCION DE DIFERENTES -- PROBLEMAS EN DIVERSAS OPERACIONES UNITARIAS.

A continuación se describen las aplicaciones del simulador en la resolución de problemas en diversas operaciones unitarias. También se hace mención sobre la preparación de datos y la forma en que se manejan las relaciones de equilibrio en los diferentes casos.

a.- BALANCES ISOTÉRMICOS.

DESTILACION:

Problema 1.- El siguiente problema es propuesto en un artículo de K. E. Starling y M. S. Han, del Hydrocarbon Processing, Vol. 51, Pg. 114, Junio 1972.

Se realiza una destilación de 1000. lb mol/hr, a una temperatura de -40°F y una presión igual a 1000 psia, de la siguiente mezcla de componentes. Se proporcionan las fracciones mol de alimentación y las constantes de equilibrio:

| | | X_{Ui} | K_i |
|----|-----------------|----------|----------|
| 1 | Nitrogeno | 0.00531 | 7.197530 |
| 2 | CO ₂ | 0.00816 | 1.284615 |
| 3 | Metano | 0.9062 | 2.271374 |
| 4 | Etano | 0.026 | 0.349358 |
| 5 | Propano | 0.00313 | 0.125517 |
| 6 | i-Butano | 0.00024 | 0.042352 |
| 7 | n-Butano | 0.00055 | 0.031175 |
| 8 | i-Pentano | 0.0009 | 0.012309 |
| 9 | n-Pentano | 0.00069 | 0.009032 |
| 10 | n-Hexano | 0.00192 | 0.003149 |
| 11 | n-Heptano | 0.0111 | 0.000691 |
| 12 | n-Octano | 0.0245 | 0.000126 |
| 13 | n-Nonano | 0.00943 | 0.000065 |
| 14 | n-Decano | 0.00142 | 0.000027 |
| 15 | n-Undecano | 0.00045 | 0.000009 |

Solución.- Los datos para ser leídos por el programa, deberán ser preparados de la siguiente manera:

Tarjeta 1: Se lee DELTAT, SOLREA

0.,0.

Tarjeta 2: Se lee N,U,V,F,H,E,RI,RL

15,1000., 0.,0.,0.,0.,0.,0.

Tarjeta 3: Se lee [XU(I),I=1,N],[XV(I),I=1,N],[XF(I),I=1,N],
[EK(I),I=1,N]

.00531,.00816,.9062,.026,.00313,.00024,.00055,.0009,.00069,.
.00192,.0111,.0245,.00943,.00142,.00045,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,
0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,
0.,0.,0.,7.1975,1.2846,2.2713,0.3493,0.1255,.04235,.0311,.0123
.009032,.003149,.000691,.000126,.000065,.000027,.000009

Los resultados obtenidos se presentan en la Fig. (IV.13.
a).

Problema 2.- El siguiente problema ilustra una destilación --
donde se alimentan dos corrientes.

Se realiza una destilación de una sola etapa a una tempe-
ratura de 100°F. Se mezcla una corriente líquida con un flujo
molar de 110.4 moles/hr y una corriente de gas a 100 moles --
por hr. Se proporcionan los siguientes datos:

| COMPONENTES | X_{Ui} | X_{Vi} | K_i |
|-----------------|----------|----------|-------|
| 1 Metano | - | 0.286 | 51.0 |
| 2 Etano | - | 0.157 | 13.0 |
| 3 Propano | - | 0.240 | 3.1 |
| 4 n-Butano | 0.02 | 0.169 | 0.85 |
| 5 n-Pentano | 0.05 | 0.148 | 0.26 |
| 6 Aceite pesado | 0.93 | - | 0. |

X_{Ui} = Fracción mol en la alimentación líquida.

X_{Vi} = Fracción mol en la alimentación gaseosa.

K_i = Constante de equilibrio.

Solución.- Para este caso se obtuvieron las constantes de e--
quilíbrio del Manual del Ingeniero Químico de John H. Perry.
Para el sexto componente [Aceite pesado], el cual no se trans-
fiere entre las fases y únicamente se transporta por la fase
pesada, se le considerará como cero, esto se explica por la -
siguiente ecuación:

| CORRIENTES.. | CORRIENTES DE ALIMENTACION | | | CORRIENTES DE SALIDA | | CORRIENTES DE SALIDA | | | |
|--------------|----------------------------|-------------------|-------------------|--|-------------------|----------------------|-------------------|---------------------------------|-------------------|
| | (F) | (F) | (U) | (H) | (T) | (H) | (E) | | |
| MASA D MOLES | 0. | 0. | 1.00000E+03 | 1.02037E+02 | 8.98963E+02 | 0. | 0. | | |
| COMP. | FRACCIONES ALIMENTADAS | | | FRACCIONES DE LAS CORRIENTES DE SALIDA | | | | FRACCIONES Y CTE. DE EQUILIBRIO | |
| | X _{F(1)} | X _{F(2)} | X _{U(1)} | X _{H(1)} | X _{T(1)} | X _{H(2)} | X _{E(1)} | X _{E(1)} | X _{E(2)} |
| 1 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0053100 | 0.0000000 | 0.0052700 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 2 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 3 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 4 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 5 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 6 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 7 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 8 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 9 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 10 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 11 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 12 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 13 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 14 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 15 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |

(a)

| CORRIENTES.. | CORRIENTES DE ALIMENTACION | | | CORRIENTES DE SALIDA | | CORRIENTES DE SALIDA | | | |
|--------------|----------------------------|-------------------|-------------------|--|-------------------|----------------------|-------------------|---------------------------------|-------------------|
| | (F) | (F) | (U) | (H) | (T) | (H) | (E) | | |
| MASA D MOLES | 0. | 0. | 1.00000E+02 | 1.00000E+02 | 1.00000E+02 | 0. | 0. | | |
| COMP. | FRACCIONES ALIMENTADAS | | | FRACCIONES DE LAS CORRIENTES DE SALIDA | | | | FRACCIONES Y CTE. DE EQUILIBRIO | |
| | X _{F(1)} | X _{F(2)} | X _{U(1)} | X _{H(1)} | X _{T(1)} | X _{H(2)} | X _{E(1)} | X _{E(2)} | X _{E(3)} |
| 1 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 2 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 3 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 4 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 5 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 6 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| 7 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |

(b)

$$K = \frac{-y}{x} = \frac{-0.}{x} = 0.$$

donde "y" es la fracción molar para el Aceite pesado en la corriente de salida para la fase ligera, la cual es igual a cero, y "x" es la fracción molar para el mismo componente en la corriente de salida para la fase pesada, la cual podrá tomar diferentes valores.

Las tarjetas de lectura son las siguientes:

Tarjeta 1: Se lee DELTAT,SOLREA

0.,0.

Tarjeta 2: Se lee N,U,V,F,H,E,RI,RL

6,110.4,100.,0.,0.,0.,0.,0.

Tarjeta 3: Se lee [XU(I),I=1,N],[XV(I),I=1,N],[XF(I),I=1,N],

[EK(I),I=1,N]

0.,0.,0.,.02,.05,.93,.286,.157,.24,.169,.148,0.,0.,0.,0.,
0.,0.,51.,13.,3.1,.85,.26,0.

Los resultados obtenidos se presentan en la Figura ----
[IV.13.b].

HUMIDIFICACION:

Problema 3.- Este problema fue diseñado para ejemplificar el equilibrio en la humidificación aplicando el balance de materia.

Nueve kg de agua a 43.3 °C, se mezclan con 101,11 kg de aire caliente con una humedad de 0.0111 kg agua/kg aire seco. Se considera que se contactan el tiempo suficiente para alcanzar el equilibrio y salir a una temperatura de 43.3 °C. Obtener la composición y la cantidad de las corrientes en equilibrio.

Solución.- La siguiente tabla se preparó con los datos proporcionados en el problema, de acuerdo a la nomenclatura usada en el simulador y necesaria para alimentar el programa:

| COMPONENTE | CORRIENTE | U | V | K_i |
|------------|-----------|----------|----------|-----------------|
| | | x_{Ui} | x_{Vi} | |
| 1 Agua | | 1. | 0.010978 | 0.054164 |
| 2 Aire | | 0. | 0.989022 | 1×10^6 |
| kg totales | | 9. | 101.11 | |

La relación de concentraciones en equilibrio (K_i) para el agua se obtuvo de datos de presiones de vapor. La siguiente tabla se preparó para ejemplificarlo. En ella, se calcula la fracción peso para el agua en la corriente gaseosa aplicando la siguiente ecuación:

$$y_1 = \frac{18.02 p_1}{18.02 p_1 + 28.97 [760 - p_1]}$$

donde:

18.02 = Peso molecular del agua.

28.97 = Peso molecular del aire.

760 = Presión atmosférica en mm hg.

p_1 = Presión de vapor del agua en mm hg.

para la tabla:

T = Temperatura en °C.

K_1 = Relaciones de equilibrio para el agua.

K_2 = Relaciones de equilibrio para el aire.

| T | P_1 | y_1 | K_1 | K_2 |
|-------|-------|----------|----------|-----------------|
| 38.80 | 52.14 | 0.043810 | 0.043810 | 1×10^6 |
| 40.00 | 55.34 | 0.046574 | 0.046574 | " |
| 41.11 | 58.70 | 0.049487 | 0.049487 | " |
| 42.22 | 62.24 | 0.052256 | 0.052256 | " |
| 43.30 | 65.96 | 0.055816 | 0.055816 | " |
| 44.44 | 69.87 | 0.059243 | 0.059243 | " |
| 45.55 | 73.98 | 0.062861 | 0.062861 | " |
| 46.66 | 78.29 | 0.067149 | 0.067149 | " |

La siguiente ecuación determina la relación ó constante de equilibrio para el aire:

$$K_2 = \frac{y_2}{x_2} = \frac{y_2}{0} = \text{Indefinido}$$

donde " y_2 " es la fracción peso del aire en la fase gaseosa y " x_2 " es la fracción peso del aire en la fase líquida. En esta ecuación, " x_2 " es igual a cero al no transferirse el aire a la fase líquida.

Un componente que se transfiere ampliamente en la fase pesada ó en la Fase líquida para este caso, tendrá un valor de " x_2 " mucho mas grande que " y_2 ", lo cual ocasionará un valor - muy pequeño de " K_2 ". El valor de " K_2 " estará mas cerca de cero cuando " y_2 " disminuya y será cero cuando " y_2 " sea cero.

El caso contrario sucede cuando el componente se transfiere con preferencia en la fase ligera, por ejemplo la fase gaseosa. El valor de " K_2 " será bastante grande al ser mucho mayor " y_2 " que el valor de " x_2 ", así, el valor de " K_2 " se irá incrementando si el valor de " x_2 " disminuye y tenderá a infinito conforme " x_2 " se acerque a cero.

El anterior analisis sirve de base para establecer que -- " K_2 " será bastante grande para un componente que se transporta en la fase ligera y no se transfiere a la fase pesada. Se realizaron varias aplicaciones fijando para el aire relaciones de equilibrio de 1×10^{12} , 1×10^{10} , 1×10^8 , 1×10^6 . Se observó que una relación de equilibrio del orden de 1×10^6 no daba problemas para la convergencia. En el problema analizado se fija para el aire una relación de concentraciones en equilibrio igual a 1×10^6 .

Las tarjetas de lectura para este problema son:

Tarjeta 1: Se lee DELTAT,SOLREA

0.,0.

Tarjeta 2: Se lee N,U,V,F,H,RI,RL

2,9.,101.11,0.,0.,0.,0.,0.

Tarjeta 3: Se lee XU(1),XU(2),XV(1),XV(2),XF(1),XF(2),EK(1),
EK(2).

1.,0.,.010978,.989022,0.,0.,.055816,1000000.

Los resultados se ilustran en la Fig. (IV.14.a).

