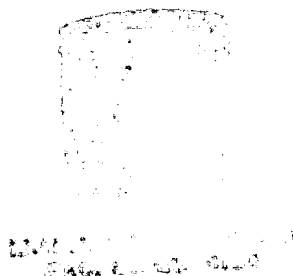




# Universidad Nacional Autónoma de México

FACULTAD DE QUIMICA

**ANALISIS DE EXTRACCION LIQUIDO - LIQUIDO  
MEDIANTE TECNICAS DE AJUSTE Y METODOS  
NUMERICOS.**



**T E S I S**

**INGENIERO QUIMICO**

**JOSE LUIS RODRIGUEZ MILLER**

1983



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**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.

## INDICE.

### Introducción.

1. GENERALIDADES DE EXTRACCION LIQUIDO-LIQUIDO.
  - 1.1 Equilibrio físico.
  - 1.2 Diagramas de equilibrio físico.
  - 1.3 Ley de partición o de reparto.
  - 1.4 Equipo para extracción líquido-líquido.
  - 1.5 Tipos de equipos y formas de operación:
2. BALANCE DE MATERIA Y ENERGIA EN EXTRACTORES.
  - 2.1 Formulación de los modelos matemáticos.
  - 2.2 Análisis del modelo matemático e identificación de los tipos de ecuaciones.
3. MODELOS MATEMATICOS PARA LA REPRESENTACION DE DATOS DE EQUILIBRIO.
  - 3.1 Tratamientos de datos de equilibrio.
  - 3.2 Modelo matemático. (Estimación de parámetros).
  - 3.3 Comparación de técnicas.
  - 3.4 Cálculo de un extractor.
4. CONCLUSIONES.

### APENDICES.

### BIBLIOGRAFIA.

## INTRODUCCION

Debido a que la extracción líquido-líquido es una operación industrial importante, y el uso de la computadora, como herramienta del ingeniero químico, es cada día mas necesaria tanto para el diseño como en el control y operación del proceso, el objetivo de este trabajo (tesis) es el de aplicar uno de los métodos numéricos y de ajuste que resuelva cualquier problema de esta operación unitaria dando resultados mas confiables por medio de un programa de computadora, así como de proponer un método que compita con los tradicionales de cálculo.

### 1. GENERALIDADES DE EXTRACCION LIQUIDO-LIQUIDO.

La extracción líquido-líquido es una operación unitaria de separación de uno o mas componentes de una solución líquida por medio de un disolvente líquido, el cual es insoluble en el diluyente de la mezcla a separar. Esta operación se utiliza principalmente cuando no es posible realizar la separación por medio de una destilación, ya sea por la cercanía de los puntos de ebullición de los componentes o porque la solución sea sensible al aumento de temperatura y llegue a descomponerse, o bien, porque sea mas económico en las condiciones del proceso en comparación con otros medios de separación.

### 1.1 Equilibrio físico.

En el caso de extracción líquido-líquido - siempre se tendrá un sistema multicomponente, siendo el - mas común el sistema ternario. Aplicando las reglas de -- las fases, la cual establece que

$$F = C - P + 2$$

donde: F es el número de grados de libertad,

C es el número de componentes y

P es el número de fases en equilibrio,

a un sistema ternario de una fase líquida en equilibrio - se obtiene lo siguiente:

$$C = 3, P = 1$$

$$F = 3 - 1 + 2$$

$$F = 4$$

Esto implica que fijando cuatro variables intensivas, el sistema queda totalmente definido. (Por -- ejemplo: la presión, la temperatura y dos composiciones).

### 1.2 Diagramas de equilibrio físico.

La representación gráfica de un sistema -- ternario normalmente se hace por medio de diagramas trian-- gulares; por sus ventajas geométricas se prefieren los -- triángulos rectángulos y los equiláteros, en donde cada - lado representa la composición de los componentes del sis-- tema.

La figura 1.1 muestra la representación --  
gráfica de un sistema ternario. Este representación es a  
una presión y temperatura determinadas, si se varía la --  
presión o la temperatura, la curva tendrá otra forma.

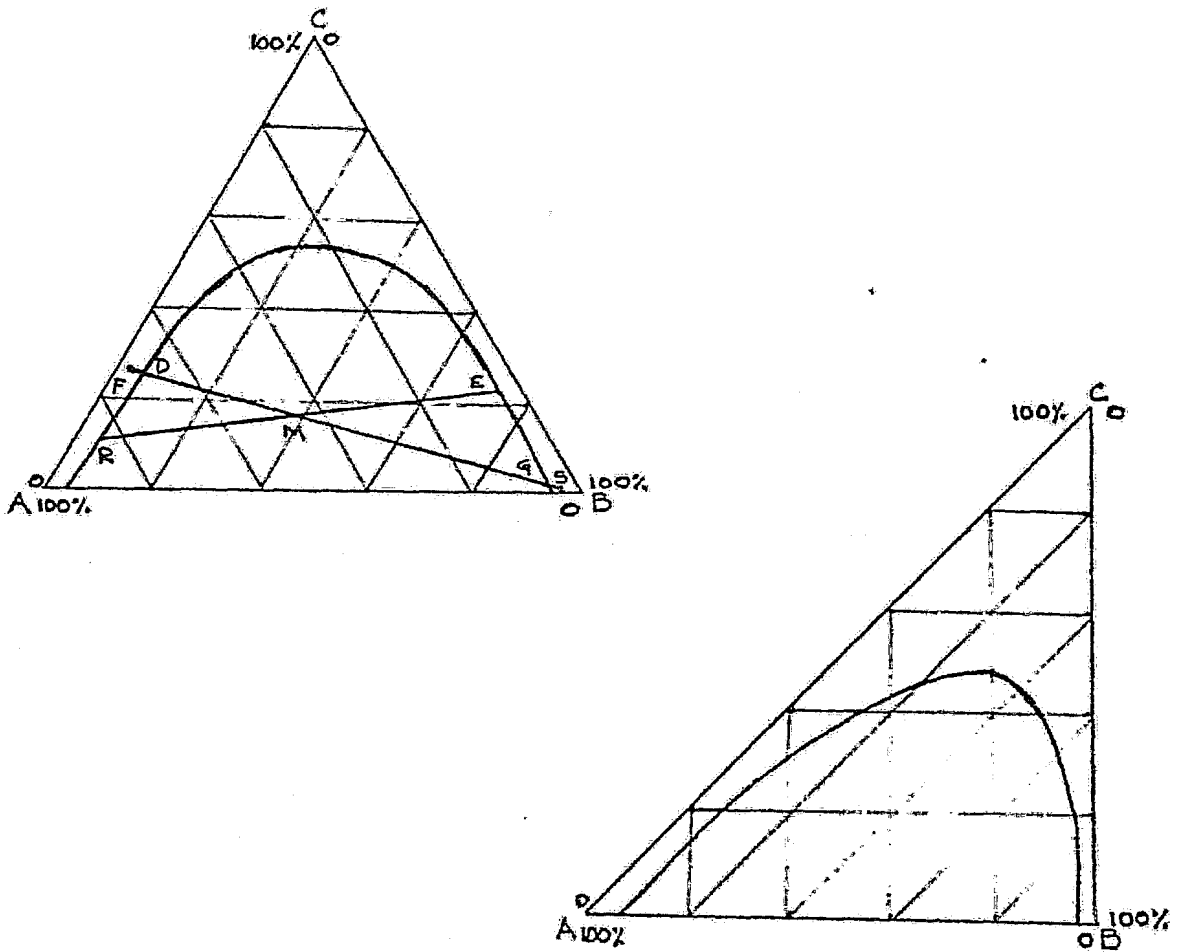


FIG. 1.1

Existen cuatro tipos de sistemas ternarios.

Tipo 1. Los que forman un par de líquidos parcialmente miscibles.

Tipo 2. Los que forman dos pares de líquidos parcialmente miscibles.

Tipo 3. Los que forman tres pares de líquidos parcialmente miscibles.

Tipo 4. Los que forman fases sólidas.

1.2.1 Tipo 1. Este sistema se presenta mas frecuentemente. De acuerdo a la figura 1.2 los componentes líquidos A y C son miscibles en todas proporciones, - similarmente ocurre con los componentes B y C. Sin embargo, los componentes A y B son parcialmente miscibles y -- los puntos D y E representa una solución saturada del componente B en el componente A y una solución saturada de A en B respectivamente, los cuales son puntos limitantes para la existencia de dos fases del sistema binario A-B.

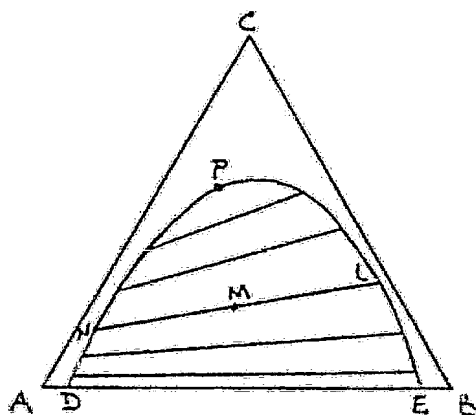


FIG. 1.2

Todas las mezclas representadas por los -- puntos fuera de la curva DNPLE son soluciones de una fase líquida simple homogénea, mientras que las mezclas del interior del área limitada por la curva y la línea D-E forman dos fases líquidas insolubles. La curva DNPLE representa los puntos de cada fase en donde la solución está saturada y recibe el nombre de curva binodal o curva de solubilidad.

Una mezcla de composición M formará dos soluciones líquidas inmiscibles de composiciones L y N, el punto M se encuentra sobre la línea de unión o de reparto la cual determina la composición de las dos fases que se forman. El área de heterogeneidad está totalmente llena de líneas de retardo (o de unión) imaginarias, de las cuales se muestran solamente unas cuantas en la figura 1.2.- Estas líneas no son paralelas y de ordinario cambian de pendiente lentamente en una dirección al cambiar la concentración, sin embargo, son bastante comunes los casos en que hay una inversión de la pendiente y estos sistemas han sido llamados "solutrópicos", como por ejemplo el sistema benceno-piridina-agua.

En el caso del sistema de la figura 1.2 es evidente que, cuando se añade el componente C a una mezcla líquida heterogénea de A y B, se distribuye desigualmente entre las dos capas conjugadas con mayor concentra-



ción de las soluciones ricas en B; a medida que se agrega mas componente C a una de estas mezclas aumenta la solubilidad mutua entre A y B. El punto P (punto de pliegue) es en donde se juntan las dos ramas de la curva de solubilidad, y no siempre es el punto máximo con respecto a C en la curva. Al punto P se le llama también punto de condición crítica.

1.2.2 Tipo 2. Este caso se representa en la figura 1.3. Se observa que los pares de líquidos A y B son parcialmente miscibles lo mismo que los pares B y C, y el componente A es miscible en todas proporciones con C. Un sistema ternario que presenta este comportamiento es: A-n heptano; B-anilina y C-metilciclohexano.

Este tipo puede obtenerse por una variación en la temperatura de un sistema del tipo 1. Al disminuir la temperatura, la inmiscibilidad aumenta en uno o en dos de los pares de componentes, como lo muestran las secuencias de las figuras 1.4 y 1.5.

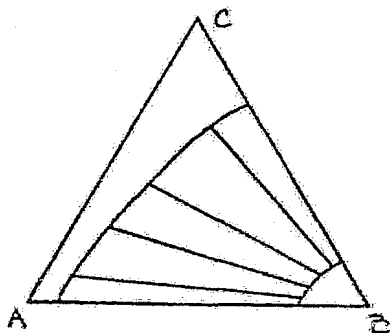
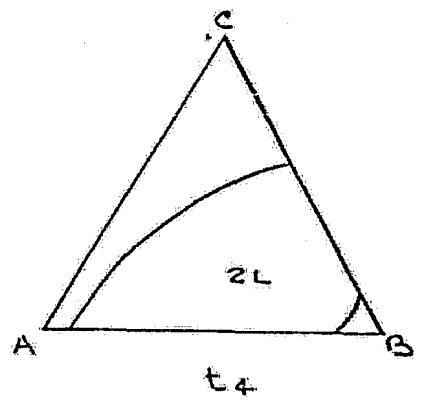
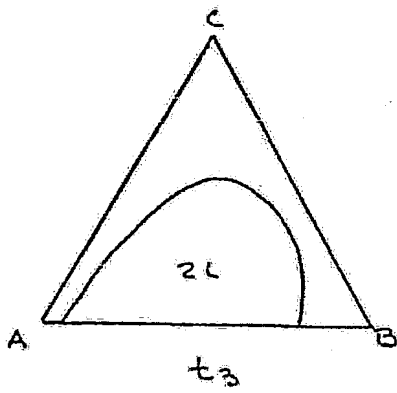
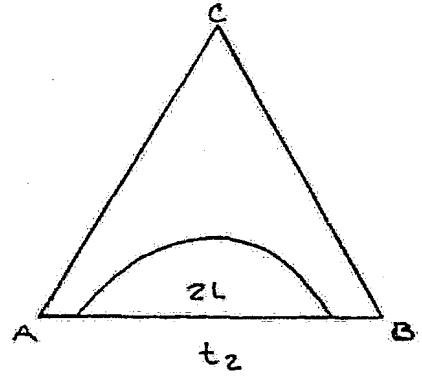
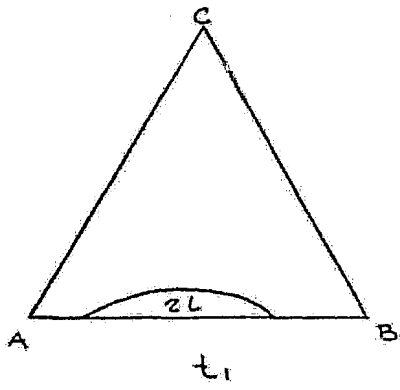
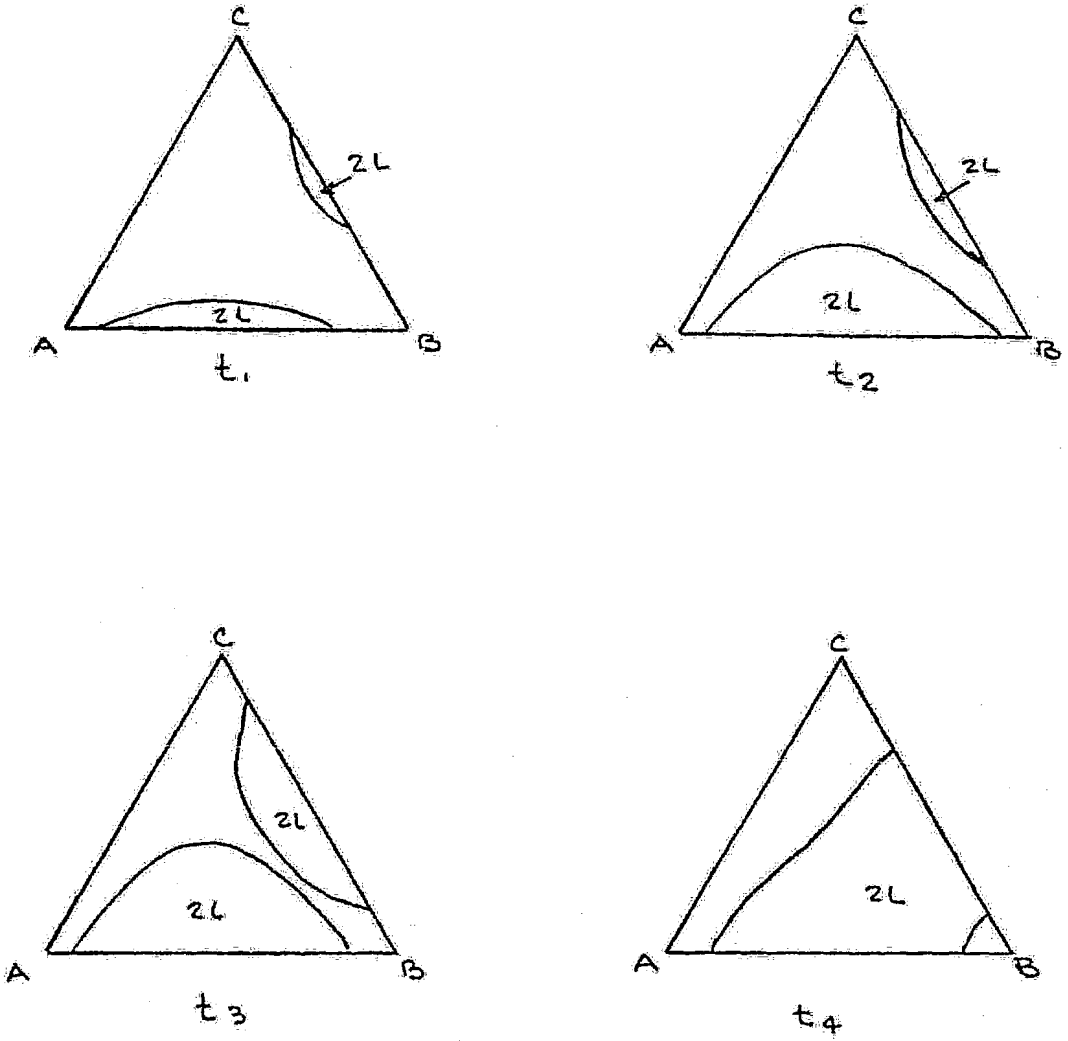


FIG. 1.3



$$t_1 > t_2 > t_3 > t_4$$

FIG. 1.4



$$t_1 > t_2 > t_3 > t_4$$

FIG. 1.5

1.2.3 Tipo 3. Estos sistemas son muy complejos y difíciles de manejar. Un ejemplo del mismo es -- ilustrado en la figura 1.6 en donde A es etilén glicol, B es alcohol laurílico y C es nitrometano.

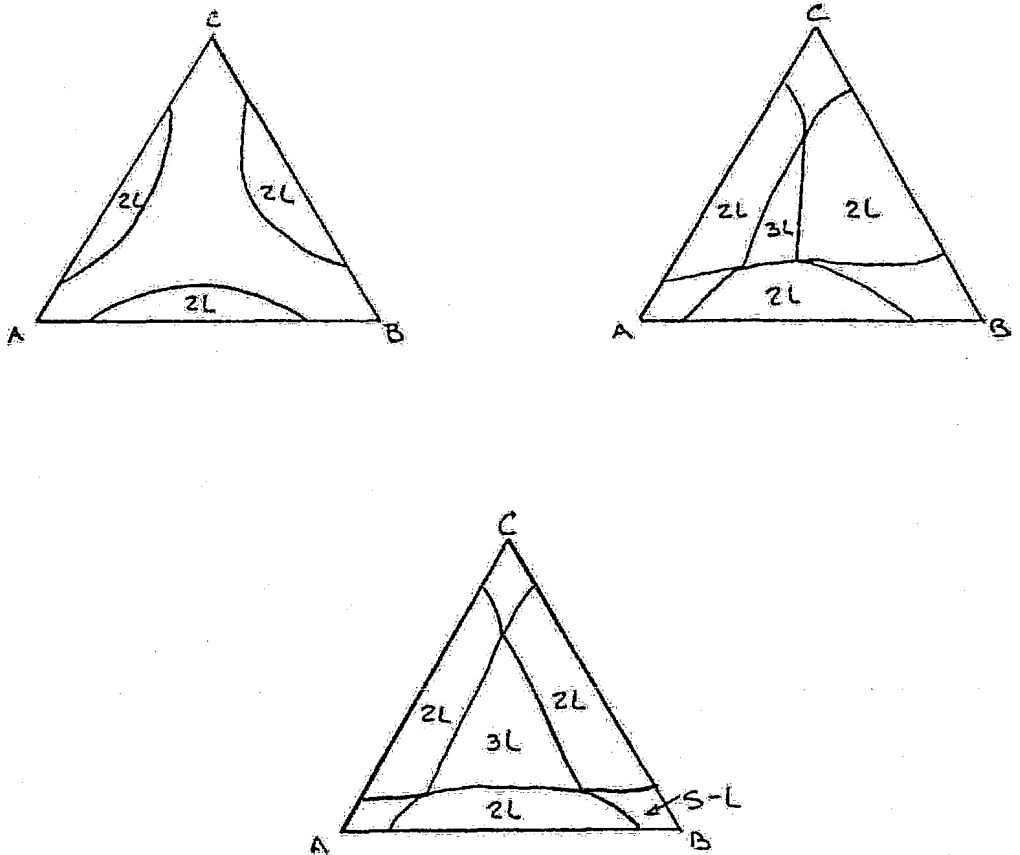


FIG. 1.6

Este sistema a  $29^{\circ}\text{C}$  presenta tres zonas de inmiscibilidad separadas de dos líquidos en equilibrio y una pequeña región de un líquido en equilibrio. A  $28^{\circ}\text{C}$  -- las regiones de solubilidad incompleta han aumentado y -- aparece una pequeña región de tres líquidos en equilibrio en la zona central del triángulo. Bajando la temperatura a  $22^{\circ}\text{C}$  la zona central de inmiscibilidad completa ha aumentado y como la temperatura está por debajo del punto de fusión del alcohol laurílico, se forma un área de equilibrio sólido-líquido.

1.2.4. Tipo 4. Estos sistemas son muy complejos en lo que se refiere al número de fases en equilibrio existentes. En el proceso de extracción líquido-líquido, algunos de los sistemas mas simples llegan a tener interés, como por ejemplo la extracción de un disolvente orgánico que tenga algún sólido orgánico disuelto, que -- por el proceso de separación de éste disolvente la solución llegara a sobresaturarse al grado de que el sólido -- comience a formarse en una fase y presipite tapando los -- conductos por donde fluye la fase líquida.

La figura 1.7 representa un tipo que ocurre frecuentemente. A una temperatura  $t_1$  los componentes A y B son líquidos parcialmente solubles y el componente C es sólido. La solubilidad de C en el componente A puro

y en el B puro están representadas por los puntos D y E - respectivamente, y la solubilidad se modifica cuando los líquidos A y B están presentes como lo muestra la curva DGE. Una mezcla ternaria de composición F forma una solución saturada de composición G y están presentes cristales del sólido C. La zona de equilibrio de dos líquidos - limitada por la curva JPH es similar a la presentada para sistemas del tipo 1. En este caso existe una zona de una fase líquida en equilibrio que separa a las dos áreas de heterogeneidad. A una temperatura inferior  $t_2$  disminuyen las solubilidades mutuas y las regiones de inmiscibilidad aumentan y llegan a unirse. Si se baja aún más la temperatura a una  $t_3$ , la curva binodal de líquido es interrumpida por la curva de solubilidad de sólido. Todas las mezclas ternarias que se encuentran dentro del triángulo CKL forman una fase en equilibrio y los puntos K y L representan soluciones líquidas saturadas de B en A y de A en B - respectivamente. Un ejemplo de este comportamiento es el sistema A-anilina; B-isooctano y C-naftaleno.

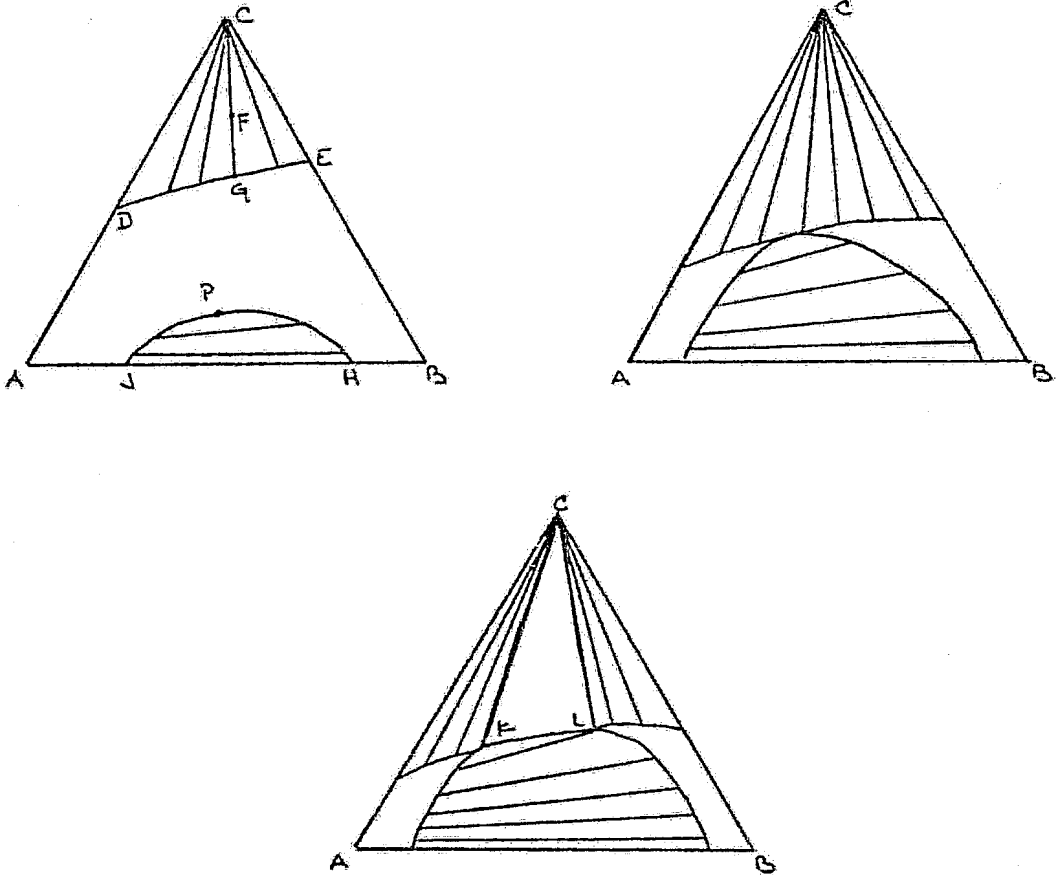


FIG. 1.7

### 1.3 Ley de partición o de reparto.

Si logramos obtener un sistema ternario de dos fases, éstas pueden ser separadas por un proceso de extracción líquido-líquido para recuperar, ya sea un soluto o el disolvente, y es importante entonces conocer en que razón se reparten entre las dos fases.

Cuando dos líquidos son parcialmente miscibles es evidente que el comportamiento de uno con respec-

to al otro y viceversa dista mucho de ser ideal. Sin embargo, el tercer componente soluble en ambos puede comportarse idealmente si se encuentra suficientemente diluido en las dos fases. En estas condiciones puede aplicarse la ley de partición o de reparto.

En el equilibrio, el potencial químico  $\mu$  de la especie  $i$  deberá ser igual en las dos fases  $\alpha$  y  $\beta$ , esto es

$$\mu_i^\alpha = \mu_i^\beta \quad \dots(1.1)$$

Por otro lado, en cada una de las fases

$$\mu_i = \mu_i^* + RT \ln x_i \quad \dots(1.2)$$

siendo  $x_i$  la fracción molar del soluto y  $\mu_i^*$  el valor del potencial químico  $\mu$  cuando  $x_i = 1$ .

Aplicando la ecuación (1.2) a las dos fases, de acuerdo a la ecuación (1.1), resultará

$$\mu_i^{\alpha*} + RT \ln x_i^\alpha = \mu_i^{\beta*} + RT \ln x_i^\beta \quad \dots(1.3)$$

$$RT \ln x_i^\alpha - RT \ln x_i^\beta = \mu_i^{\beta*} - \mu_i^{\alpha*}$$

$$RT (\ln x_i^\alpha - \ln x_i^\beta) = \mu_i^{\beta*} - \mu_i^{\alpha*}$$

$$RT \left[ \ln \frac{x_i^\alpha}{x_i^\beta} \right] = \mu_i^{\beta*} - \mu_i^{\alpha*}$$

$$\ln \frac{x_i^\alpha}{x_i^\beta} = \frac{\mu_i^{\beta*} - \mu_i^{\alpha*}}{RT} \quad \dots(1.4)$$



El enunciado de la ley de partición o de reparto se puede deducir a partir de la ecuación (1.4).

"A una temperatura constante, la razón entre las concentraciones molares en las dos fases es constante".

Esta ley de partición o de reparto solo es aplicable en el caso de soluciones diluidas.

Los procesos de extracción líquido-líquido se utilizan cada vez mas porque la constancia del coeficiente de reparto no es imprescindible en tanto que sus variaciones no sean demasiado grandes. Desde el punto de vista práctico se desea que el coeficiente de reparto tenga un valor elevado y que los disolventes sean de fácil recuperación, además de que los disolventes empleados deban tener la capacidad de alcanzar el equilibrio en un tiempo corto.

#### 1.4 Equipo para extracción líquido-líquido.

El equipo utilizado para esta operación unitaria depende de la forma de la operación y del proceso. Se utilizan torres de platos o empacadas, tanques con o sin agitador, dependiendo de la facilidad de separación del soluto de la solución y con las boquillas para entradas y salidas necesarias. En todas las formas de opera---

ción y dependiendo del proceso pueden usarse en regímenes continuos o por lotes.

En la figura 1.8 se muestran los tanques - usados para la separación con y sin agitador. Cada tanque constituye una etapa de operación.

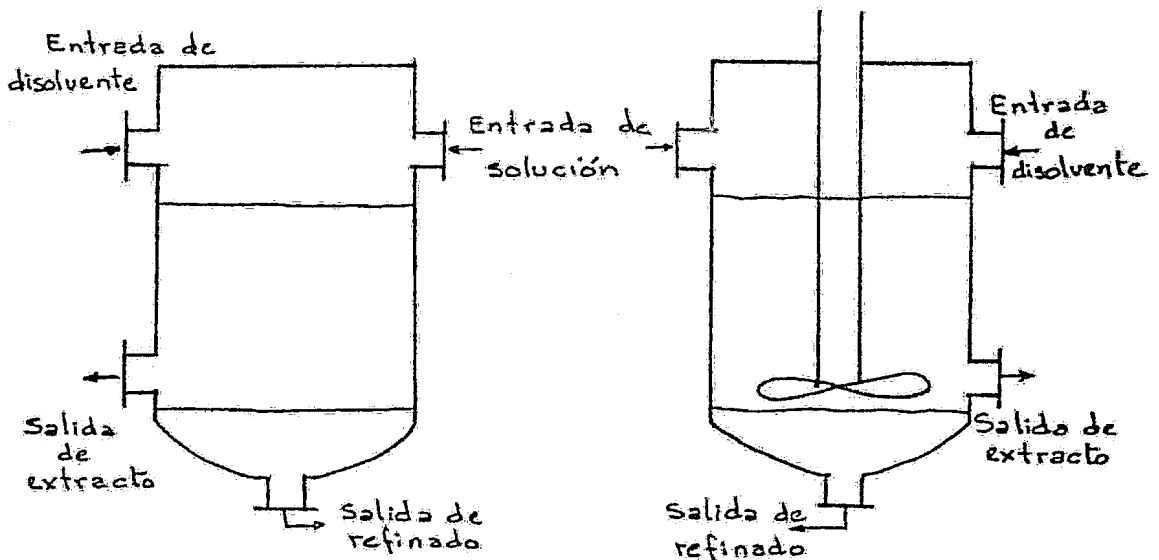


FIG. 1.8

La figura 1.9 muestra una torre de platos y una torre empacada en donde se muestra la entrada de solución con el componente a separar, la entrada del diluyente que servirá de extractor, la salida de la solución rica en el componente extraído y la del disolvente que originalmente contenía al soluto separado.

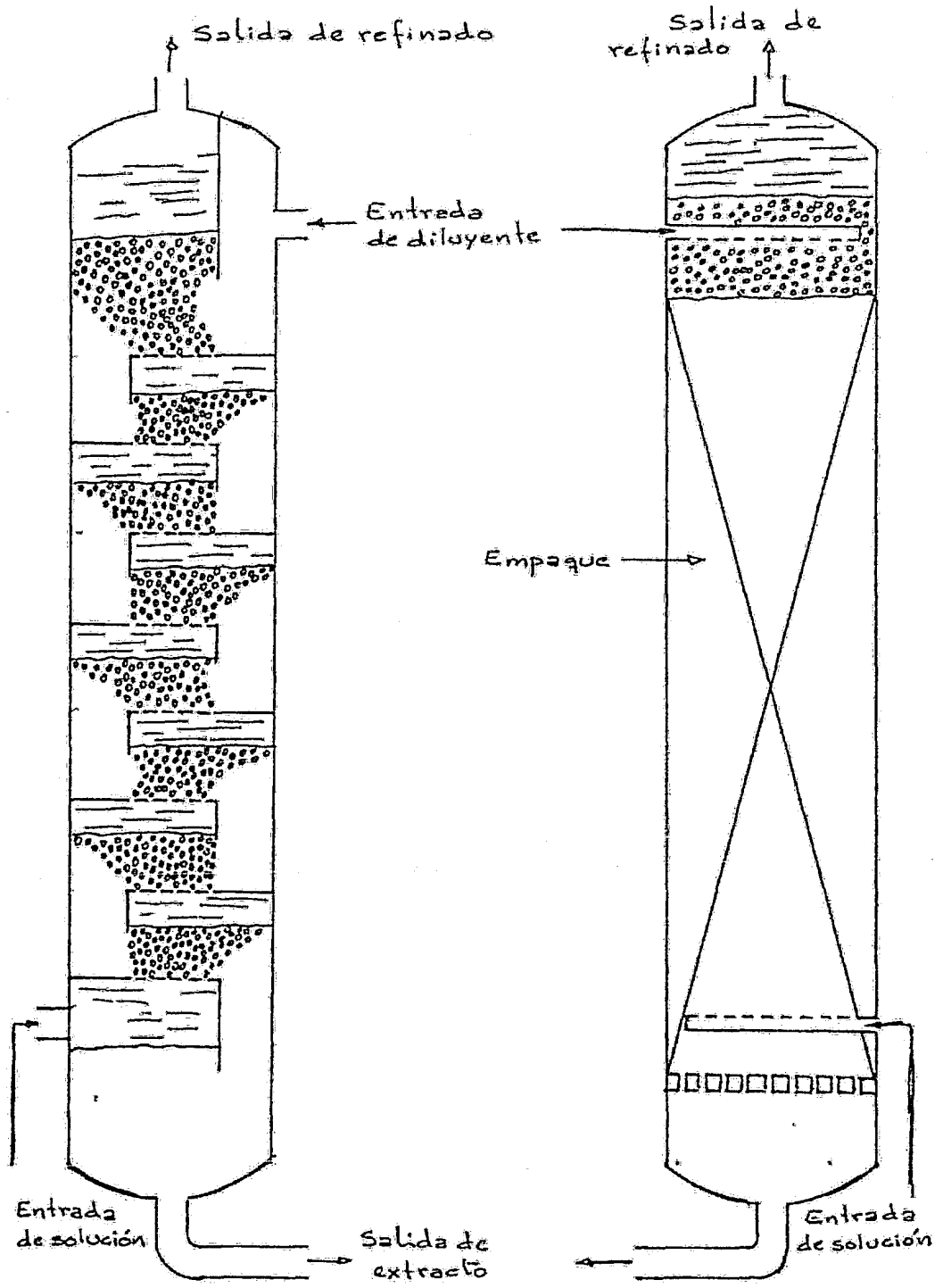


FIG. 1.9

## 1.5 Tipos de equipo y formas de operación.

### a). Contacto único.

Es cuando la operación se lleva a cabo en una sola etapa, en que la solución que ha de dividirse en sus componentes y el disolvente de extracción se ponen en contacto una sola vez y se separan las fases de extracto y refinado. El equipo para este tipo de operación puede verse en la figura 1.8. Es un tanque en que se alimentan por la parte superior la solución y el disolvente. Para tener una mayor eficiencia en la separación, el tanque puede estar provisto de un agitador con el objeto de que proporcione un mayor contacto entre ambos líquidos.

Si la fase refinada es menos densa que la fase extraída, ésta saldrá por la parte lateral del tanque y si es mas densa saldrá por el fondo.

Esta operación puede llevarse a cabo en régimen continuo o por lotes.

### b). Contacto múltiple en corriente transversal.

En este tipo de operación, el refinado de cada etapa se pone en contacto con disolvente de extracción nuevo, esto es, el refinado que sale de la primera etapa pasa a la segunda y ahí se pone en contacto con disolvente puro de donde se produce otro refinado que pasa

a la siguiente etapa y se repite el proceso sucesivamente.

Para este tipo de operación se utiliza una torre de platos con alimentación de disolvente y salida de extracto en cada plato, como puede observarse en la figura 1.10.

La cantidad de disolvente para cada etapa varía en forma proporcional a la concentración del componente o de los componentes por extraer.

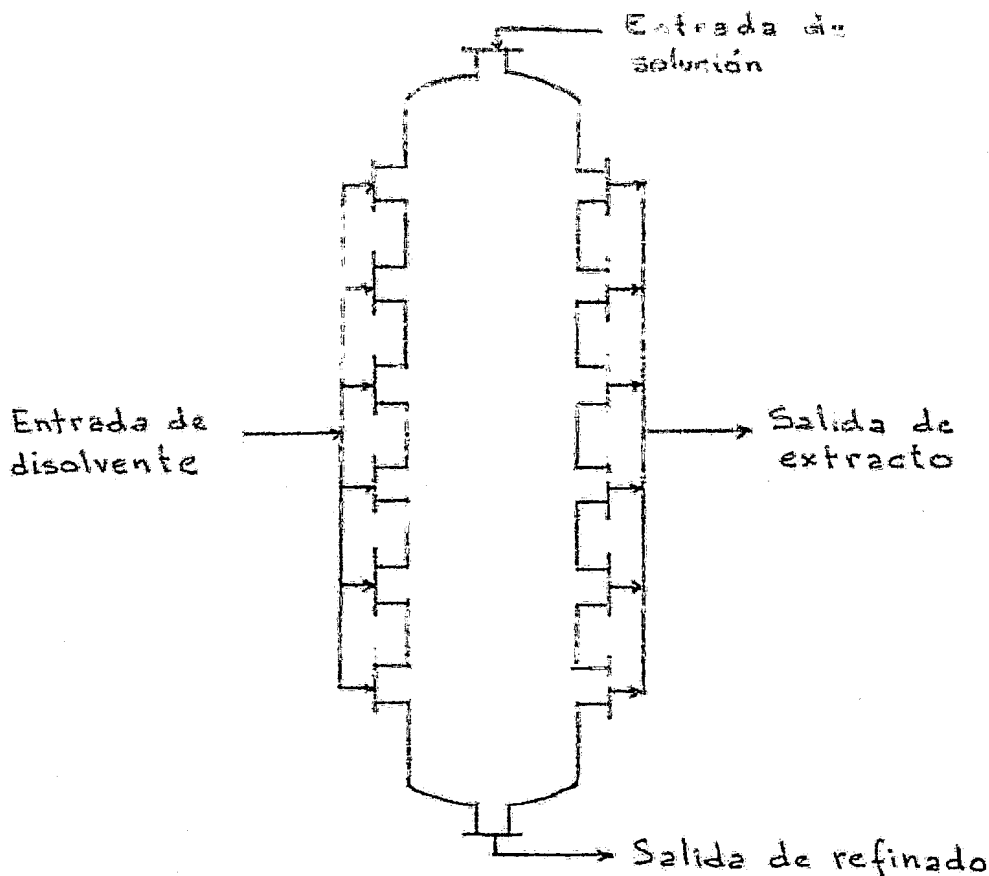


FIG. 1.10

Este tipo de equipo casi no se usa por ser muy complejo además de no ser económico, ya que los costos de inversión y de operación son elevados debido a la gran cantidad de tubería necesaria y a lo sofisticado del equipo.

c). Contacto múltiple a contracorriente.

Este tipo de operación es el más usado, no solamente para la extracción líquido-líquido, sino también para otras operaciones unitarias como destilación, adsorción, desorción, etc. Consta de una torre de platos o empacada en donde la alimentación del disolvente y la de la solución se encuentran en los extremos opuestos de la torre. Las fases extracto y refinado fluyen en direcciones contrarias y también salen por los extremos opuestos, como lo muestra la figura 1.9.

Pueden estar las alimentaciones por la parte superior y las salidas por la parte inferior de la torre.

d). Extracción diferencial.

La extracción diferencial se utiliza principalmente a nivel de laboratorio y, al igual que la destilación diferencial, se comporta como una etapa ideal, si es que el tanque se encuentra perfectamente agitado para mantener la mezcla en equilibrio. Este tipo de extracción opera como sigue:

En un tanque perfectamente agitado, como - en el mostrado en la figura 1.11, se encuentra una cantidad de solución con el soluto que ha de extraerse, se alimenta el disolvente por el fondo del tanque, si es que és ta fase es de menor densidad que la solución que se en-ue encuentra en el tanque, o por la parte superior si es de ma yor densidad. Si la solución inicial no está saturada, es to quiere decir que el punto de representa esa condición en el diagrama de fases se encuentra situado por encima - de la curva binodal, las primeras cantidades de disolven- te agregado se irán disolviendo hasta saturar a la solu- ción de este componente. La siguiente gota de disolvente que entra a la solución formará una capa de extracto en - la superficie del líquido o en el fondo, dependiendo de - la diferencia de densidades y será extraída del tanque in mediatamente.

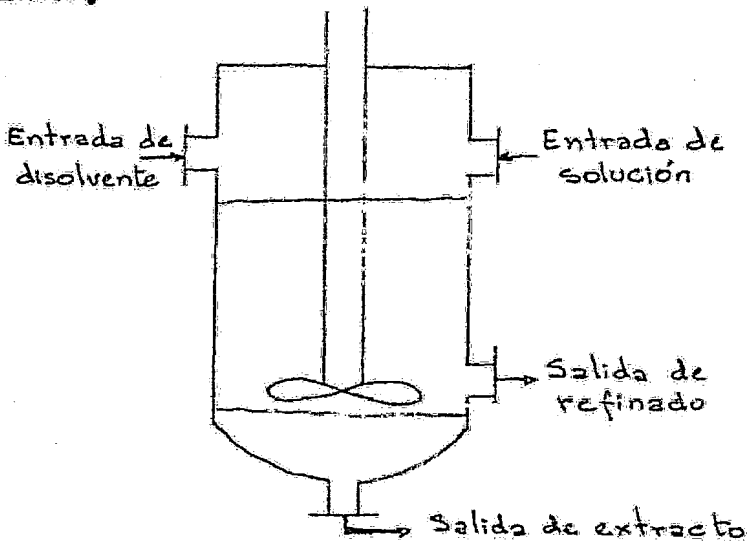


FIG. 1.11

e). Contacto múltiple a contracorriente -- con reflujo.

El uso de reflujo en un tipo de operación como el de contacto múltiple a contracorriente proporciona un proceso que en lo esencial es análogo al de la destilación fraccionada.

Con el uso adecuado del reflujo es posible enriquecer el extracto mas aún que en el caso sin reflujo. La figura 1.12 muestra una torre de platos en donde la -- alimentación de la solución se encuentra en la parte in-- termedia, y en la parte superior la torre cuenta con un -- sistema separador del disolvente y proporciona el reflujo.

La solución alimentada se divide en un re-- finado y un extracto que ambos se apartan del comporta--- miento de la solución alimentada. Mientras avanza el ex-- tracto, aumenta la concentración del componente que se de-- sea separar y se produce la fase final de extracto que en-- tra al sistema separador del disolvente y se obtiene el -- producto casi puro. Parte del extracto se elimina del --- equipo y otra parte se refluja a contracorriente del ex-- tracto en vías de enriquecimiento.

El sistema de separación del disolvente -- puede ser una columna de destilación o un tanque hermético a baja presión en donde uno de los componentes se eva--



pora. La selección de este sistema depende de la diferencia de propiedades de ambos componentes, si la diferencia de puntos de ebullición es alta puede utilizarse un tanque a baja presión para que la separación se realice por medio de una destilación flash, si la diferencia de puntos de ebullición no es muy alta puede utilizarse una columna de destilación.

Al realizarse la separación de estos componentes, los puntos que representan a estas concentraciones en un diagrama de equilibrio ternario se encuentran precisamente en los extremos de la curva binodal.

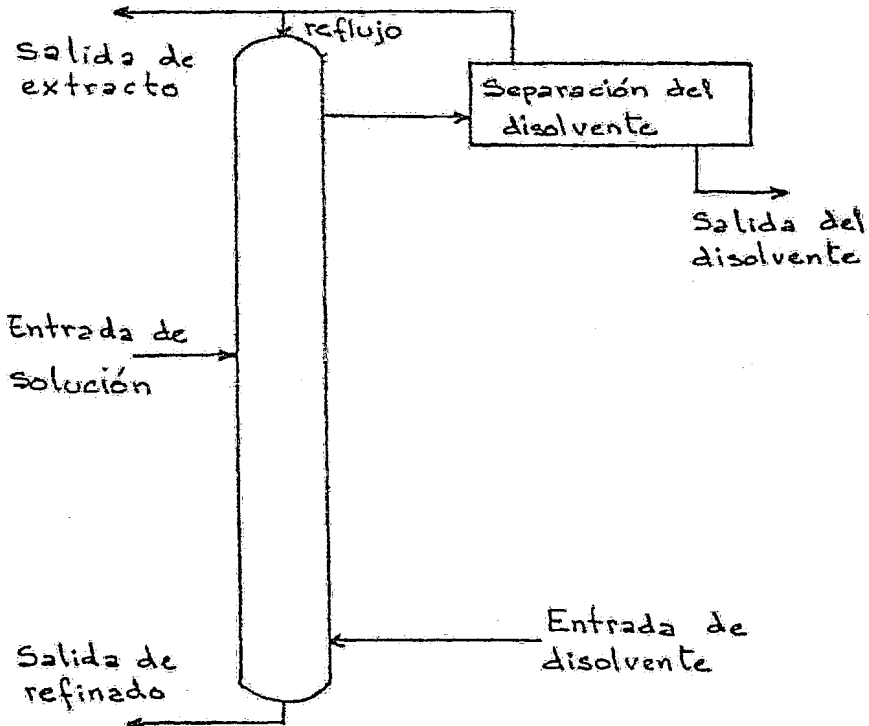


FIG. 1.12

## 2. BALANCE DE MATERIA Y ENERGIA EN EXTRACTORES.

### 2.1 Formulación de los modelos matemáticos.

#### A). Balance de materia.

2.1.A.1. Se analiza primero el balance de materia en una sola etapa. (Contacto único).