SECADO:

Problema 4.- El siguiente ejemplo se adaptó del problema 9.1, Pg. 242, del libro Problemas de Ingeniería Química de J. Ocon G. y G. Tojo B.

En un ambiente con humedad relativa del 60 %, que se mantiene a 25°C, hay 1. kg de nitrocelulosa con 20 % de humedad [referida al sólido húmedo]. Empleando la tabla de datos de equilibrio para este sistema a 25°C y 1. atm de presión, calcular el equilibrio para esta mezcla si consideramos 10 000 - kg de aire húmedo.

Solución.- Los datos necesarios para alimentar al programa, - preparados a partir de los datos suministrados por el problema, son:

| COMPONENTE | CORRIENTE | U %peso | V %peso | K_i |
|------------|---------------|------------|------------|---------------------|
| 1 | Agua | 20. | 1.1662 | 0.122487 |
| 2 | Aire | 0. | 98.8337 | 1. X10 ⁷ |
| 3 | Nitrocelulosa | 80. | 0. | 0. |
| kg totales | | 1. | 10000. | |

La siguiente tabla presenta las relaciones de equilibrio para el sistema agua-aire-nitrocelulosa y la forma para obtener las relaciones de equilibrio. Se aplican las ecuaciones:

$$y_1 = \frac{18.02 p_1}{18.02 p_1 + 28.97 (760 - p_1)}$$

$$x_1 = \frac{H_s}{1 + H_s}$$

donde:

H_R = Humedad relativa del aire.

p_1 = Presión de vapor del agua en el sólido ó presión parcial del vapor de agua en el aire.

H_s = Humedad del sólido en kg agua/kg de sólido seco.

y_1 = Fracción peso del agua en el gas.

x_1 = Fracción peso del agua en el sólido.

K_1 , K_2 y K_3 = Relaciones de equilibrio del agua, aire y -
nitrocelulosa respectivamente.

| H_R | P_1 | H_s | y_1 | x_1 | K_1 | K_2 | K_3 |
|-------|-------|-------|----------|----------|-----------|----------------|-------|
| 0. | 0. | 0. | | | | | |
| 8.4 | 2. | 0.034 | 0.001638 | 0.032680 | 0.0498330 | $1 \cdot 10^7$ | 0. |
| 17.1 | 4. | 0.05 | 0.003280 | 0.04761 | 0.068886 | " | 0. |
| 25.7 | 6. | 0.063 | 0.004926 | 0.059266 | 0.083106 | " | 0. |
| 34.2 | 8. | 0.075 | 0.006573 | 0.069767 | 0.094223 | " | 0. |
| 42.8 | 10. | 0.084 | 0.008225 | 0.07749 | 0.106147 | " | 0. |
| 51.4 | 12. | 0.094 | 0.00988 | 0.085823 | 0.114990 | " | 0. |
| 60.0 | 14. | 0.104 | 0.011538 | 0.094202 | 0.122487 | " | 0. |
| 68.5 | 16. | 0.115 | 0.0132 | 0.103139 | 0.127985 | " | 0. |
| 77.1 | 18. | 0.129 | 0.014865 | 0.114260 | 0.130099 | " | 0. |
| 85.7 | 20. | 0.145 | 0.016534 | 0.126637 | 0.130557 | " | 0. |
| 94.2 | 22. | 0.165 | 0.018205 | 0.141630 | 0.128539 | " | 0. |
| 100.0 | 23.7 | 0.182 | 0.019674 | 0.153976 | 0.127778 | " | 0. |

En este caso, se está considerando que el volumen del aire húmedo que entra es considerablemente mucho mayor que la cantidad de agua que extrae del sólido, lo que no ocasiona una variación considerable de las condiciones originales del aire.

Las relaciones de concentración en equilibrio para el aire y la nitrocelulosa tienen valores asignados que ya fueron discutidos y explicados en los problemas expuestos anteriormente.

Las tarjetas de lectura para el programa son:

Tarjeta 1: Se lee DELTAT, SOLREA

0., 0.

Tarjeta 2: Se lee N, U, V, F, H, E, RI, RL

3, 1., 10000., 0., 0., 0., 0., 0.

Tarjeta 3: Se lee XB(1), XB(2), XU(3), XV(1), XV(2), XV(3), XF(1),
XF(2), XF(3), EK(1), EK(2), EK(3)

0.2, 0., 0.6, 0.11662, .9883337, 0., 0., 0., 0., .122487, 10000000., 0.

La Fig. (IV.14.b) ilustra la tabla de resultados obtenidos.

**** DATOS Y RESULTADOS ****

Fig. (IV.14)

| CORRIENTES DE ALIMENTACION | | | | CORRIENTES DE SALIDA | | | |
|----------------------------|----------------------------|--|---------------------------------|----------------------|----------------------------|--|---------------------------------|
| COMP. | FRACCIONES ALIMENTADAS | FRACCIONES DE LAS CORRIENTES DE SALIDA | FRACCIONES Y CTE. DE EQUILIBRIO | COMP. | FRACCIONES ALIMENTADAS | FRACCIONES DE LAS CORRIENTES DE SALIDA | FRACCIONES Y CTE. DE EQUILIBRIO |
| 1 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 1.000000 0.000000 0.000000 | 1 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 1.000000 0.000000 0.000000 |
| 2 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 2 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 |

**** DATOS Y RESULTADOS ****

| CORRIENTES DE ALIMENTACION | | | | CORRIENTES DE SALIDA | | | |
|----------------------------|----------------------------|--|---------------------------------|----------------------|----------------------------|--|---------------------------------|
| COMP. | FRACCIONES ALIMENTADAS | FRACCIONES DE LAS CORRIENTES DE SALIDA | FRACCIONES Y CTE. DE EQUILIBRIO | COMP. | FRACCIONES ALIMENTADAS | FRACCIONES DE LAS CORRIENTES DE SALIDA | FRACCIONES Y CTE. DE EQUILIBRIO |
| 1 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 1 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 |
| 2 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 2 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 |

**** DATOS Y RESULTADOS ****

| CORRIENTES DE ALIMENTACION | | | | CORRIENTES DE SALIDA | | | |
|----------------------------|----------------------------|--|---------------------------------|----------------------|----------------------------|--|---------------------------------|
| COMP. | FRACCIONES ALIMENTADAS | FRACCIONES DE LAS CORRIENTES DE SALIDA | FRACCIONES Y CTE. DE EQUILIBRIO | COMP. | FRACCIONES ALIMENTADAS | FRACCIONES DE LAS CORRIENTES DE SALIDA | FRACCIONES Y CTE. DE EQUILIBRIO |
| 1 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 1 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 |
| 2 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 2 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 |
| 3 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 3 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 | 0.000000 0.000000 0.000000 |

CRISTALIZACION:

Problema 5.- Este problema es propuesto en el libro Operaciones Básicas de Ingeniería Química de McCabe/Smith.

Se tienen 1930 lb de una solución que contiene 31.088 % - en peso de $MgSO_4$ en agua. Esta solución se enfría a $60^{\circ}F$ y se requiere calcular la cantidad y composición de las fases resultantes.

Solución.- El desglose de datos necesarios para el programa - son los siguientes:

| COMPONENTES | CORRIENTES | U %peso | V %peso |
|-------------|------------|------------|------------|
| 1 $MgSO_4$ | | 31.0880 | 0.501598 |
| 2 H_2O | | 68.9119 | 1.475872 |
| lb totales | | 1930.0 | |

La siguiente tabla presenta los datos de equilibrio para este sistema:

T = Temperatura en $^{\circ}F$.

y_1 = Fracción peso de $MgSO_4$ en solución.

y_2 = Fracción peso del agua en la solución.

x_1 = Fracción peso de cristales de $MgSO_4$ anhidro.

x_2 = Fracción peso del agua de cristalización

K_1 = Relaciones de equilibrio para el $MgSO_4$.

K_2 = Relaciones de equilibrio para el agua.

| T | y_1 | y_2 | x_1 | x_2 | K_1 | K_2 |
|-----|-------|-------|---------|---------|----------|----------|
| 25 | 0.165 | 0.835 | 0.37790 | 0.64209 | 0.436615 | 1.300435 |
| 30 | 0.185 | 0.815 | 0.37790 | 0.64209 | 0.489538 | 1.269287 |
| 35 | 0.214 | 0.785 | 0.37790 | 0.64209 | 0.566276 | 1.224122 |
| 40 | 0.22 | 0.780 | 0.48843 | 0.51156 | 0.450415 | 1.524742 |
| 60 | 0.245 | 0.755 | 0.48843 | 0.51156 | 0.501598 | 1.475872 |
| 80 | 0.275 | 0.725 | 0.48843 | 0.51156 | 0.563019 | 1.417229 |
| 100 | 0.307 | 0.695 | 0.48843 | 0.51156 | 0.628534 | 1.354674 |
| 120 | 0.333 | 0.667 | 0.52714 | 0.47285 | 0.691704 | 1.410581 |
| 140 | 0.360 | 0.640 | 0.52714 | 0.47285 | 0.682923 | 1.354814 |
| 160 | 0.375 | 0.625 | 0.86994 | 0.13005 | 0.431063 | 4.485555 |
| 180 | 0.390 | 0.610 | 0.86994 | 0.13005 | 0.448305 | 4.690221 |
| 200 | 0.410 | 0.590 | 0.86994 | 0.13005 | 0.471295 | 4.536444 |
| 220 | 0.420 | 0.580 | 0.86994 | 0.13005 | 0.482790 | 4.459555 |

Las tarjetas de lectura son:

Tarjeta 1: Se lee DELTAT,SOLREA
0.,0.

Tarjeta 2: Se lee N,U,V,F,H,E,RI,RL
2,1930.,0.,0.,0.,0.,0.,0.

Tarjeta 3: Se lee XU(1),XU(2),XV(1),XV(2),XF(1),XF(2),EK(1),
EK(2)
.31088,.689119,0.,0.,0.,0.,.501598,1.475872

En la Fig.[IV.14.c] se presentan los resultados obtenidos.

ABSORCION:

Problema 6.- Este problema es una adaptación del ejemplo 6.4 del libro Problemas de Ingeniería Química de J. Ocon G. y G. Tojo B. [Vol. II].

Las siguientes corrientes se mezclan permitiéndoseles alcanzar el equilibrio a una temperatura de 20°C y una presión total de 516.4 mm hg.

Corriente 1.- 2777.778 moles de agua.

Corriente 2.- 1004.4 moles de una mezcla de NH_3 y aire con una fracción mol de 0.5856 para el NH_3 y 0.4144 para el aire.

Los datos de equilibrio para este sistema a 20°C son:

e - 60. 50. 40. 30. 25. 20. 15. 10.
p -945. 686. 470. 298. 227. 166. 114. 69.6

e - 7.5 5. 4. 3. 2.
p - 50.0 31.7 24.9 18.2 12.

donde "e" representa la concentración en kg $\text{NH}_3/100$ kg de H_2O y "p" representa la presión parcial del NH_3 en mm hg.

Solución.- Los datos adoptados a la nomenclatura del simulador son:

| COMPONENTES | CORRIENTES | U X_{Ui} | V X_{Vi} |
|-------------------|-----------------|---------------|---------------|
| 1 | NH ₃ | 0. | 0.5856 |
| 2 | Agua | 1. | 0. |
| 3 | Aire | 0. | 0.4144 |
| Moles alimentadas | | 2777,778 | 1004.4 |

La siguiente tabla muestra los datos necesarios que deberán ser alimentados para el caso donde el equilibrio es función de la naturaleza de las fases, la temperatura, la presión y también de la concentración. La nomenclatura usada es equivalente a la utilizada en el programa. Las fracciones mol se obtuvieron con las siguientes ecuaciones:

$$AA = \frac{P_{NH_3}}{P_{total}} \quad BB = \frac{c/17.}{c/17. + 100./18.02}$$

donde: 17. = Peso molecular del NH₃.

18.02 = Peso molecular del agua.