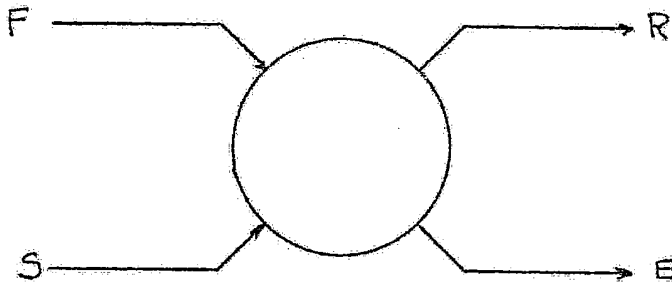


FIG. 2.1

F es la cantidad de masa de la solución -- que ha de separarse en sus componentes por medio del di-- solvente de extracción S para obtener una corriente refi-- nada R, que es la solución pobre en el componente extraí-- do, y un extracto E que es la solución rica en el compo-- nente separado de F.

El balance de materia nos dice que la suma

de las corrientes de entrada es igual a la suma de las corrientes de salida mas la acumulación. En este tipo de procesos no existe acumulación por lo que se puede decir que las entradas son iguales a las salidas. Aplicando esto al modelo de la figura 2.1 se obtiene:

$$F + S = R + E \quad \dots(2.1)$$

Si A es el componente de la alimentación que se desea separar, el balance de materia para este componente será:

$$F X_{AF} + S X_{AS} = R X_{AR} + E X_{AE} \quad \dots(2.2)$$

donde la notación  $X_{AF}$  es la fracción en peso del componente A en la alimentación F,  $X_{AS}$  es la fracción en peso del componente A en el disolvente de extracción S, etc. También puede representar fracción mol.

Por lo regular, el disolvente de extracción es puro, por lo que no existe el componente A en esta corriente, esto quiere decir que  $X_{AS} = 0$ . A menos que por condición del proceso, el disolvente de extracción se recircule después de haber sido destilado para separar lo mas posible el componente extraído, pero como sabemos, no puede haber una separación del 100 %.

Por costumbre se denota por B el componente o sustancia disolvente con la que se efectuará la extracción y la cantidad de este disolvente que entra al sistema es S.

Si representamos el balance de materia en un diagrama triangular de un sistema del tipo 1 (fig. 2.1) el balance total de materia para la operación es:

$$F + S = R + E = M \quad \dots(2.3)$$

donde M representa la cantidad de mezcla de la solución de alimentación y de disolvente. Las composiciones del punto M pueden determinarse analíticamente resolviendo los balances de materia para dos de los componentes. En base a las ecuaciones (2.2) y (2.3), el balance de materia para el componente A será:

$$F X_{AF} + S X_{AS} = M X_{AM} \quad \dots(2.4)$$

despejando  $X_{AM}$  de la ecuación (2.4)

$$X_{AM} = \frac{F X_{AF} + S X_{AS}}{M} = \frac{F X_{AF} + S X_{AS}}{F + S} \quad \dots(2.5)$$

haciendo un balance para el componente B

$$X_{BM} = \frac{F X_{BF} + S X_{BS}}{M} = \frac{F X_{BF} + S X_{BS}}{F + S} \quad \dots(2.6)$$

Resolviendo las ecuaciones (2.5) y (2.6) encontramos las composiciones  $X_{AM}$  y  $X_{BM}$ , además ya conocemos las composiciones de la alimentación y del disolvente, por lo que podemos localizar los puntos F, S y M.

Como suponemos que se trate de una etapa ideal, el punto M produce soluciones de extracto y refinado, E y R, situados en los extremos de la línea de repar-

to que pasa por M.

Las composiciones y pesos de las corrientes de extracto y de refinado se pueden conocer además -- realizando los balances de materia. Haciendo un balance -- para A :

$$E X_{AE} + R X_{AR} = M X_{AM} \quad \dots(2.7)$$

que resolviendola simultaneamente con la ecuación (2.3)

$$R + E = M$$

despejando R  $R = M - E \quad \dots(2.8)$

sustituyendo en (2.7)

$$E X_{AE} + (M - E) X_{AR} = M X_{AM}$$

$$E X_{AE} + M X_{AR} - E X_{AR} = M X_{AM}$$

$$E(X_{AE} - X_{AR}) = M(X_{AM} - X_{AR})$$

de donde

$$E = \frac{M(X_{AM} - X_{AR})}{X_{AE} - X_{AR}} \quad \dots(2.9)$$

y R puede resolverse a partir de la ecuación (2.8).

Si la mezcla M no se encuentra dentro de -- la región de dos fases líquidas no podrá haber separación por medio de una extracción; por lo tanto habrá una canti-dad máxima y una mínima de disolvente para situar a M en esta región. La cantidad mínima de disolvente está dada --

por la siguiente ecuación:

$$S_{\text{mín}} = \frac{F(X_{BD} - X_{BF})}{X_{BS} - X_{BD}} \quad \dots(2.10)$$

y situará al punto M en el punto D del diagrama de la figura 1.1. La cantidad de disolvente máxima está dada por:

$$S_{\text{máx}} = \frac{F(X_{BG} - X_{BF})}{X_{BS} - X_{BG}} \quad \dots(2.11)$$

que situará al punto M en el punto G. Siempre deberá usarse una cantidad de disolvente S que esté dentro del intervalo comprendido entre  $S_{\text{mín}}$  y  $S_{\text{máx}}$ .

### 2.1.A.2. Balance de materia en un proceso de contacto múltiple a contracorriente.

En este tipo de proceso se emplea una serie de etapas interconectadas en donde la alimentación y el disolvente son introducidos al sistema por los extremos opuestos de todas las etapas. Este proceso se representa en la figura 2.2a. El equipo utilizado en este tipo de proceso es una columna de extracción de platos en donde cada plato representa una etapa de contacto y se muestra en la figura 2.2b.

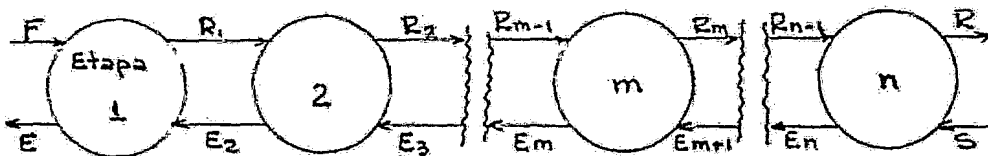


FIG. 2.2a

Haciendo un balance en un diagrama de coordenadas triangulares de un sistema del tipo 1, figura 2.3, y haciendo notar que en los procesos de este especie se conocen los valores de  $F$ ,  $E$ ,  $R$  y  $S$ , y lo que se desea determinar es el número de etapas o platos para llevar la corriente  $F$  de una composición  $X_{AF}$  a una corriente  $E$  con composición  $X_{AE}$  y con esto se lleva a la corriente  $S$  de composición  $X_{AS}$ , que en la mayoría de los casos es cero, a una corriente  $R$  de composición  $X_{AR}$ .

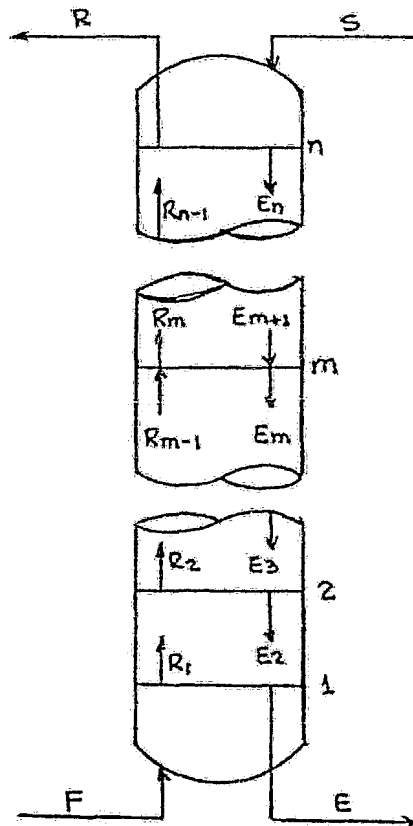


FIG. 2.2b

El balance total de materia será (para un sistema ternario de componentes A, B y C):

$$F + S = R + E \quad \dots(2.1)$$

que es el mismo balance para todos los casos.

El balance parcial para el componente A:

$$F X_{AF} + S X_{AS} = R X_{AR} + E X_{AE} \quad \dots(2.2)$$

El balance parcial para el componente B:

$$F X_{BF} + S X_{BS} = R X_{BR} + E X_{BE} \quad \dots(2.12)$$

El balance parcial para el componente C:

$$F X_{CF} + S X_{CS} = R X_{CR} + E X_{CE} \quad \dots(2.13)$$

Por lo general, las composiciones de las corrientes de entrada son conocidas y las incógnitas son las composiciones de salida, además sabemos que la suma de las composiciones en fracción masa o fracción mol en cada corriente debe ser 1.0.

Por lo tanto en la corriente R:

$$X_{AR} + X_{BR} + X_{CR} = 1.0 \quad \dots(2.14)$$

Y en la corriente E:

$$X_{AE} + X_{BE} + X_{CE} = 1.0 \quad \dots(2.15)$$

De estas seis ecuaciones, solo cinco son linealmente independientes y la otra no es independiente,



entonces tenemos un sistema de cinco ecuaciones con seis incógnitas, el otro medio de información que se tiene para que el sistema esté completamente definido es el diagrama de equilibrio físico del sistema correspondiente. - El método de cálculo se discutirá en el capítulo siguiente.

El método gráfico para la determinación de la cantidad de etapas necesarias de una torre de extracción líquido-líquido es como sigue:

Al conocerse los valores y composiciones de las corrientes F, E, R y S se conocen también su localización en el diagrama de equilibrio. Siguiendo la notación de la numeración de los platos de la figura 2.2b, la corriente E sale del plato No. 1, por lo que tendrá una notación  $E_1$  y la corriente R sale de la etapa n, entonces será  $R_n$ .

El balance total con esta notación es:

$$F + S = E_1 + R_n = M \quad \dots(2.16)$$

podemos hacer entonces:

$$F - E_1 = R_n - S = 0 \quad \dots(2.17)$$

Al punto O se le conoce como punto de operación y se localiza prolongando las líneas  $E_1F$  y  $SR_n$ , localizados en el diagrama de equilibrio, hasta que se corten.

Haciendo un balance de materia de las etapas 1 a m.

$$F + E_{m+1} = E_1 + R_m \quad \dots(2.18)$$

$$F - E_1 = R_m - E_{m+1} = 0 \quad \dots(2.19)$$

El balance para la etapa m exclusivamente es:

$$R_{m-1} + E_{m+1} = R_m + E_m \quad \dots(2.20)$$

$$R_{m-1} - E_m = R_m - E_{m+1} = 0 \quad \dots(2.21)$$

Se puede notar que las ecuaciones (2.19) y (2.21) son equivalentes, esto demuestra que el extracto  $E_{m+1}$  puede localizarse a partir del refinado  $R_m$  prolongando la línea  $OR_m$  hasta la curva de solubilidad rica en B.

A partir del punto  $R_m$  y siguiendo la línea de unión hasta el otro extremo de la curva binodal se localiza el punto  $E_m$ , que está en equilibrio con la corriente  $R_m$ . Trazando una línea desde el punto O hasta el punto  $E_m$  y en donde esta línea corta a la curva binodal se localiza el punto  $R_{m-1}$  y así sucesivamente. El punto M puede localizarse en el cruce de las líneas que unen a  $E_1, R_m$  y - FS. La figura 2.4 ilustra este método.

2.1.A.3. Balance de materia en extracción diferencial.

La notación que utilizaremos para este análisis es el siguiente:

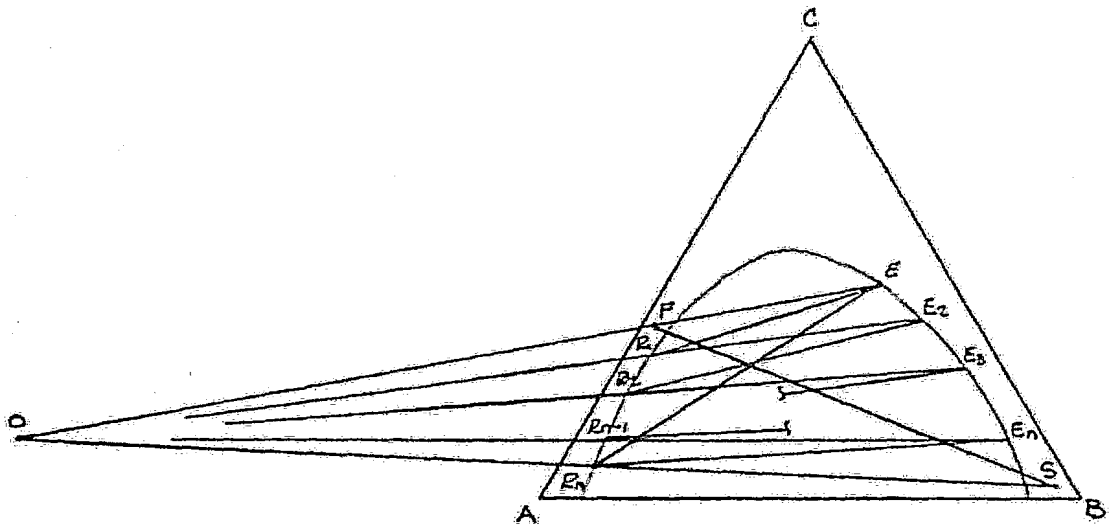


FIG. 2.3

$dS$  moles de entrada

$dE$  moles producidas de extracto

$dR$  moles producidas de refinado

$R$  moles iniciales

El balance de materia total es:

$$R + dS = (R - dR) + dE$$

$$dS = dE - dR$$

...(2.22)

El nuevo refinado,  $R - dR$ , tiene una composición  $X_{AR} - dX_{AR}$ ;  $X_{BR} - dX_{BR}$ ;  $X_{CR} - dX_{CR}$ .

Haciendo un balance para el componente C

$$R X_{CR} + X_{CS} dS = (R - dR)(X_{CR} - dX_{CR}) + X_{CE} dE$$

$$X_{CS} dS = X_{CE} dE - R dX_{CR} - X_{CR} dR \quad \dots(2.23)$$

Haciendo un balance para el componente A

$$R X_{AR} + X_{AS} dS = (R - dR)(X_{AS} - dX_{AR}) + X_{AE} dE$$

$$X_{AS} dS = X_{AE} dE - R dX_{AR} - X_{AR} dR \quad \dots(2.24)$$

Eliminando dS y dE de las ecuaciones -----

(2.22), (2.23) y (2.24) de la siguiente forma:

de la ecuación (2.24)

$$dE - dR = \frac{X_{AE} dE - R dX_{AR} - X_{AR} dR}{X_{AS}}$$

de la ecuación (2.23)

$$dE - dR = \frac{X_{CE} dE - R dX_{CR} - X_{CR} dR}{X_{CS}}$$

$$X_{AS}(dE - dR) = X_{AE} dE - R dX_{AR} - X_{AR} dR$$

$$X_{CS}(dE - dR) = X_{CE} dE - R dX_{CR} - X_{CR} dR$$

$$X_{AS} dE - X_{AS} dR = X_{AE} dE - R dX_{AR} - X_{AR} dR$$

$$X_{CS} dE - X_{CS} dR = X_{CE} dE - R dX_{CR} - X_{CR} dR$$

$$(X_{AS} - X_{AE}) dE = X_{AS} dR - R dX_{AR} - X_{AR} dR$$

$$(X_{CS} - X_{CE}) dE = X_{CS} dR - R dX_{CR} - X_{CR} dR$$

tenemos

$$dE = \frac{X_{AS} dR - R dX_{AR} - X_{AR} dR}{X_{AS} - X_{AE}}$$

pero también tenemos 
$$dE = \frac{X_{CS} dR - R dX_{DR} - X_{CR} dR}{X_{CS} - X_{CE}}$$

por lo tanto podemos igualar estas dos ecuaciones

$$\frac{(X_{AS} - X_{AR}) dR - R dX_{AR}}{X_{AS} - X_{AE}} = \frac{(X_{CS} - X_{CR}) dR - R dX_{CR}}{X_{CS} - X_{CE}}$$

$$\frac{dX_{CR}}{X_{CS} - X_{CE}} - \frac{dX_{AR}}{X_{AS} - X_{AE}} R = dR \frac{X_{CS} - X_{CR}}{X_{CS} - X_{CE}} - \frac{X_{AS} - X_{AR}}{X_{AS} - X_{AE}}$$

$$\frac{dR}{R} = \frac{\frac{dX_{CR}}{X_{CS} - X_{CE}} - \frac{dX_{AR}}{X_{AS} - X_{AE}}}{\frac{X_{CS} - X_{CR}}{X_{CS} - X_{CE}} - \frac{X_{AS} - X_{AR}}{X_{AS} - X_{AE}}}$$

integrando entre los límites  $R_f$  y  $R_o$ ;  $X_{CRf}$  y  $X_{CRO}$ ;  $X_{ARf}$  y  $X_{ARO}$  tenemos:

$$\ln \frac{R_o}{R_f} = \int_{R_f}^{R_o} \frac{dR}{R} \equiv \int_{X_{CRf}}^{X_{CRO}} \frac{\frac{dX_{CR}}{(X_{CS} - X_{CE}) \frac{X_{CS} - X_{CR}}{X_{CS} - X_{CE}} - \frac{X_{AS} - X_{AR}}{X_{AS} - X_{AE}}}}{... (2.26)}$$

$$- \int_{X_{ARf}}^{X_{ARO}} \frac{dX_{AR}}{(X_{AS} - X_{AE}) \frac{X_{CS} - X_{CR}}{X_{CS} - X_{CE}} - \frac{X_{AS} - X_{AR}}{X_{AS} - X_{AE}}}$$

donde el subíndice f denota el estado final y el subíndice o el estado inicial.

El extracto final  $E_f$ , que está compuesto de todos los extractos separados, se obtiene por elimina-

ción de  $dS$  de las ecuaciones (2.22) y (2.23). Sustituyendo  $dS$  de la ecuación (2.22) en la (2.23) obtenemos:

$$\begin{aligned}
 X_{CS} (dE - dR) &= X_{CE} dE - R dX_{CR} - X_{CR} dR \\
 X_{CS} dE - X_{CS} dR &= X_{CE} dE - R dX_{CR} - X_{CR} dR \\
 X_{CS} dE - X_{CE} dE &= X_{CS} dR - R dX_{CR} - X_{CR} dR \\
 dE &= \frac{(X_{CS} - X_{CR}) dR - R dX_{CR}}{(X_{CS} - X_{CE})} \quad \dots(2.27)
 \end{aligned}$$

y como  $X_{CS}$  es constante

$$\int_0^{E_f} dE = E_f = \int_{R_f(X_{CS} - X_{CR_f})}^{R_o(X_{CS} - X_{CR_o})} \frac{d(R(X_{CS} - X_{CR}))}{X_{CS} - X_{CE}} \quad \dots(2.28)$$

que puede evaluarse con los datos obtenidos al resolver la ecuación (2.26).

La cantidad de disolvente utilizado será:

$$S_f = E_f + R_f - R_o \quad \dots(2.29)$$

En caso de que la solución inicial no esté saturada, habrá que adicionar una cierta cantidad de disolvente necesaria para llevarla a la saturación.

Para los componentes A y C, el balance de materia es:

$$E_f X_{CEf} = S_f X_{CS} + R_o X_{CRO} - R_f X_{CRf} \quad \dots(2.30)$$

$$E_f X_{AEf} = S_f X_{AS} + R_o X_{CRO} - R_f X_{CRf} \dots(2.31)$$

La composición del extracto final es:

$$X_{CEf} = \frac{S_f X_{CS} + R_o X_{CRO} - R_f X_{CRf}}{E_f} \dots(2.32)$$

$$X_{AEf} = \frac{S_f X_{AS} + R_o X_{ARO} - R_f X_{ARf}}{E_f} \dots(2.33)$$

$$X_{BEf} = 1 - X_{CEf} - X_{AEf} \dots(2.34)$$

En el caso de que el disolvente, que es el componente B, esté puro, esto quiere decir que  $X_{AS} = 0$  y  $X_{CS} = 0$ , la ecuación (2.26) se reduce a:

$$\ln \frac{R_o}{R_f} = \int_{X_{CRf}}^{X_{CRO}} \frac{dX_{CR}}{X_{CE} \frac{X_{AR}}{X_{AE}} - \frac{X_{CR}}{X_{CE}}} - \int_{X_{ARf}}^{X_{ARO}} \frac{dX_{AR}}{X_{AE} \frac{X_{AR}}{X_{AE}} - \frac{X_{CR}}{X_{CE}}} \dots(2.35)$$

Y la ecuación (2.28) se transforma en:

$$E_f = \int_{R_f X_{CRf}}^{R_o X_{CRO}} \frac{d(X_{CR} R)}{X_{CE}} \dots(2.36)$$

2.1.A.4. Balance de materia en operaciones con corriente transversal.

Este tipo de operación puede ser representado de acuerdo al diagrama de flujo de la figura 2.4.

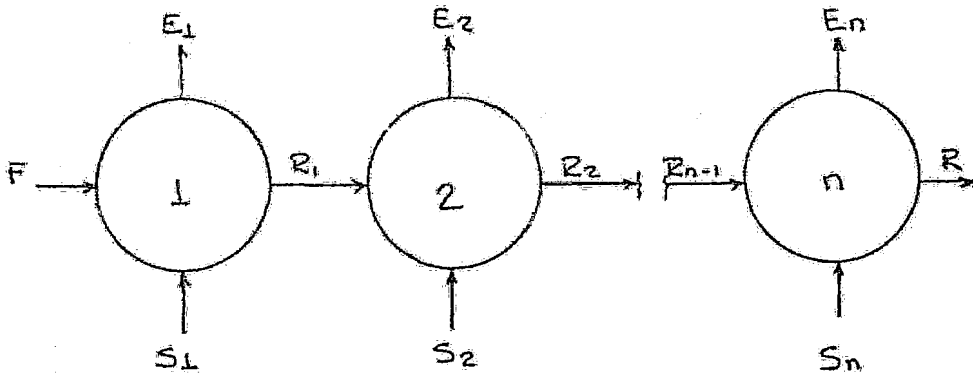


FIG. 2.4

Se puede observar que el extracto combinado E es la suma de todas las salidas de extracto.

$$E = E_1 + E_2 + E_3 + \dots + E_n \quad \dots(2.37)$$

$$X_{AE} = \frac{X_{AE1} E_1 + X_{AE2} E_2 + X_{AE3} E_3 + \dots + X_{AEn} E_n}{E} \quad \dots(2.38)$$

$$X_{BE} = \frac{X_{BE1} E_1 + X_{BE2} E_2 + X_{BE3} E_3 + \dots + X_{BE_n} E_n}{E} \quad \dots(2.39)$$

$$X_{CE} = \frac{X_{CE1} E_1 + X_{CE2} E_2 + X_{CE3} E_3 + \dots + X_{CE_n} E_n}{E} \quad \dots(2.40)$$

Para resolver este tipo de problemas hay que proceder haciendo un balance en cada etapa como si fueran aisladas, es decir, considerando a cada etapa como un sistema de contacto único.

Pueden presentarse dos variantes en los problemas a resolver; cuando se conoce el número de eta-



pas y hay que calcular la composición del refinado o de los extractos, este es el caso mas sencillo; el otro es cuando se quiere obtener un refinado o un extracto de una concentración determinada, entonces se hacen balances en forma iterativa, haciendo un balance por cada etapa hasta llegar a la composición deseada, teniéndose así el número de etapas necesarias.

2.1.A.5. Balance de materia en operaciones de contacto múltiple a contracorriente con reflujo.

Podemos observar este tipo de operación en el diagrama de flujo de la figura 2.5.

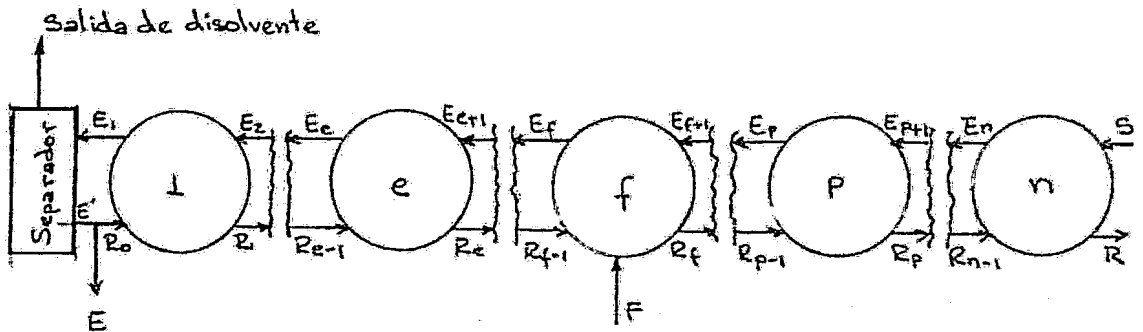


FIG. 2.5

Haciendo un balance en el separador del disolvente tenemos:

$$E_1 = S_E + E' \quad \dots(2.41)$$

Pero como se vé, la corriente  $E'$  se divide en las corrientes  $R_o$  y  $P_E$ , por lo tanto

$$E' = R_o + P_E$$

Por lo que la ecuación (2.41) se convierte en:

$$E_1 = S_E + R_o + P_E \quad \dots(2.42)$$

$$\text{Si hacemos } Q = S_E + P_E \quad \dots(2.43)$$

$$\text{tenemos } E_1 = R_o + Q \quad \dots(2.44)$$

Si hacemos un balance solo en la etapa de enriquecimiento de la planta, tenemos que:

$$E_{e+1} = S_E^c + P_E + R_e \quad \dots(2.45)$$

Sustituyendo  $Q$  de la ecuación (2.43)

$$E_{e+1} = Q + R_e \quad \dots(2.46)$$

$$\text{y } Q = E_{e+1} - R_e \quad \dots(2.47)$$

Esto quiere decir que  $Q$  representa el flujo neto en la sección del extracto de la planta para las etapas 1 a  $(f - 1)$ , siendo la etapa  $f$  por la que se alimenta la solución al extractor.

Para la sección del refinado, un balance de materia de las etapas  $p$  a  $n$  del diagrama de la figura 2.6, tenemos:

$$S + R_{p-1} = E_p + R_n \quad \dots(2.48)$$

$$\text{haciendo } S - R_n = E_p - R_{p-1} = W \quad \dots(2.49)$$

Donde  $W$  representa la diferencia constante entre los flujos de extracto y refinado en la etapas de toda la sección. Un balance de materia alrededor de la etapa de alimentación da:

$$E_{f+1} + R_{f-1} + F = R_f + E_f \quad \dots(2.50)$$

Esta ecuación se puede acomodar como sigue:

$$E_f - R_{f-1} = E_{f+1} - R_f + F \quad \dots(2.51)$$

Observando la figura 2.5 se puede decir -- que:

$$E_f = E_{e+1}; R_{f-1} = R_e; E_{f+1} = E_p \text{ y } R_f = R_{p-1}$$

y la ecuación (2.51) queda:

$$E_{e+1} - R_e = E_p - R_{p-1} + F \quad \dots(2.52)$$

y como  $Q = E_{e+1} - R_e$  y  $W = E_p - R_{p-1}$  se obtiene:

$$Q = W + F \quad \dots(2.53)$$

Esta ecuación demuestra lo que se dijo de  $Q$  y  $W$  anteriormente. Haciendo un balance total en la planta se obtiene:

$$S + F = S_E + P_E + R_n \quad \dots(2.54)$$

Por lo que la cantidad de disolvente requerido será:

$$S = S_E + P_E + R_n - F \quad \dots(2.55)$$

### 2.1.B. Balance de energía.

La gran mayoría de las operaciones de extracción líquido-líquido se llevan a cabo en forma isotérmica, esto es debido a que los componentes que intervienen en la mezcla forman soluciones ideales, esto quiere decir que el calor de solución es casi cero. En los casos en que las soluciones no son ideales, el calor de solución es diferente de cero, esto provoca un cambio en la temperatura del sistema y por lo tanto altera al proceso. En estos casos el balance de energía se plantea con la finalidad de encontrar el área de transferencia de calor necesaria para mantener al sistema en una temperatura constante.

El planteamiento del balance de energía es como sigue:

$$\begin{array}{l} \text{Energía que} \\ \text{entra} \end{array} + \text{"Generación"} = \begin{array}{l} \text{Energía que} \\ \text{sale} \end{array} + \text{Acumulación} \quad \dots(2.56)$$

A régimen permanente la acumulación es igual a cero. El término de Generación es la energía que se provoca por el calor de solución, que puede ser positivo o negativo dependiendo si el calor de solución es endotérmico o exotérmico.

Este balance está planteado de acuerdo a la figura 2.6, en donde:

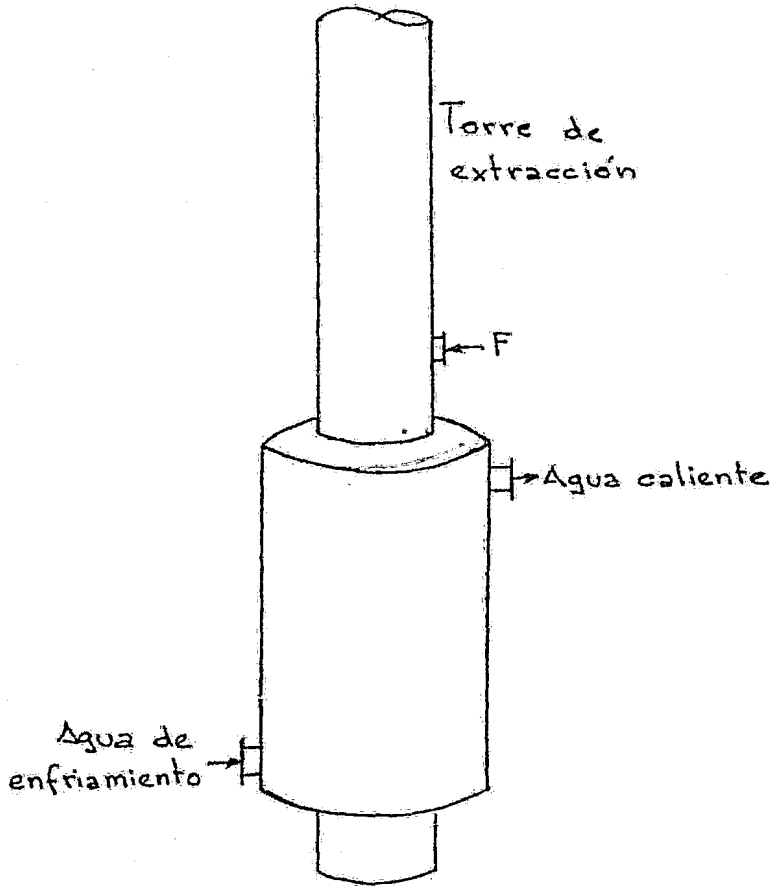


FIG. 2.5

$$\text{Energía que entra} = F\Delta H_F + S\Delta H_S$$

$$\text{Energía que se genera} = -\Delta H_{\text{sol}}$$

$$\text{Energía que sale} = R\Delta H_R + E\Delta H_E$$

Si la mezcla de alimentación está formada por los componentes A y C, y el disolvente de extracción es B puro en un sistema del tipo 1, el balance se escribe de la siguiente forma:

$$F(Cp_{AC} T) + S(Cp_B T) - \Delta H_{\text{sol}} = R(Cp_1 T) + E(Cp_2 T) \quad \dots(2.57)$$

Donde  $Cp_{AC}$  es la capacidad calorífica de la mezcla de alimentación. Por lo tanto debe conocerse la composición de la alimentación. Entonces.

$$Cp_{AC} = Cp_A X_A + Cp_C X_C \quad \dots(2.58)$$

$Cp_1$  y  $Cp_2$  son las capacidades caloríficas de las mezclas de refinado y extracto que están formados por los tres componentes, por lo que es necesario hacer el balance de materia para conocer la composición de ambas corrientes.

Para mantener el sistema en forma isotérmica es necesario extraer el calor que se genera por la entalpia de solución, para lo cual es necesario determinar el área de transferencia de calor. Esta se determina de la siguiente manera:

$$Q = U A \Delta T_{ml} \quad \dots(2.59)$$

En este caso  $Q = -\Delta H_{sol}$

$U$  = Coeficiente total de transferencia de calor, que depende del material del recipiente.

$A$  = Area de transferencia de calor

$\Delta T_{ml}$  = Diferencia de temperatura media logarítmica entre los fluidos frío y caliente.

El coeficiente total de transferencia de calor se calcula con la siguiente ecuación

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_o} + \frac{1}{h_i} + \frac{\Delta x}{k} \quad \dots(2.60)a$$

donde  $h_o$  = Coeficiente parcial de transferencia de la película del líquido caliente. (BTU/hr ft<sup>2</sup>)

$h_i$  = Coeficiente parcial de transferencia de la película del líquido frío. (BTU/hr ft<sup>2</sup>)

$k$  = Conductividad térmica del material que separa a ambos líquidos. (BTU/hr ft<sup>2</sup>/ft)

$x$  = Espesor del material que separa ambos líquidos.  
(ft)

Despejando el área de transferencia de la ecuación (2.59):

$$A = \frac{Q}{U \Delta T_{ml}} \quad \dots(2.60)b$$

## 2.2 Análisis del modelo matemático e identificación de los tipos de ecuaciones.

Haciendo un resumen de las ecuaciones de los balances de materia en todos los casos tenemos:

Balance total

$$F + S = R + E \quad \dots(2.1)$$

Balances parciales para los componentes A, B y C

$$F X_{AF} + S X_{AS} = R X_{AR} + E X_{AE} \quad \dots(2.2)$$

$$F X_{BF} + S X_{BS} = R X_{BR} + E X_{BE} \quad \dots(2.12)$$

$$F X_{CF} + S X_{CS} = R X_{CR} + E X_{CE} \quad \dots(2.13)$$

Cómo fue mencionado en el capítulo anterior, el disolvente de extracción, por lo general, es puro, por lo que  $X_{AS} = 0$ ,  $X_{CS} = 0$  y  $X_{BS} = 1$ ; el componente B no existe en la corriente de alimentación F, esto es  $X_{BF} = 0$ .

Sustituyendo esto en las ecuaciones anteriores resulta el siguiente sistema:

$$F + S = R + E \quad \dots(2.1)$$

$$F X_{AF} = R X_{AR} + E X_{AE} \quad \dots(2.61)$$

$$S = R X_{BR} + E X_{BE} \quad \dots(2.62)$$

$$F X_{CF} = R X_{CR} + E X_{CE} \quad \dots(2.63)$$



2.2 Análisis del modelo matemático e identificación de los tipos de ecuaciones.

Haciendo un resumen de las ecuaciones de los balances de materia en todos los casos tenemos:

Balance total

$$F + S = R + E \quad \dots(2.1)$$

Balances parciales para los componentes A,

B y C

$$F X_{AF} + S X_{AS} = R X_{AR} + E X_{AE} \quad \dots(2.2)$$

$$F X_{BF} + S X_{BS} = R X_{BR} + E X_{BE} \quad \dots(2.12)$$

$$F X_{CF} + S X_{CS} = R X_{CR} + E X_{CE} \quad \dots(2.13)$$

Cómo fué mencionado en el capítulo anterior, el disolvente de extracción, por lo general, es puro, por lo que  $X_{AS} = 0$ ,  $X_{CS} = 0$  y  $X_{BS} = 1$ ; el componente B no existe en la corriente de alimentación F, esto es  $X_{BF} = 0$ .

Sustituyendo esto en las ecuaciones anteriores resulta el siguiente sistema:

$$F + S = R + E \quad \dots(2.1)$$

$$F X_{AF} = R X_{AR} + E X_{AE} \quad \dots(2.61)$$

$$S = R X_{BR} + E X_{BE} \quad \dots(2.62)$$

$$F X_{CF} = R X_{CR} + E X_{CE} \quad \dots(2.63)$$

Las composiciones de la corriente de alimentación son conocidas ( $X_{AF}$  y  $X_{CF}$ ), además de que para todo tipo de procesos se desea separar una cierta cantidad, la mayor posible, del componente A de la corriente F, por lo tanto la composición de A en el extracto E ( $X_{AE}$ ) ya está definida y por lo tanto es conocida.

Quedan entonces cinco incógnitas:  $X_{CR}$ ,  $X_{CE}$ ,  $X_{BR}$ ,  $X_{BE}$  y  $X_{AR}$ . Sabemos que las composiciones en fracción masa o fracción mol en cada corriente suman 1.0, esto es:

$$X_{AF} + X_{BF} + X_{CF} = 1.0 \quad \dots(2.64)$$

$$X_{AS} + X_{BS} + X_{CS} = 1.0 \quad \dots(2.65)$$

$$X_{AR} + X_{BR} + X_{CR} = 1.0 \quad \dots(2.14)$$

$$X_{AE} + X_{BE} + X_{CE} = 1.0 \quad \dots(2.15)$$

Tomando en cuenta lo mencionado anteriormente, la ecuación (2.64) se puede eliminar, así como también la (2.65). Para lograr en la corriente E una cierta cantidad de A se necesita una cierta cantidad de B, que en este caso  $B = S$  numéricamente, por lo tanto S es otra incógnita.

Existe ahora un sistema de cinco ecuaciones linealmente independientes, ya que de éstas seis ecuaciones una es dependiente de las otras, y la información de equilibrio físico, la cual para facilidad de cálculo,

es deseable tenerla en forma de ecuación y para ello hay que hacer un tratamiento a los datos experimentales mediante técnicas de ajuste, las cuales se mencionan en el siguiente capítulo.

### 3. MODELOS MATEMATICOS PARA LA REPRESENTACION DE DATOS DE EQUILIBRIO.

#### 3.1 Tratamientos de datos de equilibrio.

En este capítulo se tratará de obtener un modelo matemático que represente a los datos de equilibrio físico para disponer de la sexta ecuación faltante del sistema de ecuaciones con seis incógnitas indicado en el capítulo anterior.

Se han elegido cuatro sistemas ternarios para analizarlos numéricamente. Estos son:

- a). A-Agua; B-Metil Isobutil Cetona; C-Ac. Acético.
- b). A-Agua; B-Benceno; C-Piridina.
- c). A-Etilbenceno; B-Etilén Glicol; C-Estireno.
- d). A-Agua; B-Metil Isobutil Cetona; C-Acetona.

Los datos de equilibrio correspondientes a estos sistemas se encuentran tabulados en las tablas 3.1, 3.2, 3.3 y 3.4 y su representación gráfica en diagrama triangular en las figuras 3.1, 3.2, 3.3 y 3.4.

Sistema a). A-Agua; B-Metil Isobutil Cetona; C-Ac. Acético

Curva de refinado			Curva de extracto		
A	B	C	A	B	C
98.45	1.55	0.0	2.12	97.88	0.0
95.45	1.7	2.85	2.8	95.33	1.87
85.8	2.5	11.7	5.4	85.7	8.9

75.7	3.8	20.5	9.2	73.5	17.3
67.8	6.0	26.2	14.5	60.9	24.6
55.0	12.2	32.8	22.0	47.2	30.8
42.9	22.5	34.6	31.0	35.4	33.6

\*Estos datos son en porcentaje en masa

TABLA 3.1

Sistema b). A-Agua; B-Benceno; C-Piridina

Curva de refinado			Curva de extracto		
A	B	C	A	B	C
94.7	0.2	5.1	0.75	85.35	13.9
87.2	0.6	12.2	1.8	71.2	27.0
71.6	2.5	25.9	3.1	61.6	35.3
54.5	3.8	41.7	4.8	56.8	38.4
36.3	10.0	53.7	5.8	50.4	43.8

\*Estos datos son en porcentaje en masa

TABLA 3.2

Sistema c). A-Etilbenceno; B-Etilén Glicol; C-Estireno

Curva de refinado			Curva de extracto		
A	B	C	A	B	C
90.56	0.81	8.63	9.85	88.51	1.64
80.4	0.93	18.67	9.31	87.2	3.49
70.49	1.0	28.51	8.72	85.8	5.48
60.93	1.09	37.98	8.07	84.48	7.45
53.55	1.2	45.25	7.35	83.4	9.25

52.96	1.2	45.84	7.31	83.2	9.49
43.29	1.39	55.32	6.3	81.7	12.0
41.51	1.4	57.9	6.06	81.4	12.54
21.6	1.8	76.6	3.73	77.65	18.62

\*Estos datos son en porcentaje en masa

TABLA 3.3

Sistema d). A-Agua; B-Metil Isobutil Cetona; C-Acetona

Curva de refinado			Curva de extracto		
A	B	C	A	B	C
0.98	0.02	0.0	0.02	0.98	0.0
0.955	0.022	0.023	0.025	0.9295	0.455
0.94	0.025	0.035	0.03	0.87	0.1
0.875	0.03	0.095	0.04	0.78	0.18
0.82	0.035	0.145	0.05	0.7	0.25
0.76	0.04	0.2	0.06	0.62	0.32
0.715	0.045	0.24	0.075	0.565	0.36
0.65	0.05	0.3	0.085	0.515	0.4
0.575	0.075	0.35	0.105	0.465	0.43
0.505	0.097	0.398	0.13	0.415	0.455
0.445	0.125	0.43	0.14	0.395	0.465
0.265	0.255	0.48	0.265	0.255	0.48

\*Estos datos son en fracción masa

TABLA 3.4

### 3.1.1. Representaciones gráficas.

a). Diagrama de coordenadas base disolvente libre.

En este diagrama se grafica, en el eje de -- las ordenadas la concentración del diluyente B en base libre de disolvente ( $\text{lb B/lb(A+C)}$ ) y en el eje de las abci-- sas la concentración del soluto C en base libre de disol-- vente ( $\text{lb C/lb(A+C)}$ ) de las fases refinado y extracto.

Las representaciones gráficas de este tipo, para los cuatro sistemas anteriores, se encuentran en las figuras 3.5, 3.6, 3.7 y 3.8 y los datos se encuentran tabu-- lados en las tablas 3.5, 3.6, 3.7 y 3.8.

b). Diagrama triángulo rectangular.

La representación gráfica de este tipo se en-- cuentra en las figuras 3.9, 3.10, 3.11 y 3.12, siendo los datos los mismos de las tablas 3.1, 3.2, 3.3 y 3.4.