NN = No. de datos.

AA = Fracción mol del NH₃ en la fase gaseosa.

BB = Fracción mol del NH₃ en la fase líquida.

CC = Relaciones de equilibrio para el NH₃.

DD = Relaciones de equilibrio para el agua.

EE = Relaciones de equilibrio para el aire.

| NN | AA | BB | CC | DD | EE |
|----|----------|---------|---------|----|--------------------|
| 1 | 0.000000 | 0.01050 | - | 0. | 1.X10 ⁶ |
| 2 | 0.023237 | 0.0207 | 1.12250 | 0. | " |
| 3 | 0.035244 | 0.0308 | 1.1442 | 0. | " |
| 4 | 0.048218 | 0.0406 | 1.1876 | 0. | " |
| 5 | 0.061386 | 0.0503 | 1.22039 | 0. | " |
| 6 | 0.096824 | 0.0736 | 1.31554 | 0. | " |
| 7 | 0.13478 | 0.0957 | 1.40835 | 0. | " |
| 8 | 0.220759 | 0.1371 | 1.6102 | 0. | " |
| 9 | 0.230440 | 0.14176 | 1.62556 | 0. | " |
| 10 | 0.321456 | 0.1748 | 1.83899 | 0. | " |
| 11 | 0.43958 | 0.2096 | 2.09727 | 0. | " |
| 12 | 0.577072 | 0.2411 | 2.39349 | 0. | " |
| 13 | 0.910147 | 0.2973 | 3.05931 | 0. | " |
| 14 | 1. | 0.3462 | - | 0. | " |

Las tarjetas de lectura son las siguientes:

Tarjeta 1: Se lee DELTAT,SOLREA

0.,1.

Tarjeta 2: Se lee N,U,V,F,H,E,RI,RL

3,2777.778,1004.4,0.,0.,0.,0.,0.

Tarjeta 3: Se lee XU[1],XU[2],XU[3],XV[1],XV[2],XV[3],XF[1],
XF[2],XF[3],EK[1],EK[2],EK[3]

0.,1.,0.,.5856,0.,0.4144,0.,0.,0.,0.,0.,0.

Tarjeta 4: Se lee NN,XSUP1

14,0.22

La Figura [IV.15.a] presenta los resultados obtenidos.

EXTRACCION:

Problema 7.- Este problema es una adaptación del ejemplo 7.9 del libro Problemas de Ingeniería Química de J. Ocon G. y G. Tojo B. [Vol. II].

Se tienen 100. kg de una solución de A y C, de composición 30 % en peso de C. Esta se somete a una extracción sencilla utilizando como disolvente el componente B. Si la operación se realiza utilizando 50. kg de B, calcular la composición y la cantidad del extracto y refinado.

Las composiciones de fases conjugadas para este sistema - en peso %, son las siguientes:

| A_R | B_R | C_R | A_E | B_E | C_E | |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|------------|
| 95.0 | 5.0 | 0.0 | 10.0 | 90.0 | 0.0 | |
| 92.5 | 5.0 | 2.5 | 10.1 | 82.0 | 7.9 | |
| 89.9 | 5.1 | 5.0 | 10.8 | 74.2 | 15.0 | |
| 87.3 | 5.2 | 7.5 | 11.5 | 67.5 | 21.0 | |
| 84.6 | 5.4 | 10.0 | 12.7 | 61.1 | 26.2 | |
| 81.9 | 5.6 | 12.5 | 14.2 | 55.8 | 30.0 | R-Refinado |
| 79.1 | 5.9 | 15.0 | 15.9 | 50.3 | 33.8 | E-Extracto |
| 78.3 | 6.2 | 17.5 | 17.8 | 45.7 | 36.5 | |
| 73.4 | 6.6 | 20.0 | 19.6 | 41.4 | 39.0 | |
| 67.5 | 7.5 | 25.0 | 24.6 | 32.9 | 42.5 | |
| 61.1 | 8.9 | 30.0 | 28.0 | 27.5 | 44.5 | |
| 54.4 | 10.6 | 35.0 | 33.3 | 21.7 | 45.0 | |
| 46.6 | 13.4 | 40.0 | 40.5 | 16.5 | 43.0 | |
| 43.4 | 15.0 | 41.6 | 43.4 | 15.0 | 41.6 | |

Solución.- La adaptación de datos se presenta a continuación:

| COMPONENTES | CORRIENTE | U | V |
|-------------|-----------|----------|----------|
| | | X_{Ui} | X_{Vi} |
| 1 C | | 0.30 | 0. |
| 2 B | | 0. | 1. |
| 3 A | | 0.70 | 0. |
| kg totales | | 100.0 | 50. |

La serie de datos necesarios para alimentarse al programa en sistemas donde el equilibrio es función de la naturaleza - de los componentes, de la temperatura, de la presión y de la concentración, usando las proposiciones "DATA", son:

| NN | AA | BB | CC | DD | EE |
|----|--------|--------|--------|---------|--------|
| 1 | 0.0000 | 0.0000 | 1.0000 | 1.0000 | 1.0000 |
| 2 | 0.079 | 0.025 | 1.075 | 1.2319 | 0.8690 |
| 3 | 0.15 | 0.05 | 1.2857 | 2.0471 | 0.6121 |
| 4 | 0.21 | 0.075 | 1.4833 | 3.0898 | 0.4582 |
| 5 | 0.262 | 0.1 | 1.7 | 4.3866 | 0.3644 |
| 6 | 0.30 | 0.125 | 1.95 | 6.2727 | 0.267 |
| 7 | 0.338 | 0.150 | 2.0857 | 7.3709 | 0.2273 |
| 8 | 0.365 | 0.175 | 2.2533 | 8.5254 | 0.2010 |
| 9 | 0.39 | 0.2 | 2.40 | 9.9642 | 0.1733 |
| 10 | 0.425 | 0.25 | 2.62 | 11.3148 | 0.1501 |
| 11 | 0.445 | 0.3 | 2.8 | 12.9807 | 0.1317 |
| 12 | 0.45 | 0.35 | 3.0 | 14.549 | 0.1201 |
| 13 | 0.430 | 0.4 | 3.16 | 16.4 | 0.1091 |
| 14 | 0.416 | 0.416 | 3.4 | 18.00 | 0.1052 |

Las tarjetas de lectura son:

Tarjeta 1: Se lee DELTAT,SOLREA

0.,1.

Tarjeta 2: Se lee N,U,V,F,H,E,RI,RL

3,100.,50.,0.,0.,0.,0.,0.

Tarjeta 3: Se lee XU(1),XU(2),XU(3),XV(1),XV(2),XV(3),XF(1),
XF(2),XF(3),EK(1),EK(2),EK(3)

0.30,0.,0.70,0.,1.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.

Tarjeta 4: Se lee NN,XSUP1

14,0.12

**** DATOS Y RESULTADOS ****

| CORRIENTES DE ALIMENTACION | | | | CONDICIONES DE SALIDA | | | |
|----------------------------|-------|-------------|-------------|-----------------------|-------------|-------|-------|
| CORRIENTES.. | (F) | (Y) | (S) | (W) | (I) | (H) | (P) |
| DATA 3 MUECS | 0. | 1.00000E+03 | 2.11172E+03 | 3.23472E+03 | 3.02952E+02 | 0. | 0. |

| COMP. | FRACCIONES ALIMENTADAS | | | FRACCIONES DE LAS CORRIENTES DE SALIDA | | | | FRACCIONES Y CTE. DE EQUILIBRIO | | |
|-------|------------------------|----------|----------|--|-----------|----------|----------|---------------------------------|----------|----------|
| | X(I) | Y(I) | Z(I) | X(I) | Y(I) | Z(I) | X(I) | Y(I) | Z(I) | |
| 1 | 0.000000 | 0.500000 | 0.300000 | 1.146551 | 0.232715 | 0.000000 | 3.000000 | 0.192553 | 0.202199 | 1.632160 |
| 2 | 0.000000 | 0.000000 | 1.000000 | 0.027417 | -0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0. |
| 3 | 0.000000 | 0.414000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.757201 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.747301 | 1.000000 |

(a)

**** DATOS Y RESULTADOS ****

| CORRIENTES DE ALIMENTACION | | | | CONDICIONES DE SALIDA | | | |
|----------------------------|-------|-------------|-------------|-----------------------|-------------|-------|-------|
| CORRIENTES.. | (F) | (Y) | (S) | (W) | (I) | (H) | (P) |
| DATA 3 MUECS | 0. | 5.00000E+01 | 1.00000E+02 | 7.12360E+01 | 7.37840E+01 | 0. | 0. |

| COMP. | FRACCIONES ALIMENTADAS | | | FRACCIONES DE LAS CORRIENTES DE SALIDA | | | | FRACCIONES Y CTE. DE EQUILIBRIO | | |
|-------|------------------------|----------|----------|--|----------|----------|----------|---------------------------------|----------|----------|
| | X(I) | Y(I) | Z(I) | X(I) | Y(I) | Z(I) | X(I) | Y(I) | Z(I) | |
| 1 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.111729 | 0.279053 | 0.000000 | 0.000000 | 0.111729 | 0.279053 | 0.000000 |
| 2 | 0.000000 | 1.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.594423 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.594423 | 1.000000 |
| 3 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.125231 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.125231 | 0.000000 |

(b)

**** DATOS Y RESULTADOS ****

| CORRIENTES DE ALIMENTACION | | | | CONDICIONES DE SALIDA | | | |
|----------------------------|-------|-------------|-------------|-----------------------|-------------|-------|-------|
| CORRIENTES.. | (F) | (Y) | (S) | (W) | (I) | (H) | (P) |
| DATA 3 MUECS | 0. | 7.50000E+02 | 1.00000E+03 | 9.24300E+02 | 8.25530E+02 | 0. | 0. |

| COMP. | FRACCIONES ALIMENTADAS | | | FRACCIONES DE LAS CORRIENTES DE SALIDA | | | | FRACCIONES Y CTE. DE EQUILIBRIO | | |
|-------|------------------------|----------|----------|--|----------|----------|----------|---------------------------------|----------|----------|
| | X(I) | Y(I) | Z(I) | X(I) | Y(I) | Z(I) | X(I) | Y(I) | Z(I) | |
| 1 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.122030 | 0.307793 | 0.000000 | 0.000000 | 0.122030 | 0.307793 | 0.000000 |
| 2 | 0.000000 | 1.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.652011 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.652011 | 1.000000 |
| 3 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0. |

(c)

La Figura [IV.15.b] ilustra los resultados obtenidos.

LIXIVIACION:

Problema 8.- Este problema es una adaptación del ejemplo 7.3 del libro Problemas de Ingeniería Química de J. Ocon G. y G. Tojo B.

Una harina de pescado contiene aceite que ha de extraerse con benceno en una etapa sencilla. Experimentalmente se ha encontrado que la disolución retenida por el sólido inerte es función de la composición de la solución. Los datos de los extremos de las líneas de reparto en concentraciones en peso -- son:

| REFINADO | | | EXTRACTO | | | |
|----------|--------|--------|----------|-----|----|-------------|
| A | B | C | A | B | C | |
| 0.0000 | 0.3330 | 0.6670 | 0.0 | 1.0 | 0. | |
| 0.0336 | 0.302 | 0.6644 | 0.1 | 0.9 | 0. | |
| 0.068 | 0.272 | 0.66 | 0.2 | 0.8 | 0. | A - Aceite |
| 0.1039 | 0.242 | 0.6541 | 0.3 | 0.7 | 0. | B - Benceno |
| 0.1419 | 0.213 | 0.6451 | 0.4 | 0.6 | 0. | C - Harina |
| 0.1817 | 0.1817 | 0.6366 | 0.5 | 0.5 | 0. | |
| 0.224 | 0.1492 | 0.6268 | 0.6 | 0.4 | 0. | |
| 0.269 | 0.1148 | 0.6172 | 0.7 | 0.3 | 0. | |

Al sistema de extracción entran 1000. kg/hr de alimentación que contiene 40 % en peso de aceite y la cantidad de benceno empleada es de 750. kg. Calcular la composición y la cantidad del extracto y refinado.