Sistema a). A-Agua; B-Metil Isobutil Cetona; C-Ac. Acético

Curva de refinado		Curva de extracto	
X	Y	X	Y
0.0	0.01574	0.0	46.672
0.02899	0.01729	0.40043	20.41328
0.12	0.02564	0.62238	5.99301
0.2131	0.0395	0.65283	2.77358
0.27872	0.06383	0.62916	1.55754

0.37358	0.13895	0.58333	0.89394
0.44645	0.29032	0.52012	0.54799

TABLA 3.5

Sistema b). A-Agua; B-Benceno; C-Piridina

Curva de refinado		Curva de extracto	
X	Y	X	Y
0.0511	0.002	0.94881	5.82594
0.12274	0.00604	0.9375	2.47222
0.26564	0.02564	0.91927	1.60417
0.43347	0.0395	0.88889	1.31481
0.59667	0.11111	0.88306	1.01613

TABLA 3.6

Sistema c). A-Etilbenceno; B-Etilén Glicol; C-Estireno

Curva de refinado		Curva de extracto	
X	Y	X	Y
0.087	0.00817	0.14273	7.70322
0.18845	0.00939	0.27266	6.8125
0.28798	0.0101	0.38592	6.04225
0.38399	0.01102	0.48003	5.4433
0.458	0.01215	0.55723	5.0241
0.46397	0.01215	0.56488	4.95238
0.561	0.0141	0.65574	4.46448
0.57901	0.0142	0.67419	4.37634
0.78004	0.01833	0.83311	3.47427

TABLA 3.7



Sistema d). A-Agua; B-Metil Isobutil Cetona; C-Acetona

Curva de refinado		Curva de extracto	
X	Y	X	Y
0.0	0.02041	0.0	49.0
0.02352	0.02249	0.64539	13.1844
0.0359	0.02564	0.76923	6.69231
0.09794	0.03093	0.81818	3.54545
0.15026	0.03627	0.83333	2.33333
0.20833	0.04167	0.84211	1.63158
0.25131	0.04712	0.82759	1.29885
0.31579	0.05263	0.82474	1.06186
0.37838	0.08108	0.80374	0.86916
0.44075	0.10742	0.77778	0.7094
0.49143	0.14286	0.7686	0.65289
0.6443	0.34228	0.6443	0.34228

TABLA 3.8

Sistema a)

A Agua

B Metil Isobutil Cetona

C Acido Acético

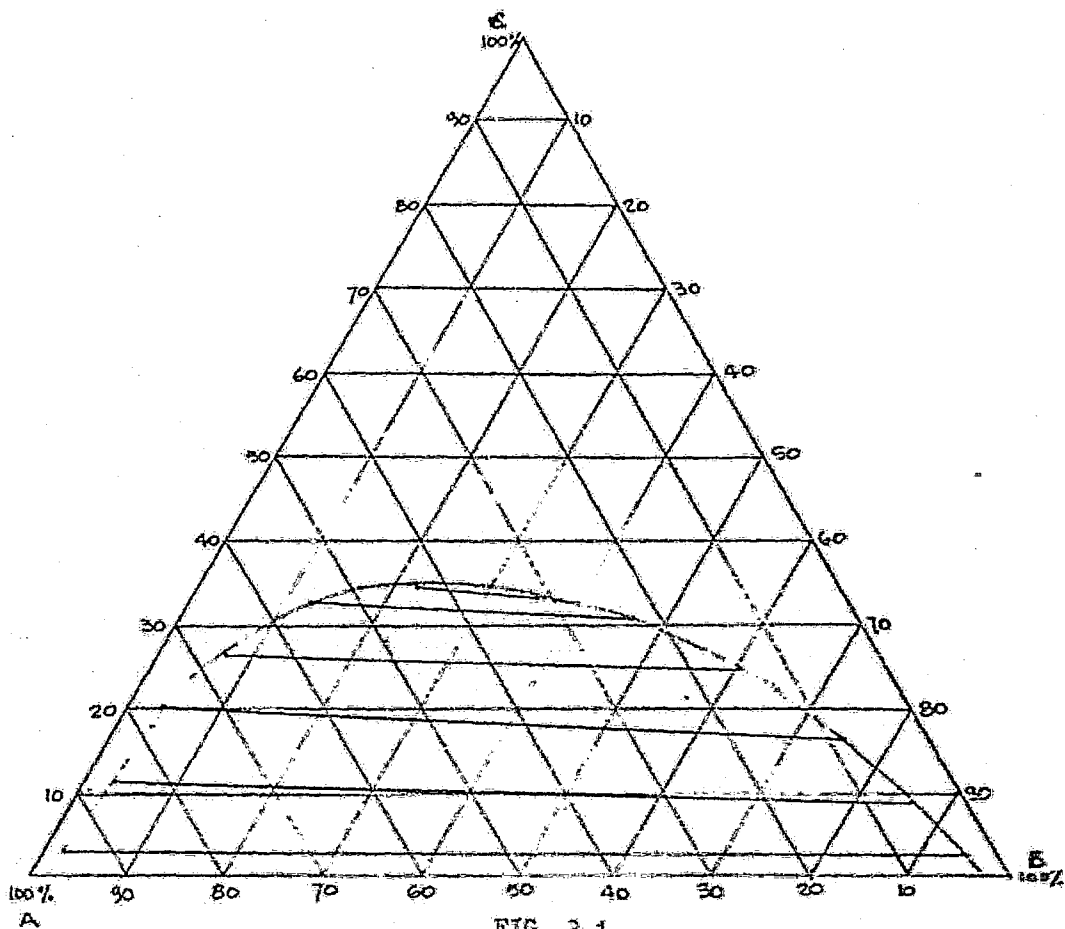


FIG. 3.1

Sistema b)

A Agua

B Benceno

C Piridina

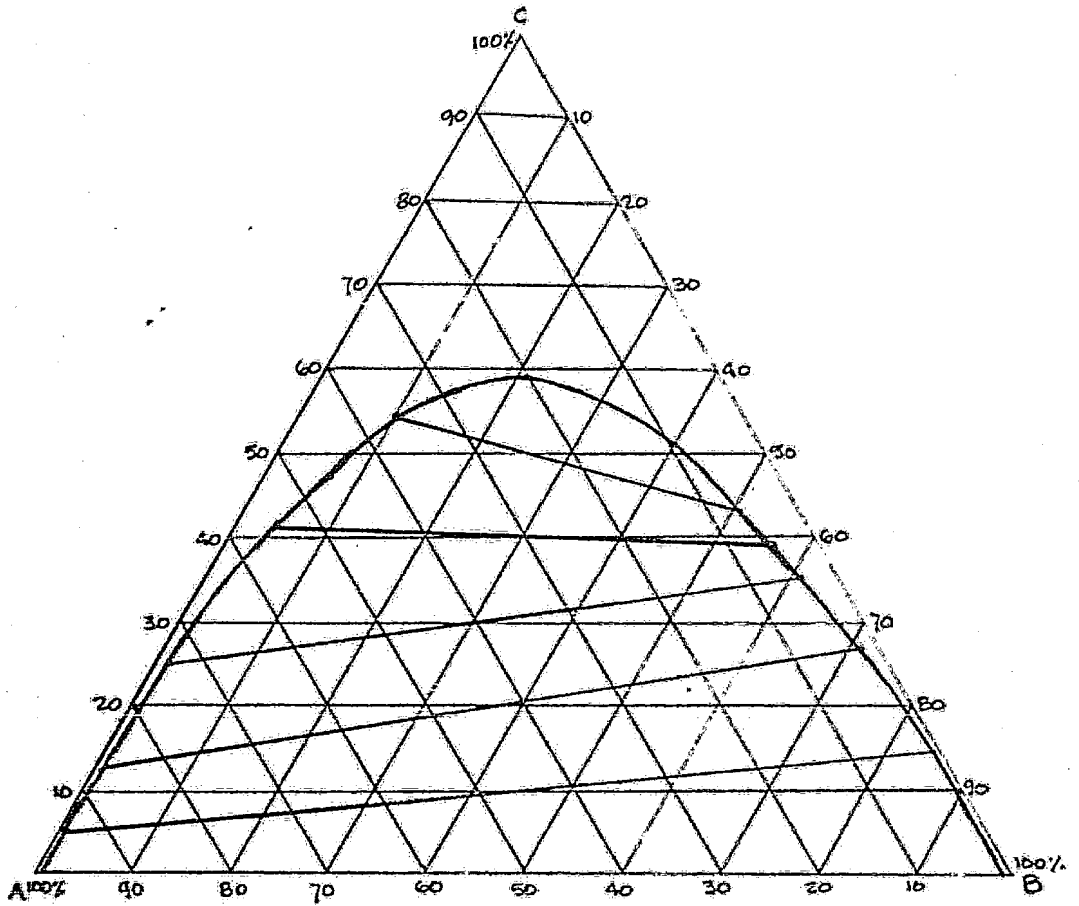


FIG. 3,2

Sistema c)  
A Etil Benceno  
B Etilén Glicol  
C Estireno

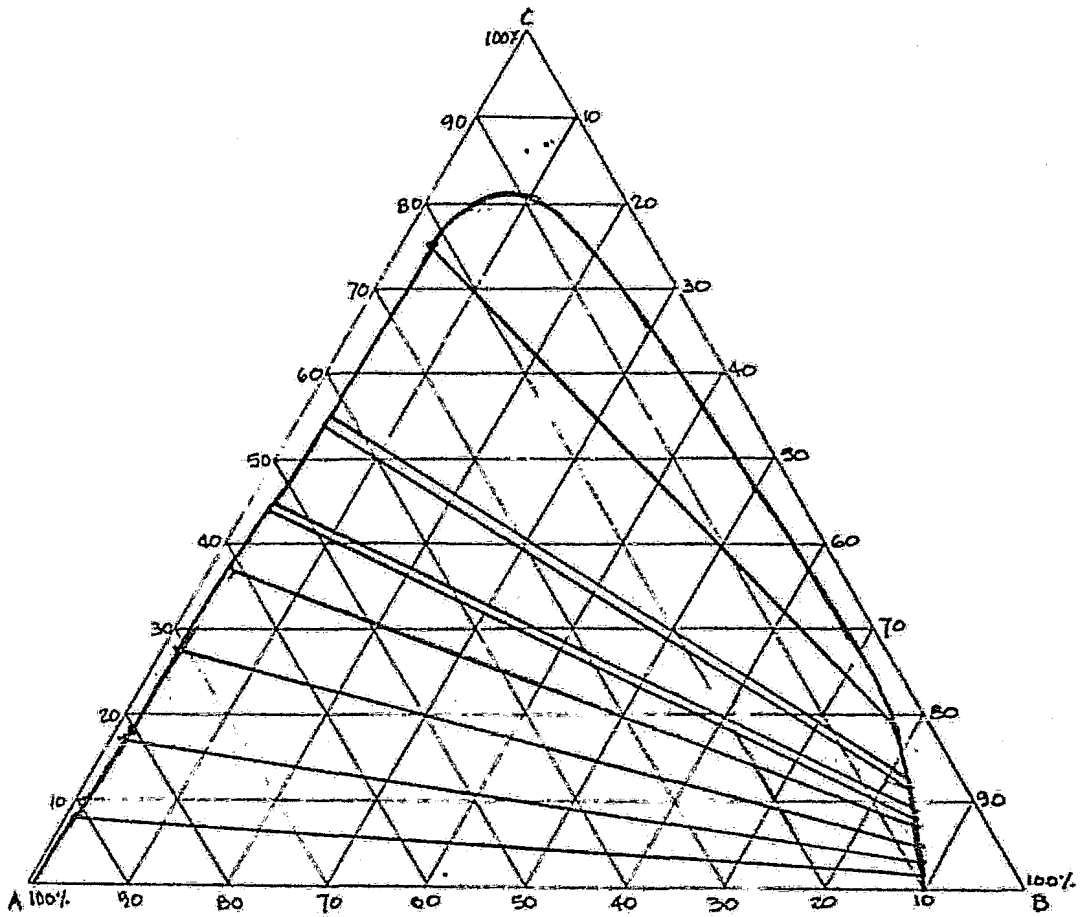


FIG. 3.3

Sistema d)

A Agua

B Metil Isobutil Cetona

C Dimetil Cetona (Acetona)

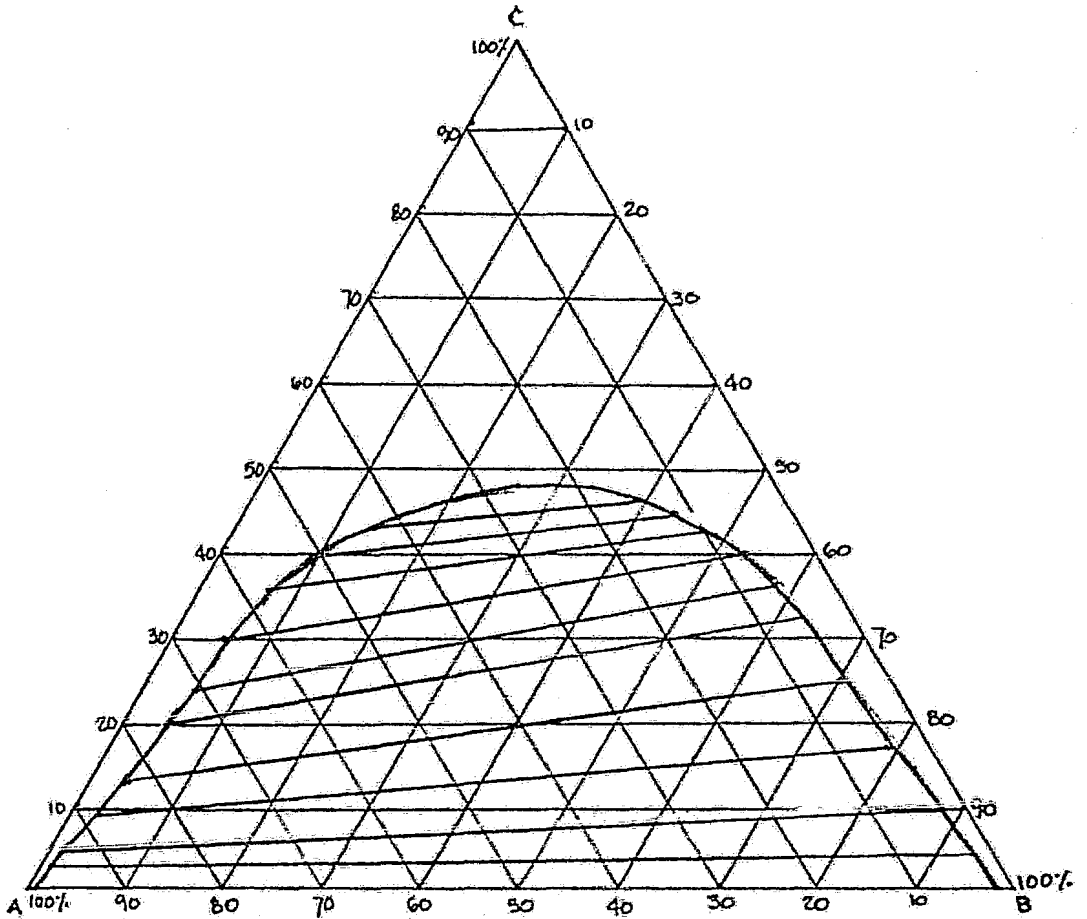
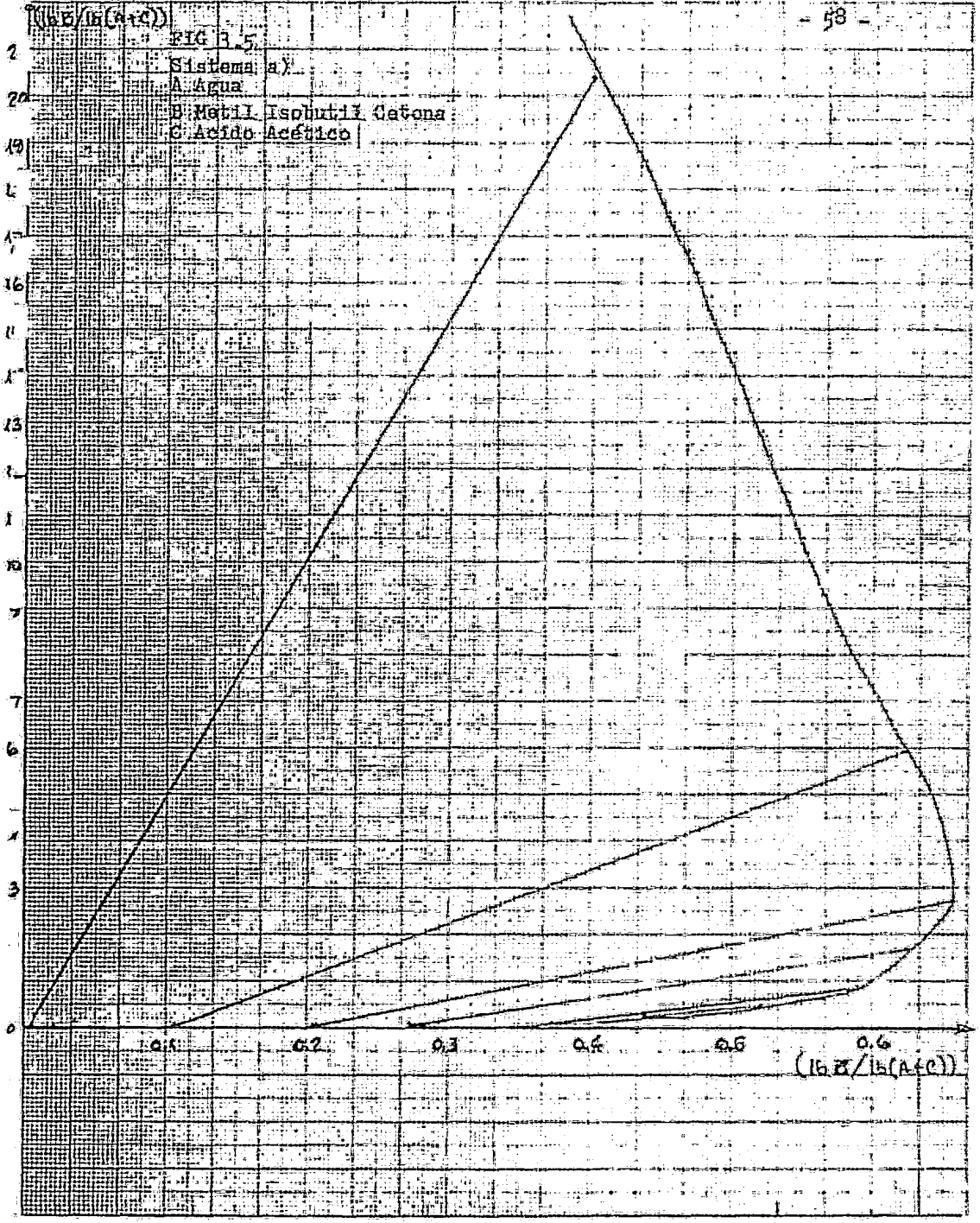
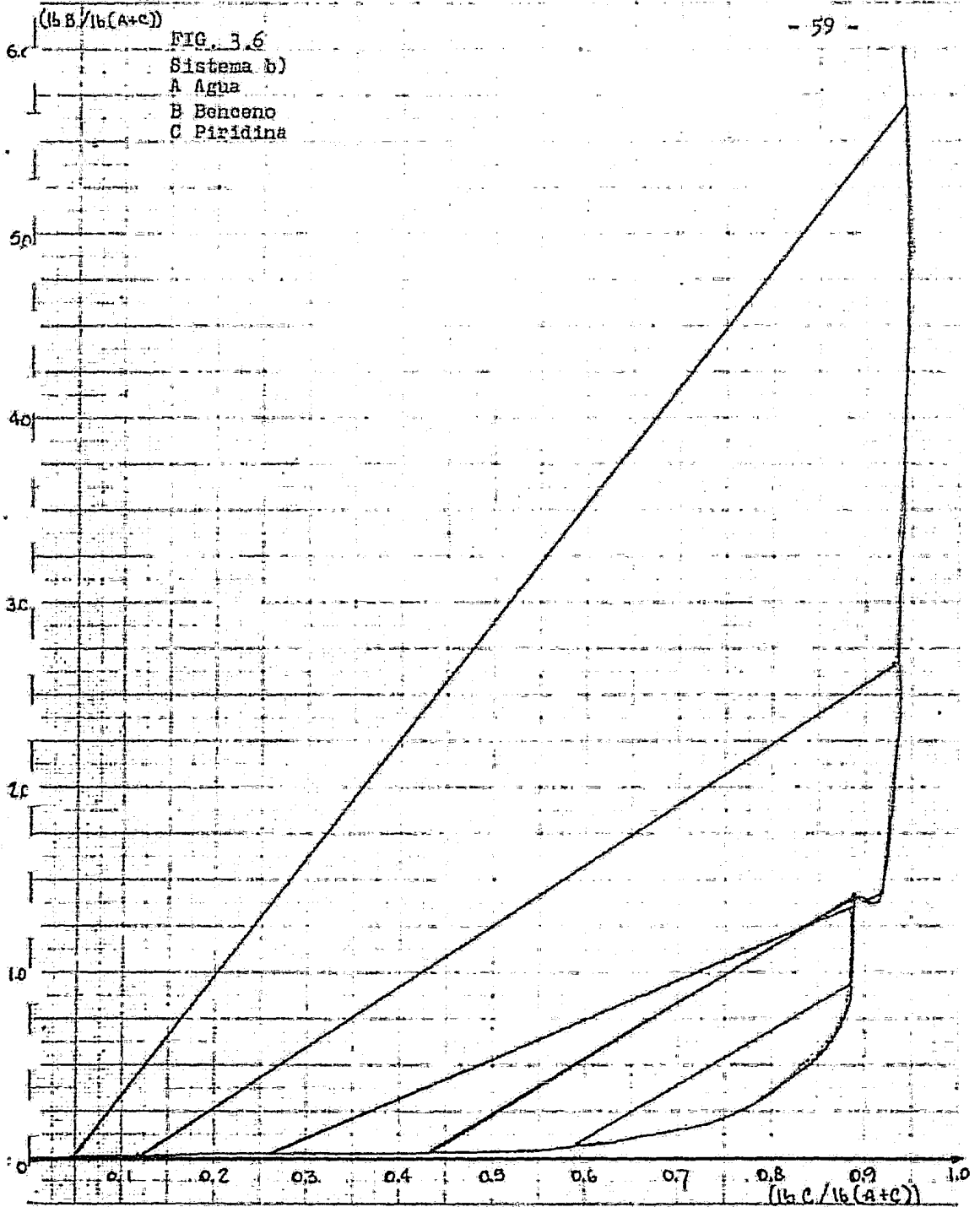


FIG. 3.4





(lb B/lb (A+C))