Solución.- El desglose de datos para el programa son:

| COMPONENTES | CORRIENTES | U | V |
|-------------|------------|----------|----------|
| | | X_{Ui} | X_{Vi} |
| 1 Aceite | | 0.4 | 0.0 |
| 2 Benceno | | 0.0 | 1.0 |
| 3 Harina | | 0.6 | 0.0 |
| Kg totales | | 1000.0 | 750.0 |

Los series de datos que deben ser alimentados en las posiciones "DATA", se presentan en la siguiente tabla. La nomenclatura concuerda con la utilizada para el simulador:

| NN | AA | BB | CC | DD | EE |
|----|-----|--------|----------|----------|----|
| 1 | 0.0 | 0.0000 | 2.611840 | 2.613240 | 0. |
| 2 | 0.1 | 0.0336 | 2.678571 | 2.680965 | 0. |
| 3 | 0.2 | 0.068 | 2.751788 | 2.751788 | 0. |
| 4 | 0.3 | 0.1039 | 2.81888 | 2.816901 | 0. |
| 5 | 0.4 | 0.1419 | 2.887301 | 2.892561 | 0. |
| 6 | 0.5 | 0.1817 | 2.941176 | 2.941176 | 0. |
| 7 | 0.6 | 0.224 | 2.97619 | 2.980132 | 0. |
| 8 | 0.7 | 0.268 | 3.0 | 3.003003 | 0. |

Las tarjetas de lectura son las siguientes:

Tarjeta 1: Se lee DELTAT,SOLREA

0.,1.

Tarjeta 2: Se lee N,U,V,F,H,E,RI,AL

3,1000.,750.,0.,0.,0.,0.,0.

Tarjeta 3: Se lee XU[1],XU[2],XU[3],XV[1],XV[2],XV[3],XF[1],

XF[2],XF[3],EK[1],EK[2],EK[3]

0.4,0.,0.6,0.,1.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.

Tarjeta 4: Se lee NN,XSUPI

8,0.14

La Fig. (IV.15.c) representa los resultados obtenidos -- para este problema.

b.- BALANCES SIMULTANEOS DE MATERIA Y ENERGIA.

ABSORCION:

Problema 9.- Este problema es una adaptación del ejemplo 8.4 del libro Operaciones de Transferencia de Masa de Robert F. - Treybal.

Una libra mol por unidad de tiempo de un gas consistente de 75.% de metano y 25.% de n-pentano a 80°F y 1 atm de presión, será tratado en una absorción adiabática con 2.11 lb -- mol por unidad de tiempo de una mezcla líquida consistente de 94.79 % de aceite no volátil y 5.21 % de n-pentano a una temperatura de 102.3°F.

Calcular la concentración, la cantidad y la temperatura -

de las fases separadas. Despreciar la solubilidad del metano en el aceite. El pentano forma soluciones ideales con el aceite no volátil.

La capacidad calorífica para los componentes sobre un rango de temperaturas de 0 a 150^oF son:

Aceite : 90 Btu/lb mol ^oF
 CH₄ : 8.5 Btu/lb mol ^oF como vapor
 n-C₅H₁₂ : 28.6 Btu/lb mol ^oF como vapor
 42.4 Btu/lb mol ^oF como líquido

El calor latente de vaporización del n-C₅H₁₂ a 0^oF es de 12 550. Btu/lb mol.

Solución.- La siguiente tabla ilustra el desglose de datos necesarios para el programa:

| COMPONENTES | CORRIENTES U | V |
|----------------------------|-----------------|-----------------|
| | X _{Ui} | X _{Vi} |
| 1 n-Pentano | 0.0521 | 0.25 |
| 2 Aceite | 0.9479 | 0. |
| 3 Metano | 0. | 0.75 |
| lb mol totales | 2.11 | 1. |
| temperatura ^o F | 102.30 | 80.0 |

Los datos de las constantes de equilibrio para el Pentano pueden ser encontradas en la bibliografía. Los datos de equilibrio para este sistema, donde la nomenclatura usada es la misma a la de los bloques de datos alimentados al programa, son las siguientes:

NN = No. de coordenadas.

AA = Temperatura en ^oF.

BB = Constante de equilibrio del n-pentano.

CC = Constante de equilibrio del aceite.

DD = Constante de equilibrio del metano.

| NN | AA | BB | CC | DD |
|----|------|--------|----|------------------|
| 1 | 65.3 | 0.5263 | 0. | $1. \times 10^6$ |
| 2 | 70. | 0.60 | 0. | " |
| 3 | 80. | 0.730 | 0. | " |
| 4 | 90. | 0.87 | 0. | " |
| 5 | 97. | 1.0 | 0. | " |
| 6 | 100. | 1.05 | 0. | " |
| 7 | 110. | 1.25 | 0. | " |

Las tarjetas de lectura necesarias para alimentar el programa son las siguientes:

Tarjeta 1: Se alimentan DELTAT, SOLREA
1., 0.

Tarjeta 2: Se alimentan N, U, V, F, H, E, RI, RL
3, 2.11, 1., 0., 0., 0., 0., 0.

Tarjeta 3: Se alimentan [XU(I), I=1, N], [XV(I), I=1, N],
[XF(I), I=1, N], [EK(I), I=1, N]
.0521, .9479, 0., .25, 0., .75, 0., 0., 0., 0., 0., 0.

Tarjeta 4: Se alimenta NN
7

Tarjeta 5: Se lee TLU, TVV, TLF, TBASE, QCAL, HMEZ1, HMEZ2
102.3, 86., 0., 0., 0., 0., 0.

Tarjeta 6: Se alimenta TLB1
90.

Tarjeta 7: Se alimentan [CPL(I), I=1, N], [CPV(I), I=1, N],
[CLAT(I), I=1, N]
42.4, 90., 0., 28.6, 0., 8.5, 12550., 0., 0.

La figura [IV.16.a] muestra la tabla de resultados para este problema.

HUMIDIFICACION:

Problema 10.- Combinación de balances simultáneos de materia y energía en una torre de enfriamiento.

Se requiere rediseñar una torre de enfriamiento cuyo ventilador tiene una capacidad de 8.3×10^5 pies³/hr [594120. lb aire seco/hr] de aire húmedo a 80°F con una humedad de 0.0098

lb agua/lb aire seco. El agua entra con un flujo de 495717. - lb agua/hr y a una temperatura de 120°F. Si el sistema pierde únicamente 9096. Btu/hr y consideramos que las fases se contactan considerablemente hasta alcanzar el equilibrio, calcular la composición, cantidad y temperatura de las fases resultantes.

Los calores específicos de los componentes son:

Agua: 0.45 Btu/lb °F como vapor
 1.00 Btu/lb °F como líquido
 Aire: 0.24 Btu/lb °F en fase gas

El calor latente para el agua a una temperatura de 32°F es 1075.6 Btu/lb.

Solución: El desglose de datos obtenidos a partir de la información suministrada en el problema se presenta en la siguiente tabla:

| COMPONENTE | CORRIENTES | U X_{Ui} | V X_{Vi} |
|----------------|------------|----------------------|------------------|
| 1 Agua | | 1. | 0.009705 |
| 2 Aire | | 0. | 0.990295 |
| lb totales | | 4.9571×10^5 | $6. \times 10^5$ |
| temperatura °F | | 120.0 | 80. |

De datos de presiones de vapor se obtuvieron las constantes de equilibrio para el agua. Se aplicó la siguiente ecuación, ya explicada en problemas anteriores:

$$\text{fracción peso} = \frac{18.02 p_a}{18.02 p_a + 29.97(760. - p_a)}$$

La siguiente tabla ilustra los datos obtenidos, donde:

NN = No. de coordenadas

AA = Temperatura en °F

BB = Representa la fracción peso obtenida con la anterior ocasión, y para el bloque de datos la constante de

CC = Constante de equilibrio para el aire.

| NN | AA | p_a | BB | CC |
|----|------|---------|----------|----------------------|
| 1 | 71. | 19.4249 | 0.016053 | 1. X 10 ⁶ |
| 2 | 73 | 20.7846 | 0.017192 | " |
| 3 | 75. | 22.2265 | 0.018394 | " |
| 4 | 77. | 23.7551 | 0.019674 | " |
| 5 | 79. | 25.3746 | 0.021033 | " |
| 6 | 81. | 27.089 | 0.022473 | " |
| 7 | 83. | 28.905 | 0.024002 | " |
| 8 | 85. | 30.825 | 0.025662 | " |
| 9 | 86. | 31.826 | 0.026466 | " |
| 10 | 87. | 32.855 | 0.027336 | " |
| 11 | 88. | 33.911 | 0.02823 | " |
| 12 | 89. | 34.999 | 0.029152 | " |
| 13 | 90. | 36.116 | 0.030099 | " |
| 14 | 91. | 37.264 | 0.031074 | " |
| 15 | 92. | 38.44 | 0.032074 | " |
| 16 | 93. | 39.66 | 0.033112 | " |
| 17 | 94. | 40.9 | 0.034169 | " |
| 18 | 95. | 42.18 | 0.035261 | " |
| 19 | 97. | 44.84 | 0.037536 | " |
| 20 | 99. | 47.65 | 0.039945 | " |
| 21 | 101. | 50.6 | 0.042482 | " |
| 22 | 103. | 53.72 | 0.045174 | " |
| 23 | 105. | 57.0 | 0.048012 | " |
| 24 | 107. | 60.45 | 0.051008 | " |
| 25 | 109. | 64.07 | 0.054164 | " |

Los bloques de datos alimentados al programa en las propo-
siciones "DATA" son: "AA", "BB" y "CC".

Las tarjetas de lectura son las siguientes:

Tarjeta 1: Se alimentan DELTAT,SOLREA
1.,0.

Tarjeta 2: Se alimentan N,U,V,F,H,E,RI,RL
2,495717.,600000.,0.,0.,0.,0.,0.

Tarjeta 3: Se alimentan XU(1),XU(2),XV(1),XV(2),XF(1),XF(2),
EK(1),EK(2)
1.,0.,.009705,.990295,0.,0.,0.,0.

Tarjeta 4: Se alimenta NN
25

Tarjeta 5: Se alimentan TLU,TVV,TLF,TBASE,QCAL,HMEZ1,HMEZ2
120.,88.,0.,32.,-9096.,0.,0.