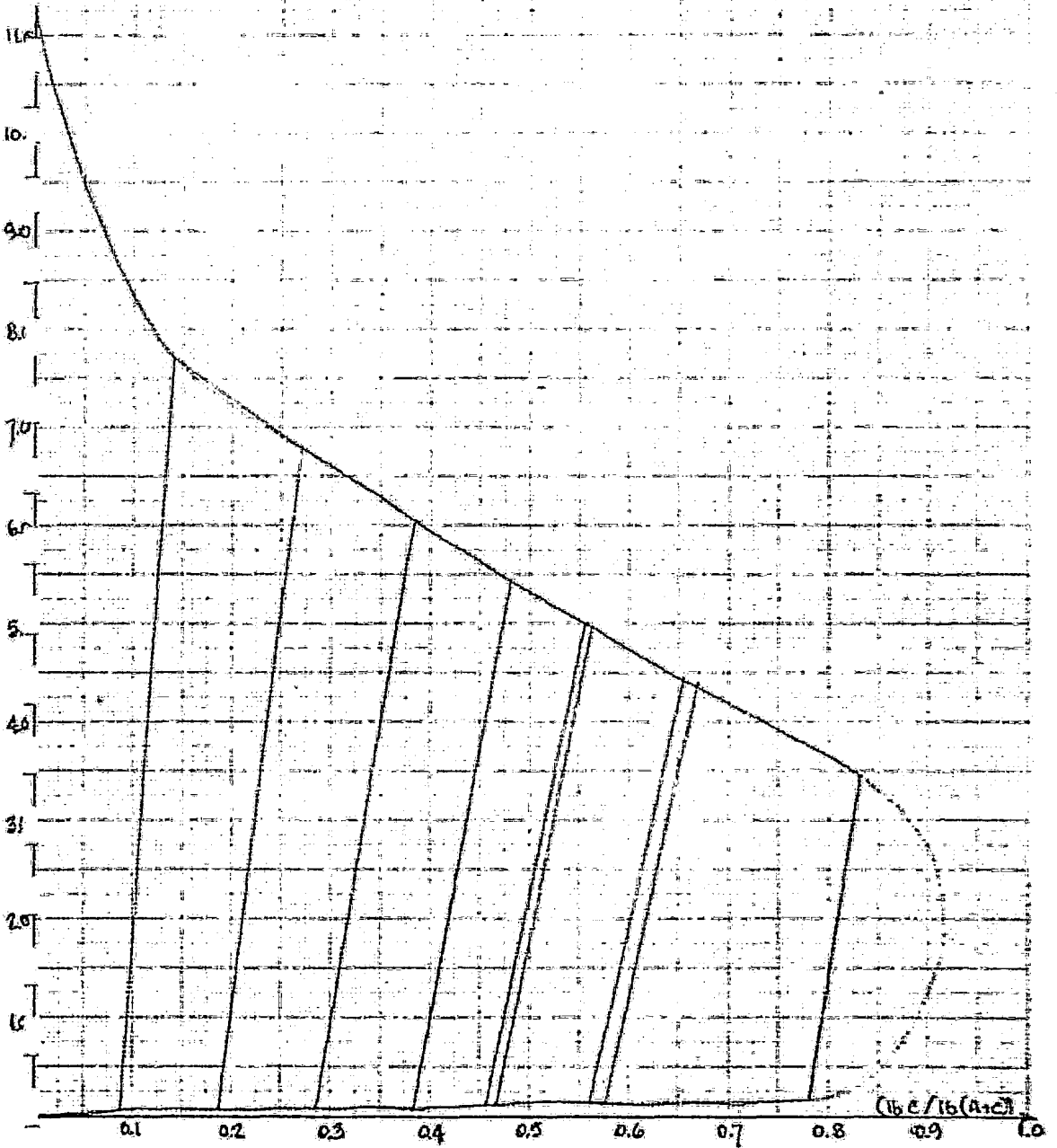
FIG. 3.7

Sistema c)

A Etil Benceno

B Etilén Glicol

C Estireno





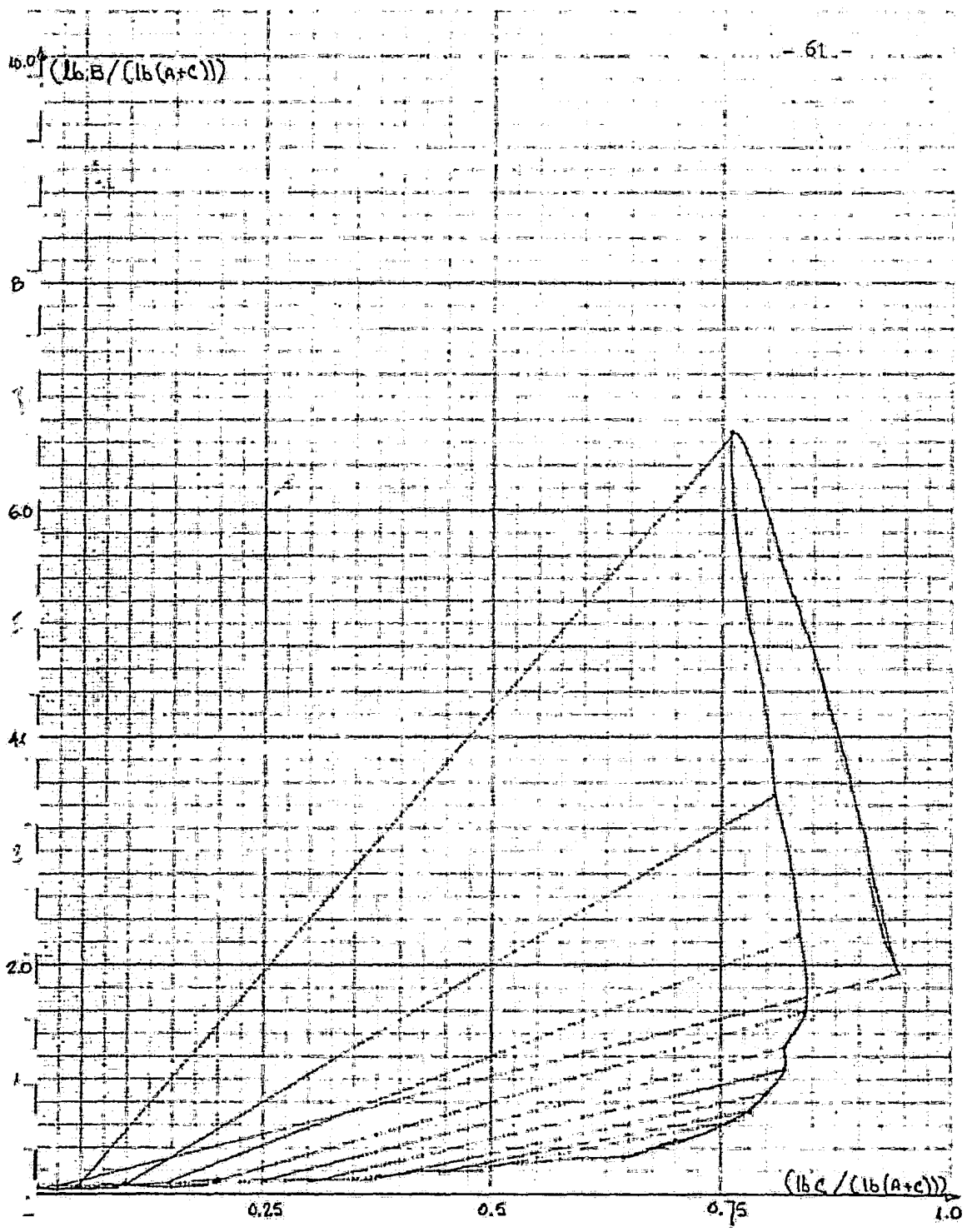


FIG. 3.9

Sistema a)

A Agua

B Metil Isobutil Cetona

C Acido Acético

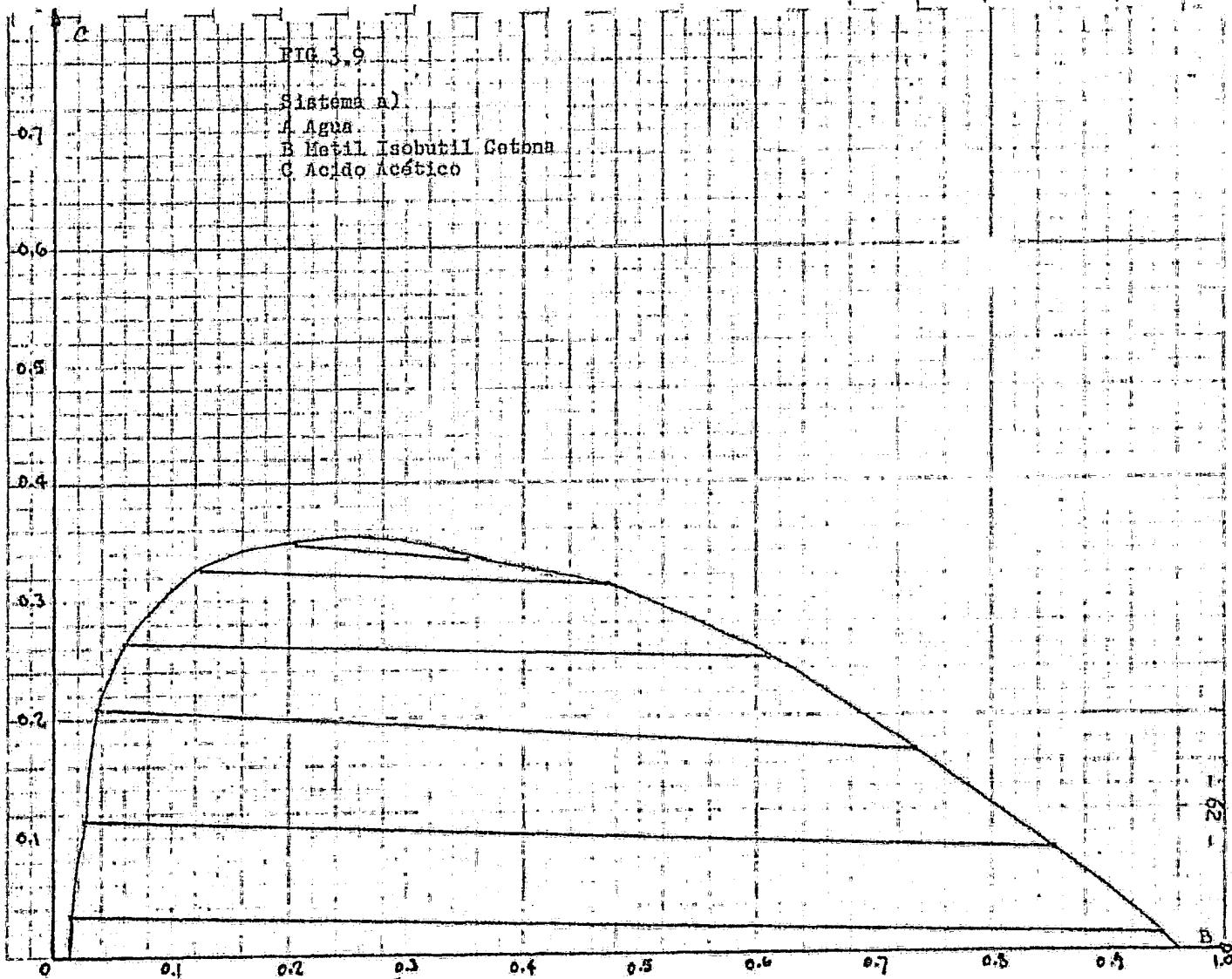


FIG. 3.10

Sistema b)

A Agua

B Benceno

C Piridina

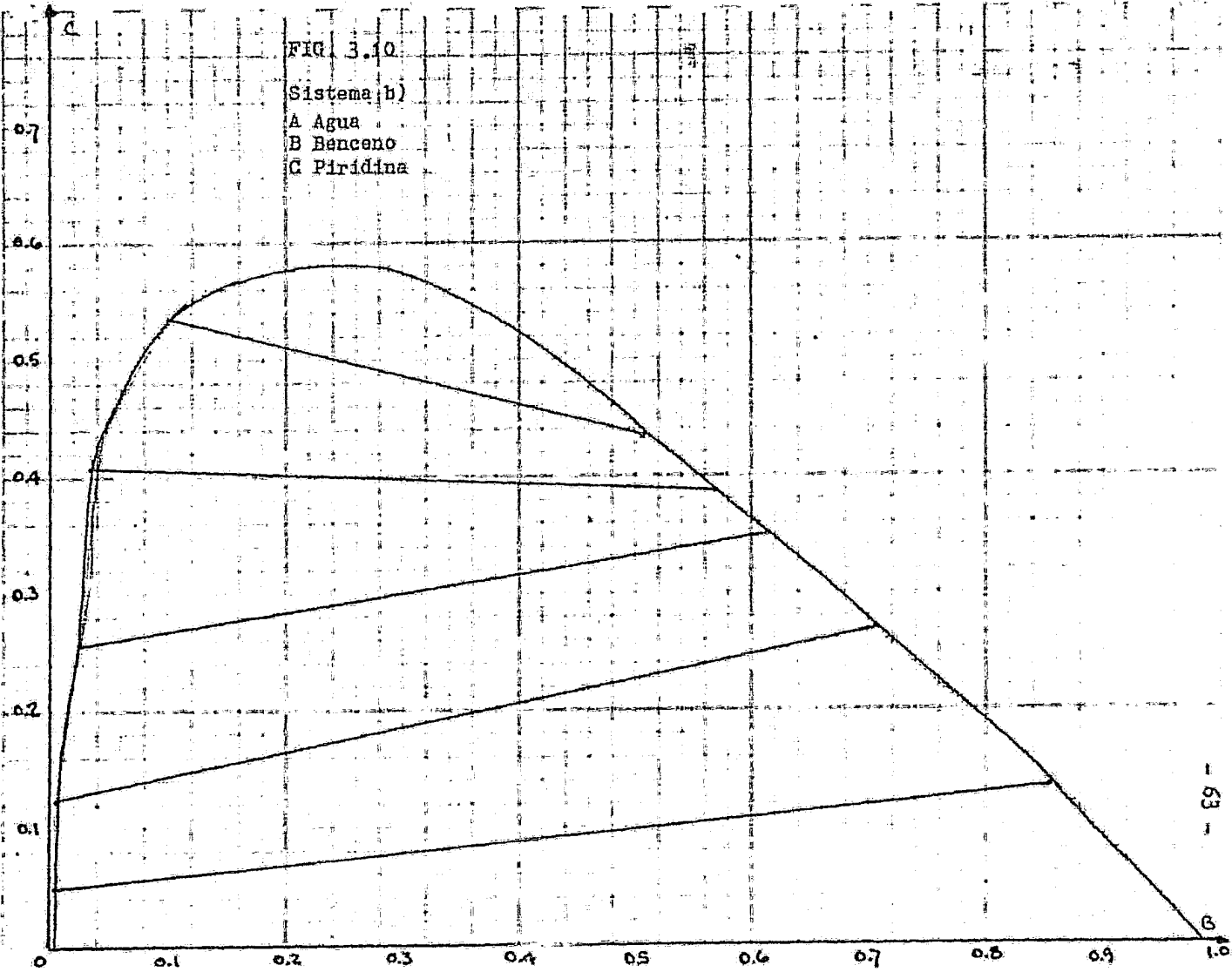
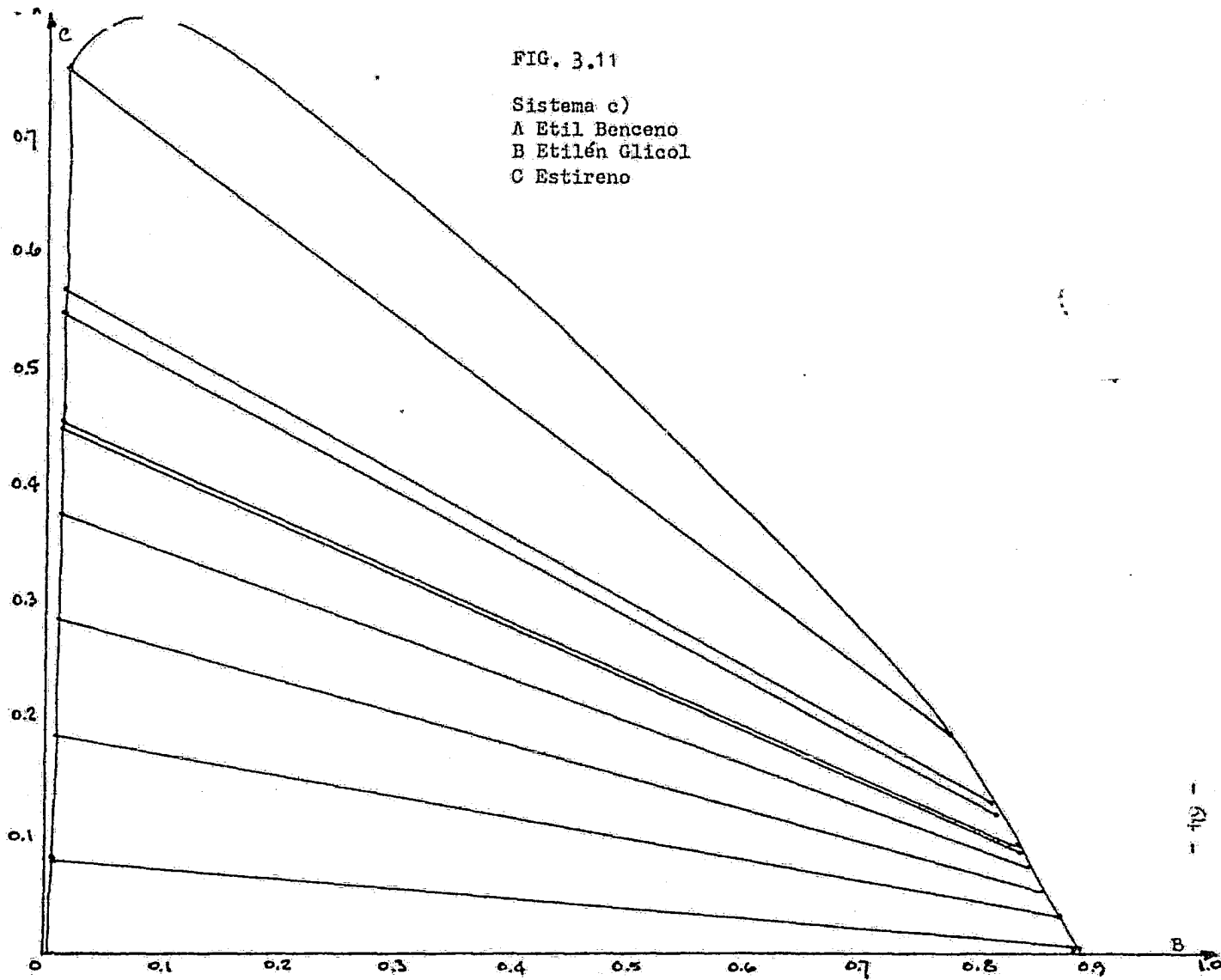


FIG. 3.11

Sistema c)  
A Etil Benceno  
B Etilén Glicol  
C Estireno





### 3.2.1 Modelo matemático

(Estimación de parámetros)

Como se puede observar en las gráficas, es muy difícil poder predecir el modelo matemático, además de los verdaderos trazos de las curvas si no se cuenta con suficiente información. Teniendo el modelo matemático que describe el diagrama de equilibrio físico entonces el sistema de ecuaciones simultáneas descrito en el capítulo anterior estará completo. Se tratará de encontrar por diferentes métodos de ajuste la ecuación o ecuaciones que describan las curvas de equilibrio y se analizarán para encontrar el método óptimo que proporcione resultados confiables para nuestros propósitos.

Los métodos de ajuste de modelos que se utilizarán y analizarán para lograr encontrar la ecuación o ecuaciones son:

- i) Diferencias Finitas Divididas
- ii) Mínimos Cuadrados

Debido a que son los métodos más usuales para ajustar puntos de curvas a modelos matemáticos.

3.2.1. Técnicas de ajuste de modelos.

a). Diferencias Finitas Divididas.

Es una técnica que se basa en la aproximación de las derivadas de una función por medio de Diferencias Finitas Divididas, obteniendo con esto un polinomio interpolante a partir de la expansión en series de Taylor. Dicho polinomio se conoce como Polinomio Fundamental de Newton y es el siguiente:

$$\begin{aligned}
 f(X) = & f X_0 + (X - X_0) f X_1, X_0 + \\
 & (X - X_0) (X - X_1) f X_2, X_1, X_0 + \dots + \\
 & (X - X_{n-1}) (X - X_{n-2}) \dots (X - X_0) \\
 & f X_n, X_{n-1}, \dots, X_0 \quad \dots(3.1)
 \end{aligned}$$

en donde n es el grado del polinomio y las diferencias se calculan de acuerdo a la tabla 3.9.

Orden	Notación	Definición
0	$f X_0$	$f(X_0)$
1	$f X_1, X_0$	$\frac{f X_1 - f X_0}{X_1 - X_0}$
2	$f X_2, X_1, X_0$	$\frac{f X_2, X_1 - f X_1, X_0}{X_2 - X_0}$
3	$f X_3, X_2, X_1, X_0$	$\frac{f X_3, X_2, X_1 - f X_2, X_1, X_0}{X_3 - X_0}$
.		
.		
.		
n	$f X_n, X_{n-1}, \dots, X_1, X_0$	$\frac{f X_n, X_{n-1}, \dots, X_1 - f X_{n-1}, \dots, X_0}{X_n - X_0}$

TABLA 3.9

b). Mínimos cuadrados.

Este método, para ajustar un modelo matemático a una curva, es hasta cierto punto el mas sencillo, la única complicación sería el hecho de que es necesario hacer diferentes pruebas para tratar de ajustar diferentes modelos, uno para cada grado de la ecuación.

Como su nombre lo indica, el método busca -- que la suma del cuadrado de las diferencias entre los puntos observados y calculados tiendan a cero, esto es:

$$\sum_{i=1}^n (y_0 - y_i)^2 \rightarrow 0 \quad \dots(3.2)$$

En donde  $y_i$  es la ordenada del punto calculado,  $y_0$  es la ordenada del punto observado experimentalmente y  $n$  es el número de puntos por ajustar.

Es obvio que no se tratará de ajustar líneas rectas para los diagramas de equilibrio de las tablas 3.1 a 3.8, figuras 3.5 a 3.12, por lo que se usará modelos matemáticos para curvas, en caso de que no se ajuste el modelo de segundo orden probaremos de tercer, cuarto, etc., hasta que se ajuste el modelo a la curva lo mas posible.

La deducción de las ecuaciones normales para el ajuste de una ecuación de segundo grado es el siguiente:



El modelo general para una ecuación de segundo orden es:

$$y_1 = A_0 + A_1X + A_2X^2 \quad \dots(3.3)$$

Sustituyendo la ecuación (3.3) en la (3.2) - se obtiene:

$$\sum_{i=1}^n (y_0 - A_0 - A_1X - A_2X^2)^2 \rightarrow 0 \quad \dots(3.4)$$

Para hacer que la suma de las diferencias dé el mínimo, derivamos parcialmente a la ecuación (3.4), que llamaremos S, con respecto a  $A_0$ ,  $A_1$  y  $A_2$  e igualamos las derivadas a cero.

$$\frac{\partial S}{\partial A_0} = 2 \sum_{i=1}^n (y_0 - A_0 - A_1X - A_2X^2) (-1) = 0 \quad \dots(3.5)$$

$$\frac{\partial S}{\partial A_1} = 2 \sum_{i=1}^n (y_0 - A_0 - A_1X - A_2X^2) (-X) = 0 \quad \dots(3.6)$$

$$\frac{\partial S}{\partial A_2} = 2 \sum_{i=1}^n (y_0 - A_0 - A_1X - A_2X^2) (-X^2) = 0 \quad \dots(3.7)$$

Dividiendo estas ecuaciones entre (-2), desarrollando las sumas y reacomodando nos queda:

$$\sum_{i=1}^n y_0 = nA_0 + A_1 \sum_{i=1}^n X + A_2 \sum_{i=1}^n X^2 \quad \dots(3.8)$$

$$\sum_{i=1}^n y_0 X = A_0 \sum_{i=1}^n X + A_1 \sum_{i=1}^n X^2 + A_2 \sum_{i=1}^n X^3 \quad \dots(3.9)$$

$$\sum_{i=1}^n y_0 X^2 = A_0 \sum_{i=1}^n X^2 + A_1 \sum_{i=1}^n X^3 + A_2 \sum_{i=1}^n X^4 \quad \dots(3.10)$$

Las ecuaciones (3.8), (3.9) y (3.10) son las llamadas ecuaciones normales, en donde tenemos un sistema definido de tres ecuaciones con tres incógnitas que son -- los coeficientes del modelo matemático que describen a la ecuación de segundo grado, ecuación (3.3). En caso de que el ajuste no se realice satisfactoriamente usaremos entonces las ecuaciones normales para un ajuste de una ecuación de tercer grado, las cuales son:

$$\sum_{i=1}^n y_0 = nA_0 + A_1 \sum_{i=1}^n X + A_2 \sum_{i=1}^n X^2 + A_3 \sum_{i=1}^n X^3 \quad \dots(3.11)$$

$$\sum_{i=1}^n y_0 X = A_0 \sum_{i=1}^n X + A_1 \sum_{i=1}^n X^2 + A_2 \sum_{i=1}^n X^3 + A_3 \sum_{i=1}^n X^4 \quad \dots(3.12)$$

$$\sum_{i=1}^n y_0 X^2 = A_0 \sum_{i=1}^n X^2 + A_1 \sum_{i=1}^n X^3 + A_2 \sum_{i=1}^n X^4 + A_3 \sum_{i=1}^n X^5 \quad \dots(3.13)$$

$$\sum_{i=1}^n y_0 X^3 = A_0 \sum_{i=1}^n X^3 + A_1 \sum_{i=1}^n X^4 + A_2 \sum_{i=1}^n X^5 + A_3 \sum_{i=1}^n X^6 \quad \dots(3.14)$$

Estas ecuaciones se deducen de la ecuación general de tercer grado y siguiendo el mismo tratamiento que se le dió a la ecuación general de segundo orden. La ecuación general de tercer grado es la siguiente:

$$y_i = A_0 + A_1 X + A_2 X^2 + A_3 X^3 \quad \dots(3.15)$$

Como podemos notar, las ecuaciones normales de un ajuste de tercer grado pueden obtenerse a partir de las ecuaciones normales de segundo orden de la siguiente --

forma.

A la ecuación (3.8) se le suma el término  $A_3 \sum_{i=1}^n X^3$ , a la ecuación (3.9) se le suma el término  $A_3 \sum_{i=1}^n X^4$ , a la (3.10) se le suma el término  $A_3 \sum_{i=1}^n X^5$  y se adiciona la ecuación (3.11) que se puede obtener multiplicando la anterior, (3.13) por X.

Si queremos encontrar las ecuaciones normales para un ajuste de cuarto grado, así como para grados mayores, basta seguir con la regla anterior, o si se prefiere, se puede seguir el proceso para la deducción de las ecuaciones normales.

Para resolver el sistema de ecuaciones simultáneas dadas por las ecuaciones normales existen varios métodos numéricos que son: Eliminación Gaussiana, Gauss-Seidel, Gauss-Jordan, etc.

### 3.3. Comparación de técnicas.

Cada una de las técnicas mencionadas anteriormente corresponde a un enfoque de aproximación del comportamiento de modelos matemáticos a un conjunto de datos experimentales.

La técnica de Diferencias Finitas Divididas obtiene un polinomio que pasa por los puntos experimentales (la suma residual de cuadrados es cero), pero no nece-

sariamente representará a los valores intermedios entre punto y punto por lo que el polinomio podría presentar oscilaciones.

Dado que en el muestreo experimental puede existir error, implica que al calcular un polinomio, este error se esté conservando y tal vez hasta aumentando.

La técnica de mínimos cuadrados aproxima un modelo al conjunto de puntos de manera tal que se cauce menos error en la representación de los puntos, pero no necesariamente que pase por ellos, de tal forma que el error experimental es absorbido en este análisis.

### 3.3.1. Selección de la técnica de ajuste.

Se hicieron dos programas de computadora, uno para cada técnica y se compararon los resultados obtenidos, observándose una mayor representatividad de los datos por la técnica de mínimos cuadrados, por lo que se seleccionó ésta como técnica de ajuste.

El programa de computadora usada para ésta técnica de ajuste se muestra en el Apéndice I. Este programa está diseñado para que presente los resultados parciales en los ajustes de cada grado de polinomio, desde el ajuste de segundo hasta noveno grado.

#### 3.3.1.1. Aplicación en base libre de disolvente.

Los resultados finales son los siguientes.

\*\*\* CURVA DE REFINAÇÃO \*\*\*

-73-

DATOS DE EQUILIBRIO

AGUA	M-IB-CETONA	ACIDO ACETICO
0.75450	0.01550	0.00000
0.75450	0.01700	0.02050
0.65800	0.02500	0.11700
0.75700	0.03800	0.20500
0.67800	0.06000	0.26200
0.25000	0.12200	0.32800
0.42900	0.22500	0.34600

-73-

ERROR MINIMO = 0.0000000000 CORRESPONDIENTE AL AJUSTE DE GRADO 7

LOS COEFICIENTES DE LA CURVA DE MEJOR AJUSTE SON:

X( 1 ) =	0.0157440
X( 2 ) =	0.0270385
X( 3 ) =	1.0798790
X( 4 ) =	-5.3243205
X( 5 ) =	-25.4191682
X( 6 ) =	321.0358780
X( 7 ) =	-912.7915295
X( 8 ) =	865.9258956

\*\*\* CURVA DE EXTRACCION \*\*\*

DATOS DE EQUILIBRIO

AGUA	M-IB-CETONA	ACIDO ACETICO
0.02120	0.97880	0.00000
0.02800	0.95330	0.01070
0.05400	0.85700	0.08900
0.09200	0.73500	0.17300
0.14500	0.60900	0.24600
0.22000	0.47200	0.30700
0.31000	0.35400	0.33600

ERROR MINIMO = 4.8366024675 CORRESPONDIENTE AL AJUSTE DE GRADO 9

LOS COEFICIENTES DE LA CURVA DE MEJOR AJUSTE SON:

X( 1 ) =	46.1698460
X( 2 ) =	-91778.4149204
X( 3 ) =	953992.5760126
X( 4 ) =	-34097.2678766
X( 5 ) =	-2742034.6223168
X( 6 ) =	2713551.8887560
X( 7 ) =	3219228.9258960
X( 8 ) =	-1756252.5244736
X( 9 ) =	-4152690.2399488
X( 10 ) =	7219204.4488064



\*\*\* CURVA DE REF. (WATER) \*\*\*

DATOS DE EQUILIBRIO

AGUA	BENCENO	PIRIDINA
0.94700	0.00200	0.05100
0.67200	0.00500	0.12200
0.41600	0.02500	0.25400
0.54500	0.05500	0.41700
0.56300	0.10000	0.54700

11

ERROR MINIMO = 0.0000000000 CORRESPONDIENTE AL AJUSTE DE GRADO 8

LOS COEFICIENTES DE LA CURVA DE MEJOR AJUSTE SON:

X( 1 ) =	0.0042231
X( 2 ) =	-0.0925105
X( 3 ) =	1.0118505
X( 4 ) =	-0.9302321
X( 5 ) =	-1.3133010
X( 6 ) =	-2.4465277
X( 7 ) =	1.4030679
X( 8 ) =	16.7999625
X( 9 ) =	-10.230747

\*\*\* CURVA DE EXTRACIÓ \*\*\*

DATOS DE EQUILIBRIO

AGUA	BENCENO	PIRIDINA
0.00750	0.85350	0.15900
0.01800	0.71200	0.27000
0.03100	0.61600	0.35300
0.04800	0.56800	0.38400
0.05800	0.50400	0.43200

ERROR MINIMO = 0.1064230845 CORRESPONDIENTE AL AJUSTE DE GRADO 7

LOS COEFICIENTES DE LA CURVA DE MEJOR AJUSTE SON:

X( 1 ) = 39590.8288636

X( 2 ) = -177439.8267928

X( 3 ) = 262709.9740864

X( 4 ) = -796135.6599444

X( 5 ) = 139857.7481440

X( 6 ) = -220734.0086428

X( 7 ) = 165564.6648568

X( 8 ) = 56041.5762412

\*\*\* CURVA DE REFINADO \*\*\*

DATOS DE EQUILIBRIO

ETIL BENCENO	ETILEN GLICOL	ESTIRENO
0.90560	0.00810	0.08630
0.80400	0.00930	0.18670
0.70490	0.01000	0.28510
0.60930	0.01090	0.37980
0.53550	0.01200	0.45250
0.52960	0.01200	0.45040
0.43290	0.01390	0.55320
0.41510	0.01400	0.57090
0.21600	0.01800	0.76000

ERROR MINIMO = 0.000000066 CORRESPONDIENTE AL AJUSTE DE GRADO 9

LOS COEFICIENTES DE LA CURVA DE MEJOR AJUSTE SON:

$$X( 1 ) = -0.0023790$$

$$X( 2 ) = 0.2519892$$

$$X( 3 ) = -2.1772725$$

$$X( 4 ) = 9.2227142$$

$$X( 5 ) = -18.2451915$$

$$X( 6 ) = 9.5993344$$

$$X( 7 ) = 14.2717777$$

$$X( 8 ) = 1.1916749$$

$$X( 9 ) = -44.4805942$$

$$X( 10 ) = 32.0495508$$

\*\*\* CURVA DE EXTRACCIÓN \*\*\*

DATOS DE EQUILIBRIO

ETIL BENCENO	ETILEN GLICOL	ESTIRENO
0.09850	0.88510	0.01640
0.09310	0.87200	0.03490
0.08720	0.85800	0.05480
0.08070	0.84480	0.07450
0.07350	0.83400	0.09250
0.07310	0.83200	0.09490
0.06300	0.81700	0.12000
0.05060	0.81400	0.12540
0.03730	0.77600	0.18620

ERROR MINIMO = 0.0004778925 CORRESPONDIENTE AL AJUSTE DE GRADO 8

LOS COEFICIENTES DE LA CURVA DE MEJOR AJUSTE SON:

X( 1 ) =	11.2667858
X( 2 ) =	-55.0394298
X( 3 ) =	341.0260232
X( 4 ) =	-1151.9983009
X( 5 ) =	1744.4769528
X( 6 ) =	-126.0636425
X( 7 ) =	-3111.4308529
X( 8 ) =	3766.9239679
X( 9 ) =	-1427.4163003



DATOS DE EQUILIBRIO

AGUA	4-13-CETONA	DIETIL CETONA
0.98000	0.02000	0.00000
0.95500	0.02200	0.02300
0.94000	0.02500	0.03500
0.91500	0.03000	0.09500
0.82000	0.03500	0.14500
0.76000	0.04000	0.20000
0.71500	0.04500	0.24000
0.65000	0.05000	0.30000
0.57500	0.07500	0.35000
0.50500	0.09700	0.39800
0.44500	0.12500	0.43000
0.26500	0.25500	0.48000

LOS COEFICIENTES DE LA CURVA DE MEJOR AJUSTE SON:

$$X( 1 ) = 0.0193402$$

$$X( 2 ) = 0.3721164$$

$$X( 3 ) = -11.0059294$$

$$X( 4 ) = 155.4401491$$

$$X( 5 ) = -1007.0238555$$

$$X( 6 ) = 5093.4059105$$

$$X( 7 ) = -3645.9001188$$

$$X( 8 ) = -2505.2174765$$

$$X( 9 ) = 9194.8117111$$

$$X( 10 ) = -5915.7719724$$

DATOS DE EQUILIBRIO

AGUA	M-12-CETONA	DIETIL CETONA
0.02000	0.98000	0.00000
0.02500	0.92950	0.04550
0.03000	0.87000	0.10000
0.04000	0.78000	0.19000
0.05000	0.70000	0.25000
0.06000	0.62000	0.32000
0.07500	0.56500	0.36000
0.08500	0.51500	0.40000
0.10500	0.46500	0.43000
0.13000	0.41500	0.45500
0.14000	0.39500	0.46500
0.26500	0.25500	0.48000

ERROR MINIMO = 77.0777571488 CORRESPONDIENTE AL AJUSTE DE GRADO 9

LOS COEFICIENTES DE LA CURVA DE MEJOR AJUSTE SON:

X( 1 ) = 49.0000481

X( 2 ) = -126952.6496880

X( 3 ) = 290677.2181280

X( 4 ) = 347397.6159136

X( 5 ) = -989335.9831160

X( 6 ) = -201184.8149440

X( 7 ) = 1029453.9918320

X( 8 ) = 129740.4178648

X( 9 ) = -1253467.1114304

X( 10 ) = 469442.1577280

Haciendo un análisis de estos resultados podemos observar que:

Para el sistema a).

La ecuación de la curva de refinado de mejor ajuste es:

$$Y = 0.015744 + 0.0270385 X + 1.079879 X^2 \\ - 5.3243205 X^3 - 25.4191682 X^4 + 321.035875 X^5 \\ - 912.7915293 X^6 + 866.9258956 X^7. \quad \dots(3.16)$$

y la ecuación de la curva de extracto de mejor ajuste es:

$$Y = 46.169846 - 91778.4149504 X + 453592.5760128 X^2 \\ - 34897.2678766 X^3 - 2742034.6223168 X^4 \\ + 2913551.888736 X^5 + 3319228.928896 X^6 \\ - 1756252.5244736 X^7 - 9132690.2399488 X^8 \\ + 7519209.4488064 X^9. \quad \dots(3.17)$$

Donde Y es la relación B/(C+A) y X es la relación C/(C+A). A, B y C son las composiciones de estos componentes en fracción masa.

Para el sistema b).

La ecuación de la curva de refinado de mejor ajuste es:

$$\begin{aligned} Y = & 0.0042231 - 0.0925108 \bar{x} + 1.0118305 x^2 \\ & - 0.9302521 x^3 - 1.3135818 x^4 - 2.4463277 x^5 \\ & + 1.4030699 x^6 + 16.7999625 x^7 - 10.2500747 x^8 \\ & \dots(3.18) \end{aligned}$$

y la ecuación de la curva de extracto de mejor ajuste es:

$$\begin{aligned} Y = & 39590.8288636 - 177439.8267928 x \\ & + 262709.9740864 x^2 - 96135.6599944 x^3 \\ & - 139857.748144 x^4 + 220734.0086928 x^5 \\ & - 165569.6648568 x^6 + 56041.5762912 x^7. \dots(3.19) \end{aligned}$$

Para el sistema c).

La ecuación de la curva de refinado de mejor ajuste es:

$$\begin{aligned} Y = & - 0.002359 + 0.2519892 x - 2.1772925 x^2 \\ & + 9.2227142 x^3 - 18.2451513 x^4 + 9.5993344 x^5 \\ & + 14.2717777 x^6 + 1.1916749 x^7 - 44.4805942 x^8 \\ & + 32.0496508 x^9. \dots(3.20) \end{aligned}$$

y la ecuación de la curva de extracto de mejor ajuste es:

$$\begin{aligned} Y = & 11.2667858 - 55.0394298 x + 341.0260232 x^2 \\ & - 1151.9983009 x^3 + 1744.4769528 x^4 \\ & - 126.0636425 x^5 - 3111.4308329 x^6 \\ & + 3766.9239679 x^7 - 1427.4163803 x^8. \dots(3.21) \end{aligned}$$

Para el sistema d).

La ecuación de la curva de refinado de mejor ajuste es:

$$\begin{aligned}
 Y = & 0.0198402 + 0.3721164 X - 11.0039294 X^2 \\
 & + 156.4401491 X^3 - 1007.0238353 X^4 \\
 & + 3093.4059105 X^5 - 3643.9001188 X^6 \\
 & - 2305.2174965 X^7 + 9194.8117111 X^8 \\
 & - 5918.7719724 X^9. \quad \dots(3.22)
 \end{aligned}$$

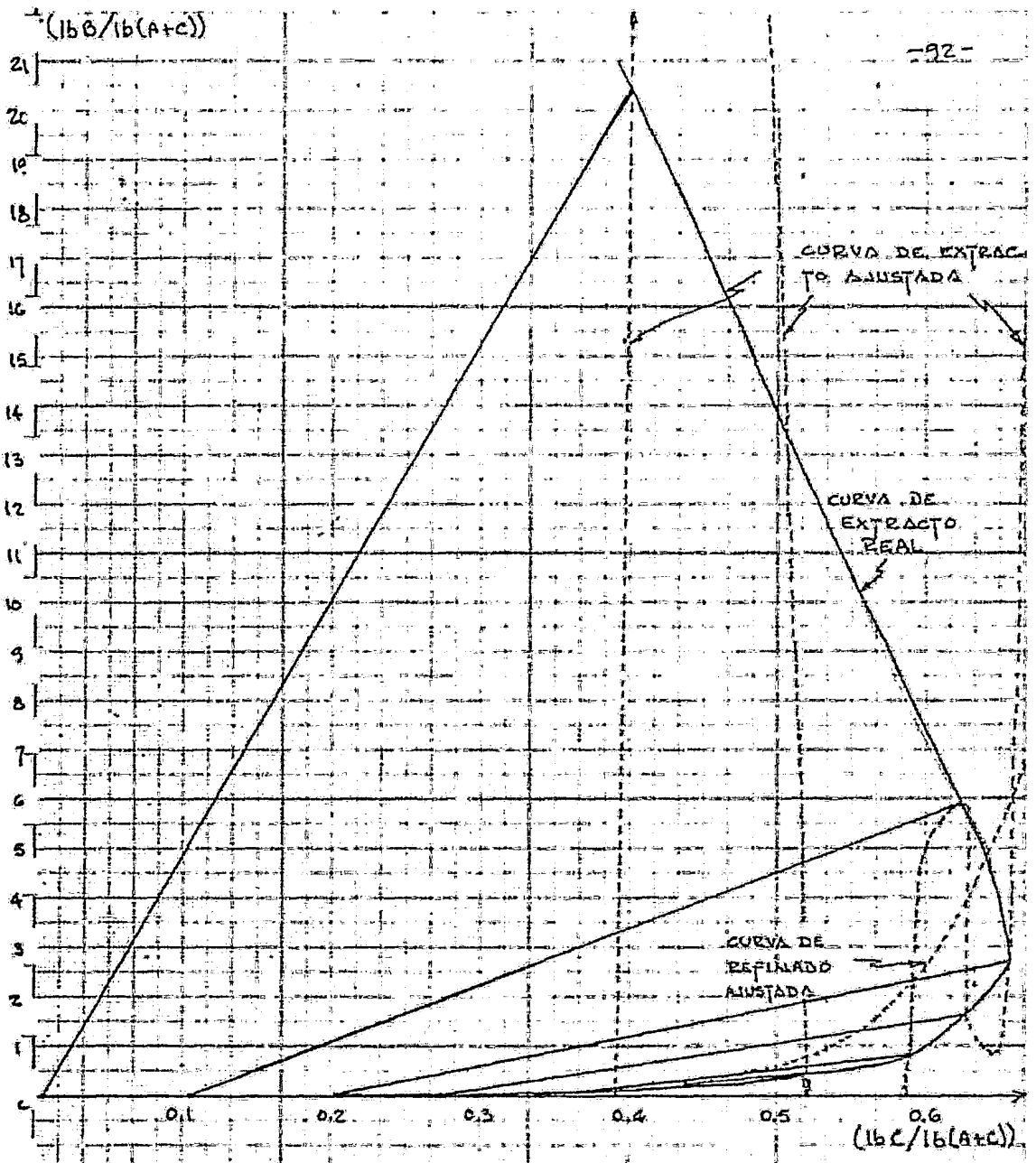
y la ecuación de la curva de extracto de mejor ajuste es:

$$\begin{aligned}
 Y = & 49.0000481 - 126952.649688 X + 290677.218128 X^2 \\
 & + 347397.6159136 X^3 - 989335.9831168 X^4 \\
 & - 501184.814944 X^5 + 1629453.9918528 X^6 \\
 & + 129740.4178848 X^7 - 1253467.1114304 X^8 \\
 & + 469442.157728 X^9. \quad \dots(3.23)
 \end{aligned}$$

Al graficar estas ecuaciones sobre el diagrama de equilibrio del sistema correspondiente se podrá observar que tan cerca pasa la curva de la ecuación ajustada al trazo de la curva de equilibrio. Estas gráficas se encuentran en las figuras 3.13, 3.14, 3.15 y 3.16.

De las figuras 3.13 y 3.16 vemos que las curvas de refinado ajustadas siguen el trazo de las curvas de equilibrio correspondientes casi perfectamente. Sin embargo las curvas de extracto ajustadas se comportan totalmente diferente al trazo de los puntos de equilibrio correspondientes.