Fig. (IV.16)

***** DATOS Y RESULTADOS *****

| CORRIENTES.. | CORRIENTES DE ALIMENTACION | | | CORRIENTES DE SALIDA | | |
|--------------|----------------------------|-------------|-------------|----------------------|-------------|------|
| | X(1) | X(2) | X(3) | X(4) | X(5) | X(6) |
| ASA O MOLES | 0. | 1.00000E+70 | 2.11000E+00 | 7.24000E+00 | 7.04921E+01 | 0. |
| ENTALPIA.... | 0. | 4.30000E+03 | 8.95300E+03 | 0.19091E+07 | 2.77817E+07 | 0. |
| TEMPERATURA. | 0. | 0.00000E+01 | 1.07300E+02 | 1.08377E+02 | 1.08377E+02 | 0. |

(a)

LA TEMPERATURA DE EQUILIBRIO DEL SISTEMA ES = 100.3767

| COMP. | FRACCIONES ALIMENTADAS | | | FRACCIONES DE LAS CORRIENTES DE SALIDA | | | FRACCIONES Y CTE. DE EQUILIBRIO | | | |
|-------|------------------------|-----------|-----------|--|-----------|-----------|---------------------------------|-----------|-----------|-----------|
| | X(1) | X(2) | X(3) | X(4) | X(5) | X(6) | X(7) | X(8) | X(9) | |
| 1 | 0.0000000 | 0.2500000 | 0.2052100 | 0.1091112 | 0.1327609 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.1091112 | 0.1327609 | 0.2175000 |
| 2 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.9879000 | 0.8908000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.8908000 | 0.0000000 | 0. |
| 3 | 0.0000000 | 0.7500000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.8671290 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.8671290 | 0.0000000 |

***** DATOS Y RESULTADOS *****

| CORRIENTES.. | CORRIENTES DE ALIMENTACION | | | CORRIENTES DE SALIDA | | |
|--------------|----------------------------|-------------|-------------|----------------------|-------------|------|
| | X(1) | X(2) | X(3) | X(4) | X(5) | X(6) |
| ASA O MOLES | 0. | 0.00000E+10 | 4.95717E+05 | 4.22000E+05 | 4.12737E+05 | 0. |
| ENTALPIA.... | 0. | 2.20505E+11 | 8.00000E+01 | 5.81981E+01 | 4.09130E+01 | 0. |
| TEMPERATURA. | 0. | 0.00000E+01 | 1.20000E+02 | 9.01001E+01 | 9.01001E+01 | 0. |

(b)

LA TEMPERATURA DE EQUILIBRIO DEL SISTEMA ES = 90.1881

| COMP. | FRACCIONES ALIMENTADAS | | | FRACCIONES DE LAS CORRIENTES DE SALIDA | | | FRACCIONES Y CTE. DE EQUILIBRIO | | | |
|-------|------------------------|-----------|-----------|--|-----------|-----------|---------------------------------|-----------|-----------|------------|
| | X(1) | X(2) | X(3) | X(4) | X(5) | X(6) | X(7) | X(8) | X(9) | |
| 1 | 0.0000000 | 0.0007000 | 0.0000000 | 0.9999993 | 0.0307024 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.9999993 | 0.0307024 | 3.0202E+02 |
| 2 | 0.0000000 | 0.9900000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.9697173 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.9697173 | 0.0000000 |

Tarjeta 6: Se alimenta TLB1

95.

Tarjeta 7: Se alimentan CPL[1],CPL[2],CPV[1],CPV[2],CLAT[1],
CLAT[2]

1.,0.,0.45,0.24,1075.8,0.

Los resultados obtenidos se presentan en la Fig.(IV.16.b)

DESTILACION:

Problema 11.- Este problema se diseño para ejemplificar los -
balances simultaneos de materia y energía en destilación.

Se esta analizando el plato de alimentación de una torre
fraccionaria donde el proceso se realiza a 150 psi. Al plato
se alimentan 1. lb mol de una mezcla de hidrocarburos a 180°F
y recibe un flujo líquido de 0.9740 lb mol a 176°F y un flujo
gaseoso de 0.3540 lb mol a 202°F por unidad de tiempo.

Si el sistema recibe 3500. Btu por unidad de tiempo, cal-
cular la cantidad, concentración y temperatura de equilibrio
de las fases resultantes.

La siguiente tabla presenta la concentración molar de las
corrientes de entrada; la capacidad calorífica promedio en --
Btu/lb mol °F, funcional para un intervalo de 0 a 150°F, para
el estado líquido y gaseoso; y el calor latente de vaporiza-
ción en Btu/lb mol a 0°F.

| | | Concentración | | Cp | Calorif. | | Calor |
|---------|--------------|---------------|--------|-------|----------|---------|--------|
| | | Flujos | | | Gas | Líquido | |
| | Alimentación | Líquido | Gas | Gas | Líquido | Latente | |
| Metano | [C1] | .03 | .00197 | .0044 | 8.5 | 19.3 | 2050. |
| Etano | [C2] | .07 | .01827 | .0528 | 12.71 | 25.1 | 5100. |
| Propano | [C3] | .15 | .10540 | .2251 | 18.16 | 27.8 | 7600. |
| Butano | [C4] | .33 | .44972 | .3291 | 24.45 | 33.1 | 10100. |
| Pentano | [C5] | .30 | .36154 | .2451 | 28.6 | 42.4 | 12550. |
| Hexano | [C6] | .12 | .06310 | .1435 | 32.53 | 46.3 | 14551. |

Las constantes de equilibrio para cada componente a las - condiciones de operación son:

| NN | T ^o F | K _{C1} | K _{C2} | K _{C3} | K _{C4} | K _{C5} | K _{C6} |
|----|------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| 1 | 100. | 17.0 | 3.80 | 1.30 | 0.41 | 0.14 | 0.056 |
| 2 | 115. | 18.0 | 4.20 | 1.5 | 0.5 | 0.18 | 0.09 |
| 3 | 138. | 19.2 | 4.8 | 1.8 | 0.66 | 0.265 | 0.129 |
| 4 | 150. | 19.7 | 5.12 | 2.03 | 0.75 | 0.2949 | 0.15 |
| 5 | 158. | 20.2 | 5.38 | 2.17 | 0.81 | 0.327 | 0.159 |
| 6 | 165. | 20.6 | 5.52 | 2.3 | 0.86 | 0.354 | 0.168 |
| 7 | 175. | 21. | 5.9 | 2.49 | 0.95 | 0.395 | 0.18 |
| 8 | 188. | 21.5 | 6.18 | 2.72 | 1.07 | 0.46 | 0.217 |
| 9 | 200. | 22. | 6.45 | 2.96 | 1.2 | 0.52 | 0.25 |
| 10 | 210. | 22.5 | 6.77 | 3.15 | 1.3 | 0.576 | 0.287 |
| 11 | 217. | 22.8 | 7.0 | 3.28 | 1.4 | 0.62 | 0.312 |
| 12 | 227. | 23.2 | 7.31 | 3.48 | 1.5 | 0.68 | 0.35 |
| 13 | 235. | 23.4 | 7.6 | 3.65 | 1.6 | 0.73 | 0.38 |
| 14 | 250. | 24. | 8.1 | 4.0 | 1.8 | 0.85 | 0.45 |

Solución.- Los datos adaptados a la nomenclatura del simula-- dor son los siguientes:

| COMPONENTES | CORRIENTES | F | U | V |
|----------------------------|------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| | | X _{Fi} | X _{Ui} | X _{Vi} |
| 1 Metano | | .03 | 0.00197 | 0.0044 |
| 2 Etano | | .07 | 0.01827 | 0.0528 |
| 3 Propano | | .15 | 0.10540 | 0.2251 |
| 4 Butano | | .33 | 0.44972 | 0.3291 |
| 5 Pentano | | .30 | 0.36154 | 0.2451 |
| 6 Hexano | | .12 | 0..06310 | 0.1435 |
| lb mol totales | | 1.0 | 0.9740 | 0.3540 |
| temperatura ^o F | | 180.0 | 176. | 202.0 |

Los bloques de datos que se deben alimentar al programa, equivalen a la tabla de las constantes de equilibrio presenta da, en lo siguiente: "AA = T^oF", "BB = K_{C1}", "CC = K_{C2}", -- "DD = K_{C3}", "EE = K_{C4}", "FF = K_{C5}", "GG = K_{C6}".

Las tarjetas de lectura son las siguientes:

Tarjeta 1: Se alimentan DELTAT,SOLREA
1.,0.

Tarjeta 2: Se alimentan N,U,V,F,H,E,RI,RL
6, .9740, .3540, 1.,0.,0.,0.,0.

Tarjeta 3: Se alimentan $[XU(I), I=1, N], [XV(I), I=1, N],$
 $[XF(I), I=1, N], [EK(I), I=1, N]$
 .00197, .01827, .10540, .44972, .36154, .0631, .0044, .0528, .2251,
 .3291, .2451, .1435, .03, .07, .15, .33, .30, .12, 0., 0., 0., 0., 0., 0.

Tarjeta 4: Se alimenta NN
 14

Tarjeta 5: Se alimentan TLU, TVV, TLF, TBASE, QCAL, HMEZ1, HMEZ2
 176., 202., 180., 0., 3500., 0., 0.

Tarjeta 6: Se alimenta TLB1
 90.

Tarjeta 7: Se alimentan $[CPL(I), I=1, N], [CPV(I), I=1, N],$
 $[CLAT(I), I=1, N]$
 19.3, 25.10, 27.8, 33.1, 42.4, 46.3, 8.5, 12.71, 18.16, 24.45, 28.6,
 32.53, 2050., 5100., 7600., 10100., 12550., 14551.

La Figura [IV.17] presenta los resultados obtenidos.

***** DATOS Y RESULTADOS *****

| | FRACCIONES DE LA ENTRADA | | | FRACCIONES DE LA SALIDA | | |
|--------------|--------------------------|-------------|-------------|-------------------------|-------------|----|
| MASA DE AGUA | 1.00000E+00 | 3.59000E-01 | 6.74000E-01 | 1.50241E+00 | 3.20537E+01 | 0. |
| ENTALPIA | 0.42690E+03 | 1.54302E+04 | 0.43014E+03 | 7.00021E+03 | 1.31735E+04 | 0. |
| TEMPERATURA | 1.80000E+02 | 2.07000E+02 | 1.74000E+02 | 1.88467E+02 | 1.94471E+02 | 0. |

LA ENTALPIA DE LA SALIDA DEL SISTEMA ES = 186.6667

| CORR. | FRACCIONES ALIMENTADAS | | | FRACCIONES DE LAS CORRIENTES DE SALIDA | | | | FRACCIONES Y DIF. DE FACILITADO | | |
|-------|------------------------|----------|----------|--|----------|----------|----------|---------------------------------|----------|----------|
| | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| 1 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 |
| 2 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 |
| 3 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 |
| 4 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 |
| 5 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 |
| 6 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 |

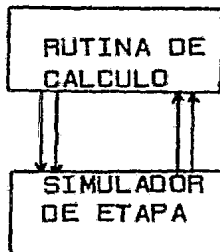
Figura [IV.17]

IV.3.- APLICACIONES AL DISEÑO DE EQUIPO.

En este capítulo se desarrollará una aplicación sencilla del modelo al diseño de equipo. La aplicación se realiza en una torre de absorción que trabaja con flujo a contracorriente e isotérmica.

Con esto se pretende establecer una base para analizar la funcionalidad del simulador y demostrar como es posible adaptarlo a aparatos o equipos industriales más complejos.

En general el procedimiento de uso será el siguiente: -- Para aplicarlo a diseño de equipo ó análisis de equipo en operación, seccionar el equipo en un conjunto de etapas de contacto, elaborar una rutina de cálculo en la cual cada etapa se maneje como un paquete ya definido de tal manera que, se pueda integrar el simulador al procedimiento de cálculo por uso repetitivo dependiendo de cuantas etapas se hayan obtenido en el seccionamiento.



Recorre al simulador cuando menos N veces. Donde N es el No. de etapas

IV.3.1.- PLANTEAMIENTO GENERAL DEL PROBLEMA.

Las torres de absorción y de desorción, son dispositivos que permiten el contacto discontinuo entre un líquido y un gas que circulan a contracorriente a lo largo de la torre. Constan de una serie de platos o etapas, en las cuales se lleva a cabo el contacto líquido-gas, separándose para entrar después a una nueva etapa. La etapa se denomina teórica ó ideal cuando el líquido y el gas que salen de ella alcanzan entre si las condiciones de equilibrio.

Se considerará en esta aplicación, el caso mas sencillo

en que la fase gaseosa contenga tan sólo un componente soluble en la fase líquida y que, en las condiciones de operación, el líquido absorbente tenga una presión de vapor muy pequeña la cual se supondrá despreciable.

El problema a resolver, al aplicarlo al diseño de equipo, es conocer el número de etapas teóricas o ideales para obtener una separación establecida previamente.

El problema se planteará de la siguiente manera:

- Se conocen los flujos molares y las concentraciones para cada componente de las corrientes de entrada a la torre.
- Se conoce la separación o transferencia requerida.
- Se requiere conocer el número de platos teóricos para alcanzar la separación requerida.

IV.3.2.- SOLUCIÓN DEL PROBLEMA.

El conocer la separación requerida del componente transferible entre las dos fases, permite conocer su concentración en una de las corrientes de salida de la torre. También, el hecho de que el líquido absorbente y el gas insoluble no se transfieran entre las dos fases, permite establecer el balance total de la torre y conocer las corrientes de salida de la misma con sus respectivas concentraciones.

Ya desarrollado el balance total, se puede analizar la torre plato por plato por medio de su balance de masa respectivo. Este análisis individual, aplicando las bases de funcionamiento del simulador, se puede iniciar por el fondo de la torre o por la parte superior de la misma. En el presente trabajo, el estudio se inicia por el fondo de la torre.

La Fig. (IV.18) ilustra la torre de platos y la nomenclatura utilizada para el balance individual etapa por etapa. El subíndice "T" representa los datos del balance total para la torre.

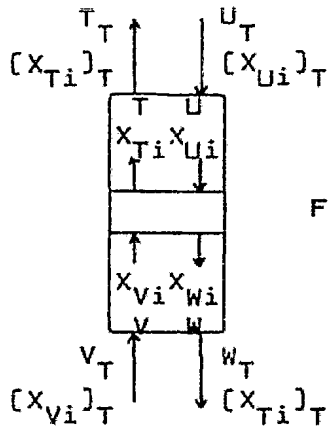


Figura [IV.18]

Para cada etapa se conocen los flujos molares de las corrientes "V" y "W" con sus respectivas concentraciones " X_{Vi} " y " X_{Wi} ". Las fracciones " X_{Wi} " están en condiciones de equilibrio con respecto a las fracciones " X_{Ti} ", esta situación permite conocer directamente las constantes de equilibrio para cada componente.

Para aplicar el balance de materia, desarrollado para el simulador, es necesario conocer las corrientes de alimentación "U" y "V" con sus respectivas concentraciones " X_{Ui} " y " X_{Vi} ", y las constantes de equilibrio " K_i " para cada componente. De estas variables se desconocen únicamente "U" y " X_{Ui} ". Al realizar el balance de materia con el simulador, se harán suposiciones de "U" y de " X_{Ui} ", verificandose los valores calculados de "W" y " X_{Wi} " con los valores conocidos para el plato analizado.

Para facilitar la solución del problema, designaremos como el componente 1 al líquido absorbente, el componente 2 representará al gas inerte y el gas soluble que se transfiere será el componente 3.

Los pasos sistemáticos para definir la torre son los siguientes:

- 1.- Balance general de la torre para conocer " W_T ", " T_T ", -

" X_{Wi} " y " X_{Ti} ".

- 2.- Definir las constantes de equilibrio " K_i " para la etapa analizada.
- 3.- Suponer un valor de " U ".
- 4.- Suponer un valor de " X_{U3} " y obtener totalmente " X_{Ui} ".
- 5.- Calcular el balance de materia aplicando el simulador.
- 6.- Si el valor de la fracción " X_{W3} " calculado es igual al valor real del plato analizado, el valor supuesto de " X_{W3} " es el correcto. Si no es así, regresar al punto 4.
- 7.- Si el valor de la corriente " W " calculada es igual al valor real para la etapa en cuestión, el valor supuesto de " U " es el correcto, en caso contrario regresar al punto 3.
- 8.- Adicionar uno al número de platos.
- 9.- Si " $(X_{T3})_T \leq X_{T3}$ " para el caso de absorción ó ----
" $(X_{T3})_T \geq X_{T3}$ " para el caso de desorción, la torre ha sido completamente definida y el problema ha sido resuelto.
- 10.- Sustituir: " $U = W$ "; " $T = V$ "; " $X_{Ui} = X_{Wi}$ "; y -----
" $X_{Ti} = X_{Vi}$ " y regresar al punto 2.

IV.3.3.- DESCRIPCION DEL PROGRAMA.

La Fig. (IV.19) ilustra el programa usado para realizar el cálculo del número de etapas en una torre de absorción de gases.

En las líneas 3 y 4 se alimentan, en proposiciones "DATA", las series de datos "AA" y "BB". Donde "AA" representa las fracciones mol en el gas para el tercer componente y "BB" las fracciones mol en el líquido, ambos en equilibrio una con respecto a la otra.

En la línea 5, se lee "CLAVE1", clave que sirve para dirigir el proceso del programa. Así "CLAVE1 = 1" se usa cuando se está calculando el número de platos en una torre de absorción y "CLAVE1 = 2" cuando se calculan para una torre de desorción.

Los datos necesarios se leen en las tarjetas 6, 7 y 8. -- Las constantes leídas son las siguientes: "U", "V", "N", --- "XU[I]", "XV[I]", "EK[I]" y "NN". Toda la nomenclatura concuerda con la utilizada para el desarrollo de los balances en el simulador. Para cualquier identificación se pueden consultar los capítulos III y IV.

Para realizar el balance total, se alimentan las relaciones de concentración de las corrientes de extracción (salida) " $XT(I)/XW(I) = EK(I)$ ". Es importante aclarar que éstas relaciones no están en equilibrio una con respecto a la otra, pero al utilizar el simulador para realizar el balance total, se requiere alimentarlas de esta forma. La constante "NN" representa el número de datos alimentados para "AA" ó "BB".

En la tarjeta 9 se llama a la subrutina "BALMAT" para regular el balance total. De la tarjeta 11 a la 26 se imprimen los resultados para el balance total.

En la tarjeta 27 se inicia el circuito para el cálculo e identificación de cada etapa. En las tarjetas 31, 32 y 33 se calculan las constantes de equilibrio para cada etapa. En la tarjeta 35 se hace la suposición inicial de "U", donde se iguala a la corriente "W" de la anterior etapa. En las tarjetas 34, 36 y 37, se definen valores usados por la subrutina "DURSS" en la tarjeta 57, subrutina que representa el método de convergencia por aproximaciones sucesivas, método que se escogió por su facilidad de funcionamiento y rapidez de convergencia. En la tarjeta 54, "RESTMA" representa la diferencia entre el valor real de la corriente de extracción líquida en equilibrio ("W1") comparada con el valor calculado ("W") para la suposición de "U". Si el valor absoluto de "RESTMA"

```

1      DIMENSION XU(3),XV(3),XF(3),EK(3),XW(3),XT(3),
      CXE(3),XH(3),XB(3),XC(3)
2      DIMENSION AA(25),BB(25)
3      DATA (AA(II),II=1,6)/1.,2.,3.,4.,5.,6./
4      DATA (BB(II),II=1,6)/1.,3.,5.,7.,8.,9./
5      READ (5,/) CLAVEL
6      READ (5,/) U,V,H
7      READ (5,/) (XU(I),I=1,N),(XV(I),I=1,N),(EK(I),I=1,N)
8      READ (5,/) NN
9      CALL BALMAT(XU,XV,XF,XW,XT,XB,XC,EK,N,U,V,F,H,HL,HL,
      CE,W,ICONT,T)
10     XT1=XT(N)
11     PRINT 29
12     29 FORMAT(1HL,10X,"CASCADA A CONTRACORRIENTE EN FUNCIO
      GNAMIENTO ISOTERMICO :",/)
13     PRINT 30
14     30 FORMAT(10X,"BALANCE TOTAL DEL SISTEMA :")
15     PRINT 31
16     31 FORMAT(10X,"CORRIENTES",9X,"( F )",6X,"( V )",6X,"( U )
      C",6X,"( W )",6X,"( T )",6X,"( H )",6X,"( E )")
17     PRINT 32,F,V,U,W,T,H,E
18     32 FORMAT(10X,"MOLES.....",9X,1PE9.3,2X,1PE9.3,2X,1PE9.3,
      C2X,1PE9.3,2X,1PE9.3,2X,1PE9.3,2X,1PE9.3)
19     DO 33 I=1,N
20     IF(I.GT.1) GO TO 34
21     PRINT 35,I,XF(I),XV(I),XU(I),XW(I),XT(I),XH(I),XE(I)
22     35 FORMAT(10X,"FRACCIONES",X,"COMP.",I2,X,F9.7,2X,F9.7,2X,
      CF9.7,2X,F9.7,2X,F9.7,2X,F9.7,2X,F9.7)
23     GO TO 33
24     34 PRINT 44,I,XF(I),XV(I),XU(I),XW(I),XT(I),XH(I),XE(I)
25     44 FORMAT(21X,"COMP.",I2,X,F9.7,2X,F9.7,2X,F9.7,2X,F9.7,
      C2X,F9.7,2X,F9.7,2X,F9.7)
26     33 CONTINUE
27     DO 7 IM=1,50
28     XU1=XU(N)
29     XW1=XW(N)
30     W1=W
31     EK(1)=0.
32     EK(2)=10000000.
33     EK(N)=(FUEL(XW1,NN,BB,AA))/XW1
34     DELTAM=W1/10.
35     U=W1
36     J2J=0;N2M=0
37     Y6Y2=0.;Y5Y2=0.;Y4Y2=0.;Y3Y2=0.;Y2Y1=0.;Y1Y2=0.
38     DO 4 IMM=1,60
39     XU(N)=XU4

```

```

40      IF(IMM.EQ.1) XU(N)=XU1
41      DELTAC=XU1+0.1
42      J1J=0;MLM=0
43      Y6Y1=0.;Y5Y1=0.;Y4Y1=0.;Y3Y1=0.;Y2Y1=0.;Y1Y1=0.
44      DO 1 IL=1,60
45      XU(N-1)=0.
46      XU(N-2)=1.-XU(N)
47      CALL BALMAT(XU,XV,XF,XW,XT,XB,XC,EK,N,U,V,F,H,
    GEL,HL,E,W,ICONT,T)
48      RESTC=XW1-XW(N)
49      IF(ABS(RESTC).LE.1.E-05) GO TO 2
50      XU2=XU(N)
51      CALL DURSS(IL,RESTC,J1J,MLM,Y6Y1,Y5Y1,Y4Y1,Y3Y1,
    CY2Y1,Y1Y1,0.,DELTAC,XU2,DSUM3)
52      XU(N)=XU2
53      1 CONTINUE
54      2 RESTMA=W1-W
55      XU4=XU(N)
56      IF(ABS(RESTMA).LE.W1*1.E-05) GO TO 3
57      CALL DURSS(IMM,RESTMA,J2J,M2M,Y6Y2,Y5Y2,Y4Y2,Y3Y2,
    CY2Y2,Y1Y2,0.,DELTAM,U,DSUMM)
58      4 CONTINUE
59      3 CONTINUE
60      PRINT 37,IM
61      37 FORMAT(/,10X,"ETAPA",X,I2)
62      PRINT 38
63      38 FORMAT(10X,"CORRIENTES",9X,"( F )",6X,"( V )",6X,
    "( U )",6X,"( W )",6X,"( T )",6X,"( H )",6X,"( E )" )
64      PRINT 39,F,V,U,W,T,H,E
65      39 FORMAT(10X,"MOLES.....",9X,1PE9.3,2X,1PE9.3,2X,1PE9.3,
    C2X,1PE9.3,2X,1PE9.3,2X,1PE9.3,2X,1PE9.3)
66      DO 40 I=1,N
67      IF(I.GT.1) GO TO 41
68      PRINT 43,I,XF(I),XV(I), XU(I),XW(I),XT(I),XH(I),XE(I)
69      43 FORMAT(10X,"FRACCIONES",X,"COMP.",I2,X,F9.7,2X,F9.7,
    C2X,F9.7,2X,F9.7,2X,F9.7,2X,F9.7,2X,F9.7)
70      GO TO 40
71      41 PRINT 42,I,XF(I),XV(I),XU(I),XW(I),XT(I),XH(I),XE(I)
72      42 FORMAT(21X,"COMP.",I2,X,F9.7,2X,F9.7,2X,F9.7,2X,F9.7,
    C2X,F9.7,2X,F9.7,2X,F9.7)
73      40 CONTINUE

```

```

74      IF(ABS(XT(N)-XT1).LE.XT1*1.E-05) GO TO 6
75      IF(CLAVEL.EQ.2.) GO TO 11
76      IF(XT(N).LE.XT1) GO TO 6
77      GO TO 12
78      11 IF(XT(N).GE.XT1) GO TO 6
79      12 CONTINUE
80      W=U
81      V=T
82      DO 5 I=1,N
83      XW(I)=XU(I)
84      5 XV(I)=XT(I)
85      7 CONTINUE
86      6 CALL EXIT
87      END

```

Figura [IV.19]

es menor o igual que "W1*.00001" el valor de "U" supuesto es el correcto, si no es así, la tarjeta 57 llama a la subrutina "OURSS", la cual calcula un nuevo valor de "U" y el proceso - regresa a la tarjeta 38.

Para cada suposición de "U" se calculan las fracciones -- "XU(I)" que originan los valores conocidos de "XW(I)" para la etapa en cuestión. En las tarjetas 39 y 40 se realiza la suposición inicial para "XU(3)", igualandose con el valor conocido para la misma fracción de la suposición de "U" anterior. - En las tarjetas 41, 42 y 43 se definen los valores usados por la subrutina "OURSS" [tarjeta 51]. En las tarjetas 45 y 46 se calculan los valores para "XU(2)" y "XU(1)" respectivamente. La tarjeta 47 llama a la subrutina "BALMAT", se realiza el balance de materia para las suposiciones y se calcula "RESTC", valor que representa la diferencia entre el valor conocido de "XW(3)" ["XW1"] y el valor calculado ["XW(N)"]. Si "RESTC" es menor o igual que 0.00001, el valor supuesto de "XW(N)" es el correcto, si no es así, "OURSS" origina un nuevo valor y el -

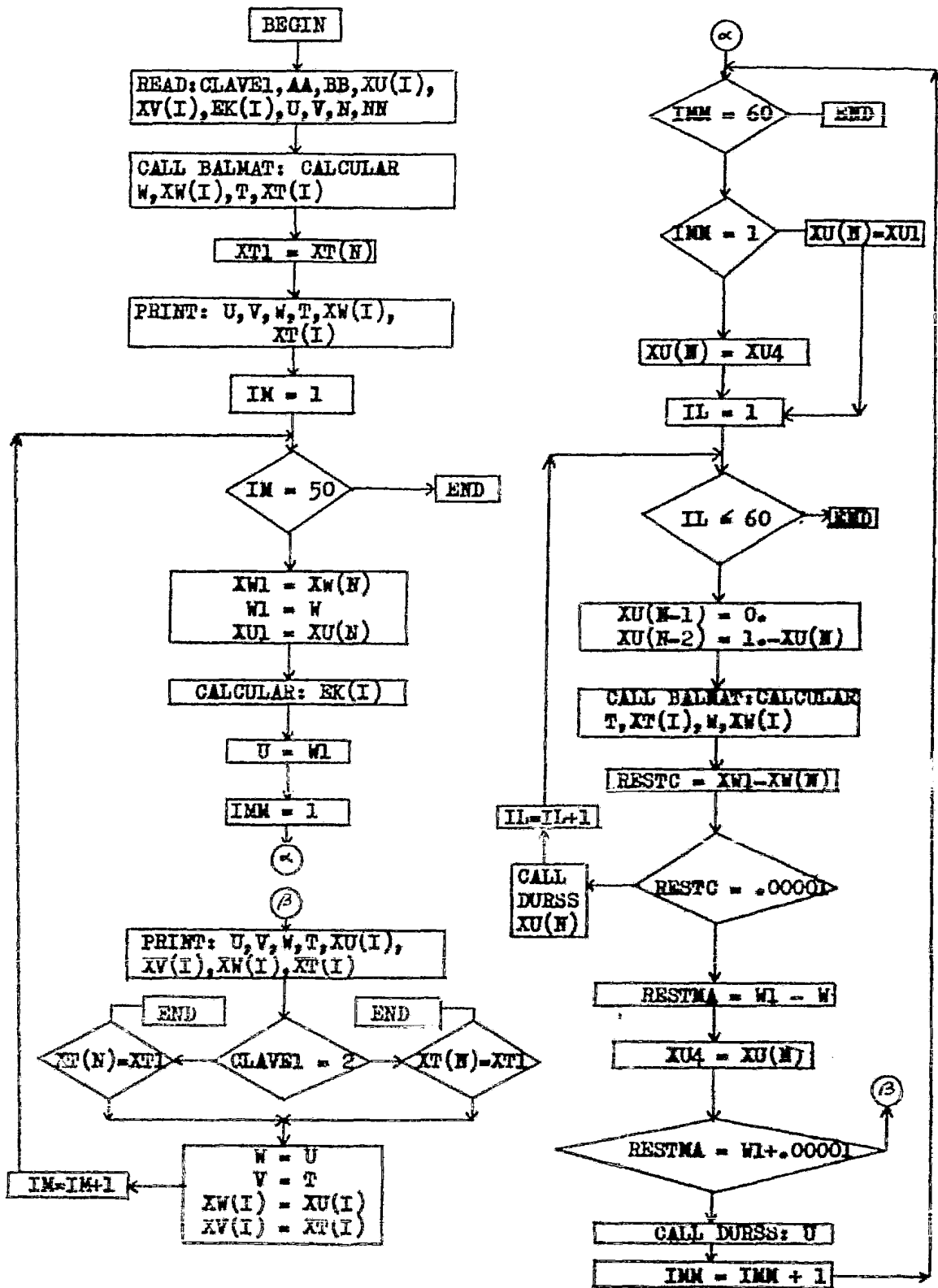


Figura [IV.20]

proceso del programa regresa a la tarjeta 44.

Ya identificada la etapa en cuestión, de la tarjeta 62 -- a la 72, se imprimen los resultados de cada una. El límite para el número de etapas de una torre de absorción se analiza - en la tarjeta 76 y para el caso de desorción en la tarjeta - 78. El valor de "XT1" representa el valor de "XT[N=3]" para - el balance total. En las tarjetas 80, 81, 83 y 84 se realiza la transferencia de datos para la siguiente etapa. El proceso del programa regresa a la tarjeta 27 para iniciar los cálcu-- los de la otra etapa.

La Fig. [IV.20] ilustra el diagrama de flujo lógico para estos cálculos.

IV.3.4.- APLICACIONES.

Problema: Ejemplo 8.2 y 8.3 del libro Operaciones Unitarias - de Transferencia de Masa de Robert F. Treybal.

Se obtiene benceno procedente de un gas carbonífero, ab-- sorbiéndolo en un aceite ligero. La solución obtenida se tra-- ta con vapor para separar el benceno. Las condiciones son las siguientes:

a).- ABSORCION: El gas carbonífero entra con un flujo molar - de 80.8 moles/hr a 800 mm hg y 80^oF. La concentración molar - del benceno es de 2%. El aceite absorbente entra a 80^oF con - una concentración molar de 0.005 para el benceno. El flujo to-- tal es de 13.49782 moles/hr. La temperatura permanece constan-- te durante el proceso. El aceite ligero y el benceno forman - soluciones ideales. Se requiere separar el 95% de benceno.

b).- DESORCION: La solución de la torre de absorción se ca-- lienta a 250^oF y entra a la torre de desorción a 1 atm de pre-- sión. El vapor entra a la presión atmosférica, sobrecalentado a 250^oF con un flujo de 5.11 moles/hr. El aceite tratado --- [0.005 fracción molar para el benceno] se enfría a 80^oF y se

regresa a la torre de absorción. La temperatura permanece --- constante durante el proceso.

Determinar el número de etapas teóricas necesarias en las dos torres para obtener las separaciones requeridas.

Solución:

TORRE DE ABSORCIÓN.- Los datos suministrados en el programa y adaptados a la nomenclatura del simulador son:

| COMPONENTES | CORRIENTES | U X_{Ui} | U X_{Ui} | K_{BT} |
|-----------------|-----------------|---------------|---------------|--------------------|
| 1 | Acete | 0.995 | 0.0 | 0.0 |
| 2 | Gas carbonífero | 0.0 | 0.98 | 1×10^{10} |
| 3 | Benceno | 0.005 | 0.02 | 0.0095667 |
| Flujo(moles/hr) | | 13.497487 | 80.8 | |
| Temperatura °F | | 80. | 80. | |

K_{BT} = Relación de concentraciones para el balance total.

De datos de presión de vapor se obtuvo la siguiente ecuación para las fracciones molares del benceno en el líquido -- "x" y en el gas "y":

$$y = 0.1248812 x$$

De esta ecuación se obtienen los siguientes datos de equilibrio necesarios para alimentarse en las proposiciones --- "DATA":

| NN | y | x |
|----|---------------|--------|
| 1 | 0.00001248812 | 0.0001 |
| 2 | 0.000999 | 0.008 |
| 3 | 0.0012488 | 0.01 |
| 4 | 0.006244 | 0.05 |
| 5 | 0.0124881 | 0.1 |
| 6 | 0.024976 | 0.2 |
| 7 | 0.0499524 | 0.4 |
| 8 | 0.0749287 | 0.6 |
| 9 | 0.087464 | 0.7 |
| 10 | 0.112393 | 0.9 |
| 11 | 0.1248812 | 1.0 |

donde "y = AA" y "x = BB".

Las tarjetas de lectura para ser alimentadas al programa son las siguientes:

1.- Se alimenta CLAVE1

1.

2.- Se alimentan U, V, N

13.497487,80.8,3

3.- Se alimentan XU[1], XU[2], XU[3], XV[1], XV[2], XV[3], --
EK[1], EK[2], EK[3]

0.995,0.,0.005,0.,0.98,0.02,0.,100000000.,.0095667

4.- Se alimenta NN

11

El resultado reportado es de 8 etapas ideales. La Figura [IV.21] ilustra los resultados obtenidos.

TORRE DE DESORCION.- La adaptación de datos se presenta a continuación:

| COMPONENTE | CORRIENTE | U X_{Ui} | V X_{Vi} | K_{BT} |
|------------------|-----------|---------------|---------------|--------------|
| 1 Aceite | | 0.8933889 | 0. | 0.0 |
| 2 Vapor | | 0.0 | 1. | $1.X10^{10}$ |
| 3 Benceno | | 0.1066109 | 0. | 46.2026 |
| Flujo (moles/hr) | | 15.0326 | 5.11 | |
| Temperatura °F | | 250.0 | 250. | |

La ecuación que relaciona las fracciones molares en equilibrio para el benceno, obtenida a partir de presiones de vapor, es la siguiente:

$$y = 3.16 x$$

Los datos necesarios para las proposiciones "DATA", obtenidos de la anterior ecuación, son los siguientes:

| NN | y [AA] | x [BB] |
|----|-----------|-----------|
| 1 | 0.000316 | 0.0001 |
| 2 | 0.00316 | 0.001 |
| 3 | 0.158 | 0.05 |

| | | |
|---|-------|-----------|
| 4 | 0.316 | 0.1 |
| 5 | 0.632 | 0.2 |
| 6 | 1.0 | 0.3164556 |

Las tarjetas de lectura son las siguientes:

1.- Se alimenta CLAVE1

2.

2.- Se alimentan U, V, N

15.0326,5.11,3

3.- Se alimentan XU[1],XU[2],XU[3],XV[1],XV[2],XV[3],EK[1],
EK[2],EK[3]

0.8933889,0.,0.1066109,0.,1.,0.,0.,10000000.,46.2026

4.- Se alimenta NN

6

El resultado reportado es de 7 etapas ideales. La Figura [IV.22] ilustra los resultados obtenidos.

CASCADA A CONTRACORRIENTE EN FUNCIONAMIENTO ISOTERMICO I

| BALANCE TOTAL DEL SISTEMA I | | (F) | (Y) | (X) | (H) | (T) | (H) | (E) |
|-----------------------------|--|---------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| CORRIENTES | | 0 | 5.115E+00 | 1.403E+01 | 1.444E+01 | 5.675E+00 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| MOLES | | 0 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| FRACCIONES | | COMP. 1 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| | | COMP. 2 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| | | COMP. 3 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| ETAPA 1 | | (F) | (Y) | (X) | (H) | (T) | (H) | (E) |
| CORRIENTES | | 0 | 5.115E+00 | 1.403E+01 | 1.444E+01 | 5.675E+00 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| MOLES | | 0 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| FRACCIONES | | COMP. 1 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| | | COMP. 2 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| | | COMP. 3 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| ETAPA 2 | | (F) | (Y) | (X) | (H) | (T) | (H) | (E) |
| CORRIENTES | | 0 | 5.192E+00 | 1.426E+01 | 1.488E+01 | 5.794E+00 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| MOLES | | 0 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| FRACCIONES | | COMP. 1 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| | | COMP. 2 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| | | COMP. 3 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| ETAPA 3 | | (F) | (Y) | (X) | (H) | (T) | (H) | (E) |
| CORRIENTES | | 0 | 5.294E+00 | 1.448E+01 | 1.544E+01 | 5.925E+00 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| MOLES | | 0 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| FRACCIONES | | COMP. 1 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| | | COMP. 2 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| | | COMP. 3 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| ETAPA 4 | | (F) | (Y) | (X) | (H) | (T) | (H) | (E) |
| CORRIENTES | | 0 | 5.423E+00 | 1.474E+01 | 1.616E+01 | 6.061E+00 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| MOLES | | 0 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| FRACCIONES | | COMP. 1 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| | | COMP. 2 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| | | COMP. 3 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| ETAPA 5 | | (F) | (Y) | (X) | (H) | (T) | (H) | (E) |
| CORRIENTES | | 0 | 5.568E+00 | 1.492E+01 | 1.699E+01 | 6.207E+00 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| MOLES | | 0 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| FRACCIONES | | COMP. 1 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| | | COMP. 2 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| | | COMP. 3 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| ETAPA 6 | | (F) | (Y) | (X) | (H) | (T) | (H) | (E) |
| CORRIENTES | | 0 | 5.687E+00 | 1.515E+01 | 1.791E+01 | 6.222E+00 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| MOLES | | 0 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| FRACCIONES | | COMP. 1 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| | | COMP. 2 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| | | COMP. 3 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| ETAPA 7 | | (F) | (Y) | (X) | (H) | (T) | (H) | (E) |
| CORRIENTES | | 0 | 5.822E+00 | 1.522E+01 | 1.915E+01 | 6.200E+00 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| MOLES | | 0 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| FRACCIONES | | COMP. 1 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| | | COMP. 2 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |
| | | COMP. 3 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 | 0.0000000 |

Figura (IV.10)

CAPITULO V

CONCLUSIONES

V.- CONCLUSIONES.

V.1.- LIMITES.- El sistema o modelo propuesto tiene los siguientes límites de aplicación:

- 1.- Límite de 17 componentes máximo y 2 mínimo para los balances isotérmicos en sistemas ideales y no ideales.
- 2.- Límite de 3 componentes máximo y 2 mínimo para los balances isotérmicos en sistemas reales.
- 3.- Límite de 6 componentes máximo y 2 mínimo para balances simultáneos de materia y energía.

V.2.- VENTAJAS.- Se pueden mencionar las siguientes ventajas para el simulador:

- 1.- Es mas eficiente para la enseñanza, ya que presenta a las Operaciones Unitarias que agrupa, como un paquete generalizado de principios y similitudes básicas de las diferentes operaciones.
- 2.- Es mas económico en tiempo. Si la simulación propuesta es un real representante del sistema, es mas fácil y rápido aplicarlo repetitivamente para diversas operaciones que establecer la solución (Balances de Materia y/o de Energía) para cada una por separado.
- 3.- Mas efectivo para el entrenamiento que conduzca a la definición de los problemas en operaciones que abarquen ese agrupamiento.
- 4.- Al incluir la simulación en un programa de computadora, adicionalmente mencionaremos la exactitud y rapidez de cálculo.

V.3.- RESULTADOS.- La figura (V.1) ilustra la tabla comparativa de resultados obtenidos y resultados reportados en la bibliografía para los diversos problemas estudiados. La poca diferencia existente, se justifica en el hecho de que algunos de los problemas propuestos en la bibliografía se resuelven gráficamente, también el manejo de datos de equilibrio y

la interpolación lineal entre estos, hechos por la subrutina FUN1, nos conducen a una ligera diferencia entre los resultados comparados.

El análisis de la tabla comparativa de resultados nos demuestra que el modelo físico propuesto, es un real representante de las Operaciones Unitarias que caen dentro del campo de acción del mismo. Los modelos matemáticos desarrollados, y principalmente, el concepto termodinámico de equilibrio físico introducido, se adaptan perfectamente a todos los balances de materia y energía realizados en las diversas operaciones. Por todo lo anterior, podemos concluir que los modelos matemáticos desarrollados, cumplen satisfactoriamente el objetivo inicial propuesto de este trabajo.

Las aplicaciones del modelo desarrollado pueden proyectarse ampliamente hacia aparatos industriales mas complejos. En el presente trabajo, se realizó una aplicación sencilla del simulador al diseño de equipo. La aplicación se hizo en una torre de absorción, demostrando la comparación de resultados al haber obtenido resultados satisfactorios. Con esto, se establecieron las bases de adaptación del simulador al diseñar aparatos en serie mas complicados.

Las aplicaciones del simulador al diseño de equipo quedan como un tema abierto. El funcionamiento para una sola etapa en equilibrio, representados por el modelo físico y los modelos matemáticos desarrollados, sirven de base para el posible desarrollo de este tema. /

Prob. RESULTADOS REPORTADOS
 EN LA BIBLIOGRAFIA

RESULTADOS OBTENIDOS
POR EL SIMULADOR

| | Comp. | X_{Wi} | X_{Ti} | X_{Wi} | X_{Ti} |
|---|-------|------------|-------------|-------------|----------|
| 1 | 1 | .00081 | .00583 | .0008096 | .0058270 |
| | 2 | .00650 | .00835 | .0065005 | .0083506 |
| | 3 | .4234 | .9617 | .4233835 | .9616625 |
| | 4 | .0624 | .0218 | .0624401 | .0218140 |
| | 5 | .0145 | .00182 | .0145162 | .0018220 |
| | 6 | .0017 | .000072 | .0017018 | .0000721 |
| | 7 | .00417 | .000130 | .0041985 | .0001309 |
| | 8 | .00780 | .000097 | .0078893 | .0000971 |
| | 9 | .00620 | .000056 | .0062085 | .0000561 |
| | 10 | .0181 | .000057 | .0181369 | .0000571 |
| | 11 | .1070 | .000074 | .1070838 | .0000741 |
| | 12 | .2374 | .000030 | .2375179 | .0000300 |
| | 13 | .0914 | .000006 | .0914684 | .0000060 |
| | 14 | .0138 | .00000038 | .0137782 | .0000004 |
| | 15 | .00475 | .000000046 | .0043670 | .0000000 |
| | | | W = 103.037 | | |
| | | | T = 896.963 | | |
| 2 | 1 | | | .0088168 | .4496546 |
| | 2 | | | .0167302 | .2174929 |
| | 3 | | | .0710472 | .2202462 |
| | 4 | | | .0949231 | .0806847 |
| | 5 | | | .1227755 | .0319216 |
| | 6 | | | .6857072 | .0000000 |
| | | | W = 149.732 | | |
| | | | T = 60.6685 | | |
| 3 | 1 | 1.000 | .05606947 | 1.0000000 | .0558161 |
| | 2 | 0.000 | .94393053 | 0.0000001 | .9441839 |
| | | W = 4.17 | | W = 4.19843 | |
| | | T = 105.94 | | T = 105.912 | |
| 4 | 1 | .094202 | .011536 | .0953066 | .0116738 |
| | 2 | .00000 | .988462 | .0000001 | .9883262 |
| | 3 | .905798 | .000000 | .9046934 | .0000000 |
| | | | W = .884277 | | |
| | | | T = 10000.1 | | |
| 5 | 1 | .48843 | .245 | .4884375 | .2449993 |
| | 2 | .51156 | .755 | .5115625 | .7550008 |
| | | W = 522. | | W = 522.31 | |
| | | T = 1418. | | T = 1407.68 | |

| | | | | | |
|----|---|---------------------|--------|-----------------------|----------|
| 6 | 1 | .14176 | .23044 | .1425851 | .2327195 |
| | 2 | .85824 | .00000 | .8574137 | .0000000 |
| | 3 | .00000 | .76956 | .0000008 | .7672831 |
| | | W = 3195.65 | | W = 3239.72 | |
| | | T = 586.54 | | T = 542.461 | |
| 7 | 1 | .113 | .280 | .1117299 | .2798335 |
| | 2 | | | .0551501 | .5849285 |
| | 3 | | | .8331210 | .1352371 |
| | | W = 71.9 | | W = 71.2360 | |
| | | T = 78.1 | | T = 78.7640 | |
| 8 | 1 | | | .1220634 | .3477993 |
| | 2 | .228 | .653 | .2287999 | .6522011 |
| | 3 | | | .6491633 | .0000000 |
| | | W = 924. | | W = 924.305 | |
| | | T = 826. | | T = 825.695 | |
| 9 | 1 | .1091 | .1332 | .1091312 | .1328709 |
| | 2 | .8909 | .0000 | .8908680 | .0000000 |
| | 3 | .0000 | .8668 | .0000009 | .8671290 |
| | | W = 2.245 | | W = 2.24508 | |
| | | T = 0.865 | | T = .864921 | |
| | | Temp. Equi. = 108.5 | | Temp. Equi. = 108.377 | |
| 10 | 1 | 1.0000 | .03009 | .9999993 | .0302824 |
| | 2 | 0.0000 | .96991 | .0000010 | .9697173 |
| | | W = 483000. | | W = 482985. | |
| | | T = 612717 | | T = 612732. | |
| | | Temp. Equi. = 90. | | Temp. Equi. = 90.1881 | |
| 11 | 1 | | | .0017301 | .0374000 |
| | 2 | | | .0159972 | .0998705 |
| | 3 | | | .0875919 | .2431552 |
| | 4 | | | .3668974 | .4037094 |
| | 5 | | | .3901829 | .1849467 |
| | 6 | | | .1376002 | .0309188 |
| | | W = 1.49 | | W = 1.50241 | |
| | | T = 0.83 | | T = 0.825587 | |
| | | Temp. Equi. = 185. | | Temp. Equi. = 184.667 | |

Figura [V.1]

BIBLIOGRAFIA.

- 1.- Perry J. H.
Manual del Ingeniero Químico.
UTHEA México.
1974
- 2.- Mc. Cabe L. W. y Smith C. J.
Operaciones básicas de Ingeniería Química.
Volumen II
Reverte S. A.
1978
- 3.- Ocon G. J. y Tojo B. G.
Problemas de Ingeniería Química.
Tomos I y II
España 1ª Edición
Aguilar S.A.
1972
- 4.- Treybel E. R.
Mass-Transfer Operations
Tokyo Second Edition
Mc Graw-Hill
1968
- 5.- Henley E.J. and Rosen E.M.
Material and Energy Balance Computation.
Wiley, New York
1969
- 6.- Fouct S.A.
Principios de Operaciones Unitarias.
Editorial Continental S. A., México
1980
- 7.- Mc. Cracken D. D.
Programación FORTRAN IV
LIMUSA S.A., México
1975
- 8.- King C. Judson
Separation Processes
Mc. Graw-Hill, N.Y.
1971
- 9.- Franks E. Roger G.
Modeling and Simulation in Chemical Engineering
Wiley, N. Y.
1972