Las figuras 3.14 y 3.15 nos muestran un ajuste casi perfecto de las curvas de refinado y extracto a --



SISTEMA 2)

FIG. 313



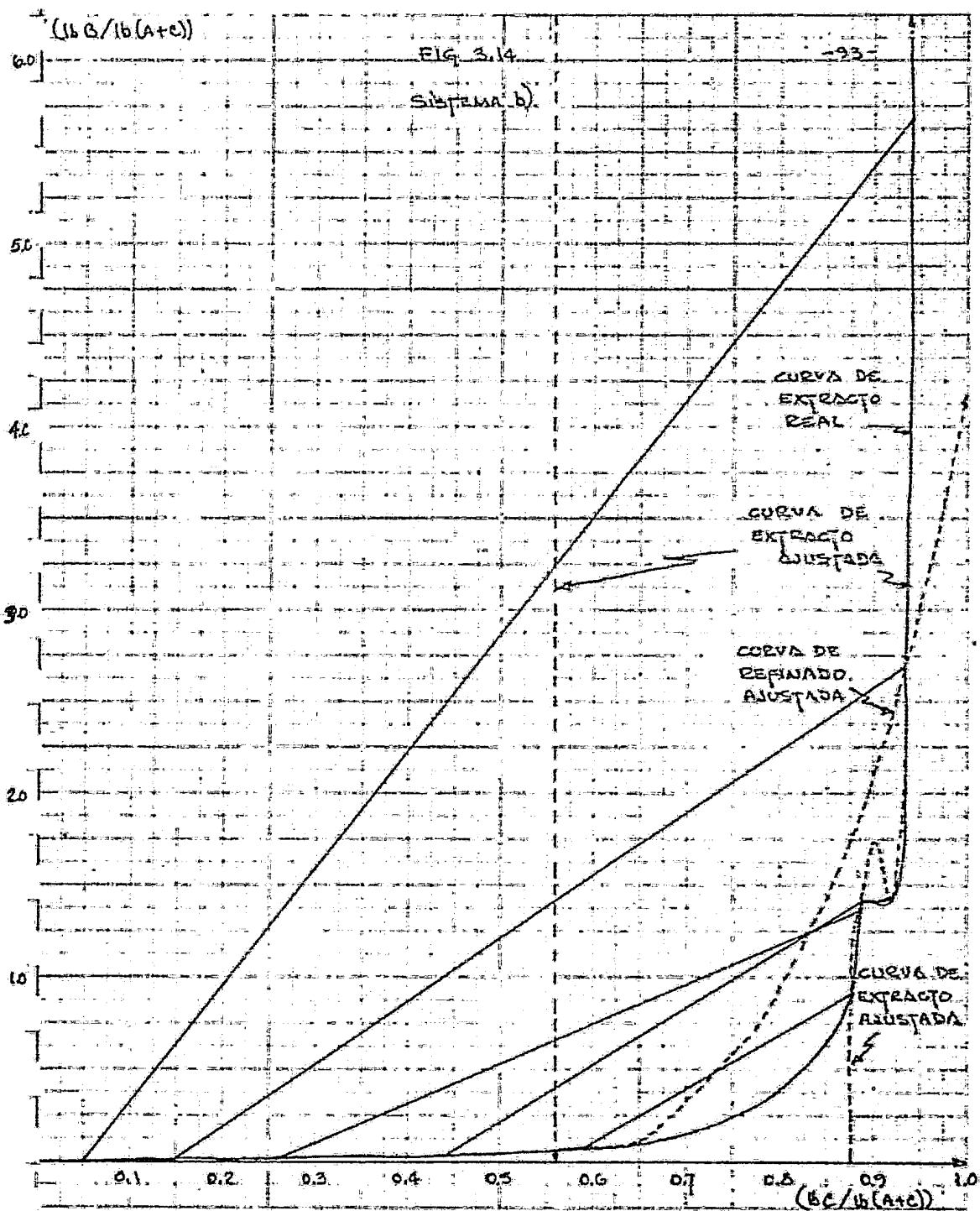


FIG. 3.15

SISTEMA c).

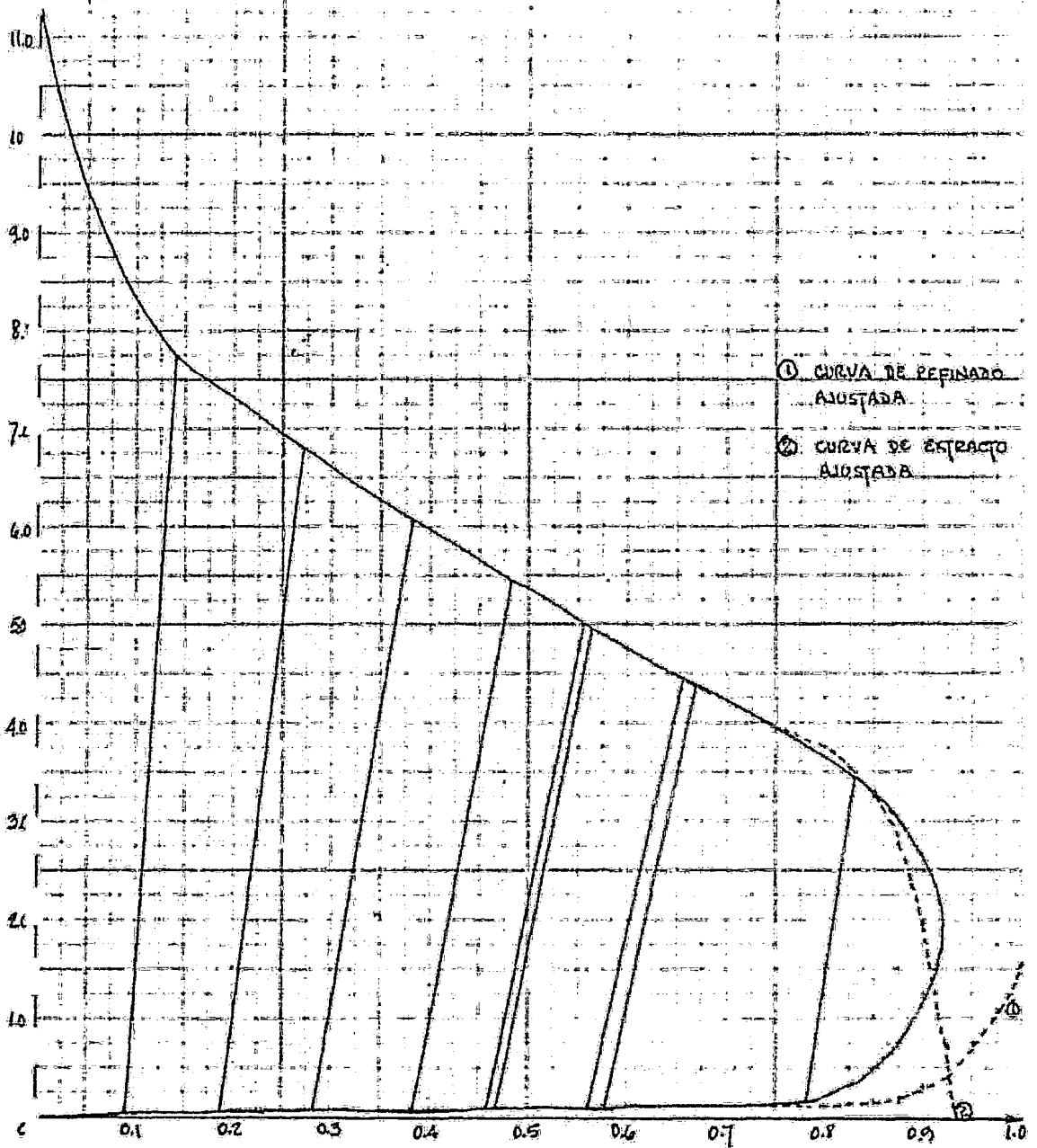
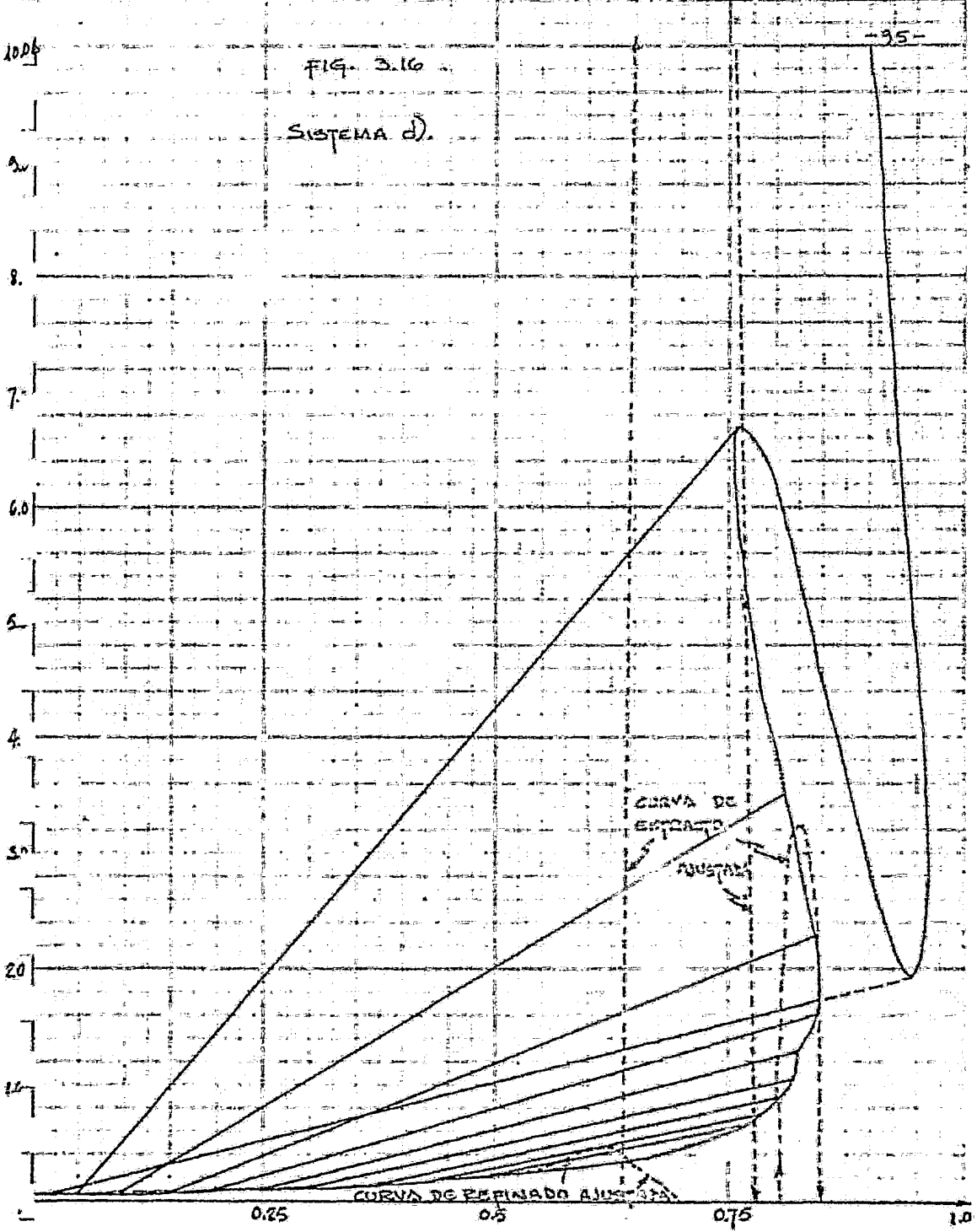


FIG. 3.16

SISTEMA d).



los trazos de las curvas de equilibrio correspondientes, a excepción de la región en donde se encuentra el punto de pliegue.

3.3.1.2. Aplicación del método utilizando -- concentraciones en fracción masa. (Diagrama Triángulo Rectangular).

Para este tipo de representación, los resultados que se obtienen son los siguientes:

\*\*\* CUOVA DE REFINANO \*\*\*

DATOS DE EQUILIBRIO

AGUA	M-IB-CETONA	ACIDO ACETICO
1.98451	0.11551	0.00400
1.98453	0.11700	0.02850
1.85811	0.12510	0.11710
1.75711	0.13811	0.20511
1.67811	0.16311	0.26210
1.55111	0.12211	0.32811
1.42511	0.22511	0.34410

ERROR MINIMO = 11.010151824 CORRESPONDIENTE AL AJUSTE DE GRADO 7

LOS COEFICIENTES DE LA CURVA DE MEJOR AJUSTE SON:

X( 1 ) =	-1.4472611
X( 2 ) =	46.8167887
X( 3 ) =	-1547.9164914
X( 4 ) =	29491.1122536
X( 5 ) =	-288292.1680972
X( 6 ) =	943521.1293952
X( 7 ) =	2518964.5336329
X( 8 ) =	-13699158.1731161

ERROR MINIMO = (0.00111)1.971 CORRESPONDIENTE AL AJUSTE DE GRADO 9

LOS COEFICIENTES DE LA CURVA DE MEJOR AJUSTE SON:

X( 1 ) =	-1.2298375
X( 2 ) =	4.3967724
X( 3 ) =	-11.5339988
X( 4 ) =	11.4756187
X( 5 ) =	2.8477111
X( 6 ) =	-13.4277282
X( 7 ) =	14.4139741
X( 8 ) =	-15.9191624
X( 9 ) =	13.4717736
X( 10 ) =	-4.5181121

\*\*\* CUPHA DE EXTRACTO \*\*\*

DATOS DE EQUILIBRIO

AGUA	MATERIA-CETONA	ACIDO ACETICO
0.02120	0.97880	0.00000
0.02500	0.95550	0.01870
0.03400	0.85700	0.08600
0.19200	0.73500	0.17300
0.14500	0.60900	0.24000
0.22100	0.47200	0.30000
0.31000	0.35400	0.33600



DATOS DE EQUILIBRIO

AGUA	BENCENO	PIRIDINA
1.947.1	1.132.13	1.151.11
1.872.1	1.106.11	1.122.11
1.716.1	1.125.19	1.259.11
1.545.1	1.138.1	1.417.11
1.363.1	1.111.11	1.537.11



DATOS DE EQUILIBRIO

AGUA	BENCENO	PIRIDINA
0.75%	0.8535%	0.1390%
0.18%	0.7129%	0.2791%
0.31%	0.6161%	0.3531%
0.48%	0.5689%	0.3841%
0.17%	0.5141%	0.4381%



\*\*\* CUPÓN DE DEFINIDO \*\*\*

SISTEMA (C).

COMPLETO

DATOS DE EQUILIBRIO

ETIL BENCENO	ETILEN GLICOL	ESTIRENO
1.97561	0.00811	0.18633
0.81400	1.10933	0.18678
0.71498	0.11022	3.28510
1.61930	0.01090	0.37501
0.53554	0.11211	1.45259
1.52967	0.01211	0.45743
1.43291	0.11391	0.55223
0.41813	0.11413	1.57194
0.21603	0.11813	0.76010

ERROR MINIMO = 0.0000714874 CORRESPONDIENTE AL AJUSTE DE GRADO 6

LOS COEFICIENTES DE LA CURVA DE MEJOR AJUSTE SON:

X( 1 ) = 41.5128351

X( 2 ) = -15797.4262149

X( 3 ) = 2366183.9104128

X( 4 ) = -81795231.7579264

X( 5 ) = 4167075952.2500618

X( 6 ) = 431272286303.6563456

X( 7 ) = -9595841625203.7321696

\*\*\* CUBA DE EXTRACTO \*\*\*

DATOS DE EQUILIBRIO

ETIL BENCENO	ETILEN GLICOL	ESTIRENO
0.05850	0.88510	0.01640
0.19310	0.87200	0.03490
0.38720	0.85890	0.05480
0.57130	0.84480	0.07450
0.75540	0.83400	0.09250
0.93950	0.83200	0.10490
1.12360	0.81700	0.12100
1.30770	0.81400	0.12540
1.49180	0.77650	0.18720

ERROR MINIMO = 0.000116424 CORRESPONDIENTE AL AJUSTE DE GRADO 9

LOS COEFICIENTES DE LA CURVA DE MEJOR AJUSTE SON:

X( 1 ) =	59.1732444
X( 2 ) =	-234.4394285
X( 3 ) =	191.5471441
X( 4 ) =	189.1705685
X( 5 ) =	45.6347695
X( 6 ) =	-712.7287941
X( 7 ) =	226.5233953
X( 8 ) =	598.7757941
X( 9 ) =	-419.6964933
X( 10 ) =	45.5885377



\*\*\* CUPOVA DE REFINADO \*\*\*

SISTEMA d.  
DE MATEMÁTICA

DATOS DE EQUILIBRIO

AGUA	M-IR-CETONA	DIMITIL CETONA
1.981.01	1.121.11	1.111.11
1.955.01	1.122.11	1.123.11
1.941.01	1.125.11	1.135.11
1.875.01	1.131.11	1.195.11
1.821.01	1.135.11	1.145.11
1.765.01	1.141.11	1.211.11
1.715.01	1.145.11	1.241.11
1.651.01	1.151.11	1.311.11
1.575.01	1.175.11	1.351.11
1.515.01	1.197.11	1.398.11
1.445.01	1.125.11	1.431.11
1.265.01	1.255.11	1.481.11

ERROR MINIMO = 0.003681048 CORRESPONDIENTE AL AJUSTE DE GRADO 7

LOS COEFICIENTES DE LA CURVA DE MEJOR AJUSTE SON:

X( 1 ) =	0.3887121
X( 2 ) =	-55.5334163
X( 3 ) =	2579.5531332
X( 4 ) =	-43872.8893733
X( 5 ) =	291399.4615418
X( 6 ) =	-65415.4854464
X( 7 ) =	-6573146.7924992
X( 8 ) =	173961.37.7791721

\*\*\* CURVA DE EXTRACCION \*\*\*

DATOS DE EQUILIBRIO

AGUA	M-IP-CETONA	DIMETIL CETONA
0.12000	0.98111	0.00000
0.02500	0.92777	0.04550
0.03000	0.87111	0.11000
0.14000	0.78111	0.18000
0.15000	0.73000	0.25000
0.06000	0.62111	0.32000
0.07500	0.56500	0.36000
0.08500	0.51500	0.40000
0.09500	0.46500	0.43000
0.12000	0.41500	0.45000
0.14000	0.39500	0.46500
0.07500	0.25500	0.48000

ERROR MÍNIMO = 0.00111719 CORRESPONDIENTE AL AJUSTE DE GRADO 9

LOS COEFICIENTES DE LA CURVA DE MEJOR AJUSTE SON:

X( 1 ) =	1.0548529
X( 2 ) =	3.6614661
X( 3 ) =	-2.4932495
X( 4 ) =	2.7149317
X( 5 ) =	27.1117566
X( 6 ) =	-47.4352632
X( 7 ) =	4.4815526
X( 8 ) =	62.2465197
X( 9 ) =	-62.7785931
X( 10 ) =	19.3933199

Analizando los resultados obtenidos observamos que:

Para el sistema a).

La ecuación de la curva de refinado de mejor ajuste es:

$$\begin{aligned} C = & - 0.4472601 + 46.8160887 B - 1540.9064914 B^2 \\ & + 29490.0022556 B^3 - 288202.1680072 B^4 \\ & + 943520.0293952 B^5 + 2518964.533632 B^6 \\ & - 13699158.070016 B^7. \end{aligned} \quad \dots(3.24)$$

y la ecuación de la curva de extracto de mejor ajuste es:

$$\begin{aligned} C = & - 0.2298075 + 4.3967724 B - 11.5359988 B^2 \\ & + 10.4756187 B^3 + 2.84771 B^4 - 13.4277282 B^5 \\ & + 14.4139741 B^6 - 15.9190624 B^7 + 13.4707736 B^8 \\ & - 4.5080121 B^9. \end{aligned} \quad \dots(3.25)$$

Donde . C es la composición del soluto y B la composición del diluyente, componentes C y B respectivamente, en fracción masa.

Para el sistema b).

La ecuación de la curva de refinado de mejor ajuste es:

$$\begin{aligned} C = & 0.0060356 + 24.1983972 B - 881.1711468 B^2 \\ & + 11561.3608441 B^3 - 21533.217732 B^4 \\ & + 3701190.6311168 B^5 - 39497109.20171152 B^6. \end{aligned}$$

...(3.26)

y la ecuación de la curva de extracto de mejor ajuste es:

$$\begin{aligned} C = & 4.0017414 - 15.5277549 B + 19.4089527 B^2 \\ & + 2.7545131 B^3 - 28.3435624 B^4 + 31.5168366 B^5 \\ & + 6.0997015 B^6 - 58.4117269 B^7 + 39.8410804 B^8. \end{aligned}$$

...(3.27)

Para el sistema c).

La ecuación de la curva de refinado de mejor ajuste es:

$$\begin{aligned} C = & 41.5128051 - 15790.426204 B + 2066083.9104128 B^2 \\ & - 81795231.7579264 B^3 - 4167075952.2500608 B^4 \\ & + 431272286303.6563456 B^5 \\ & - 9595840425203.7021696 B^6. \end{aligned}$$

...(3.28)

y la ecuación de la curva de extracto de mejor ajuste es:

$$\begin{aligned} C = & 59.1732444 - 234.4394285 B + 191.547144 B^2 \\ & + 189.1705685 B^3 + 45.6347695 B^4 - 702.728794 B^5 \\ & + 226.5233953 B^6 + 598.7757941 B^7 \\ & - 419.6964833 B^8 + 45.5885377 B^9. \end{aligned}$$

...(3.29)

Para el sistema d).

La ecuación de la curva de refinado de mejor ajuste es:

$$\begin{aligned}
 C = & 0.3887121 - 55.5334063 B + 2579.5581332 B^2 \\
 & - 43872.8893733 B^3 + 291399.4605408 B^4 \\
 & - 65415.4854464 B^5 - 6573146.7924992 B^6 \\
 & + 17396107.779072 B^7. \qquad \dots(3.30)
 \end{aligned}$$

y la ecuación de la curva de extracto de mejor ajuste es:

$$\begin{aligned}
 C = & 0.0508529 + 3.6614661 B - 9.4982495 B^2 \\
 & + 2.7149317 B^3 + 27.1117566 B^4 - 47.4052632 B^5 \\
 & + 4.4815526 B^6 + 62.2465092 B^7 - 62.7785931 B^8 \\
 & + 19.3983098 B^9. \qquad \dots(3.31)
 \end{aligned}$$

Al graficar las curvas de las ecuaciones --- ajustadas en las mismas gráficas de las curvas de equili--- brio correspondientes observamos lo siguiente.

La figura 3.17 nos muestra un ajuste casi -- perfecto para la curva de extracto, en cambio, la curva de refinado muestra un buen ajuste sólo hasta el quinto punto de equilibrio, después del cual la curva ajustada pasa por los dos últimos puntos, pero no sigue el trazo de la curva de solubilidad. Además vemos que por encima del último pun to de equilibrio ninguna de las curvas sigue el trazo de - la campana original.

La figura 3.18 nos muestra que la curva de - extracto ajustada solo pasa por los puntos de equilibrio - que se proporcionaron como datos, fuera de esta región la curva sigue otra trayectoria; lo mismo de refinado ajusta-

da pasa por todos los puntos de equilibrio, pero no sigue el trazo de la curva de solubilidad entre los puntos de equilibrio 4 y 5.

La figura 3.19A muestra la gráfica de la curva de extracto ajustada, la cual se sobrepone a todos los puntos de equilibrio, pero por encima del último punto no sigue la trayectoria de la curva de solubilidad. En la figura 3.19B observamos el ajuste realizado por la curva de refinado, vemos que existe un muy buen ajuste a los puntos de equilibrio, pero solo hasta el punto número 8, por encima de éste, la curva ajustada no sigue el trazo de la curva de solubilidad aunque sí pasa por el último punto, tampoco la curva ajustada sigue el trazo de equilibrio por debajo del primer punto. Hubo necesidad de ampliar la escala del eje X para poder apreciar el ajuste realizado.

La figura 3.20 muestra que la ecuación ajustada a la curva de refinado sigue un ajuste casi perfecto hasta el punto No. 8 de los datos de equilibrio, por arriba de este punto la curva pasa por todos los puntos restantes hasta el No. 11, pero no sigue el trazo de la curva de solubilidad. Al llegar a este punto la curva pasa a la parte negativa de Y para luego volver a estar en la parte positiva de Y y pasar por el punto de pliegue. Sin embargo, la ecuación de la curva de extracto ajustada pasa por todos los puntos de equilibrio siguiendo el trazo de la curva de solubilidad.



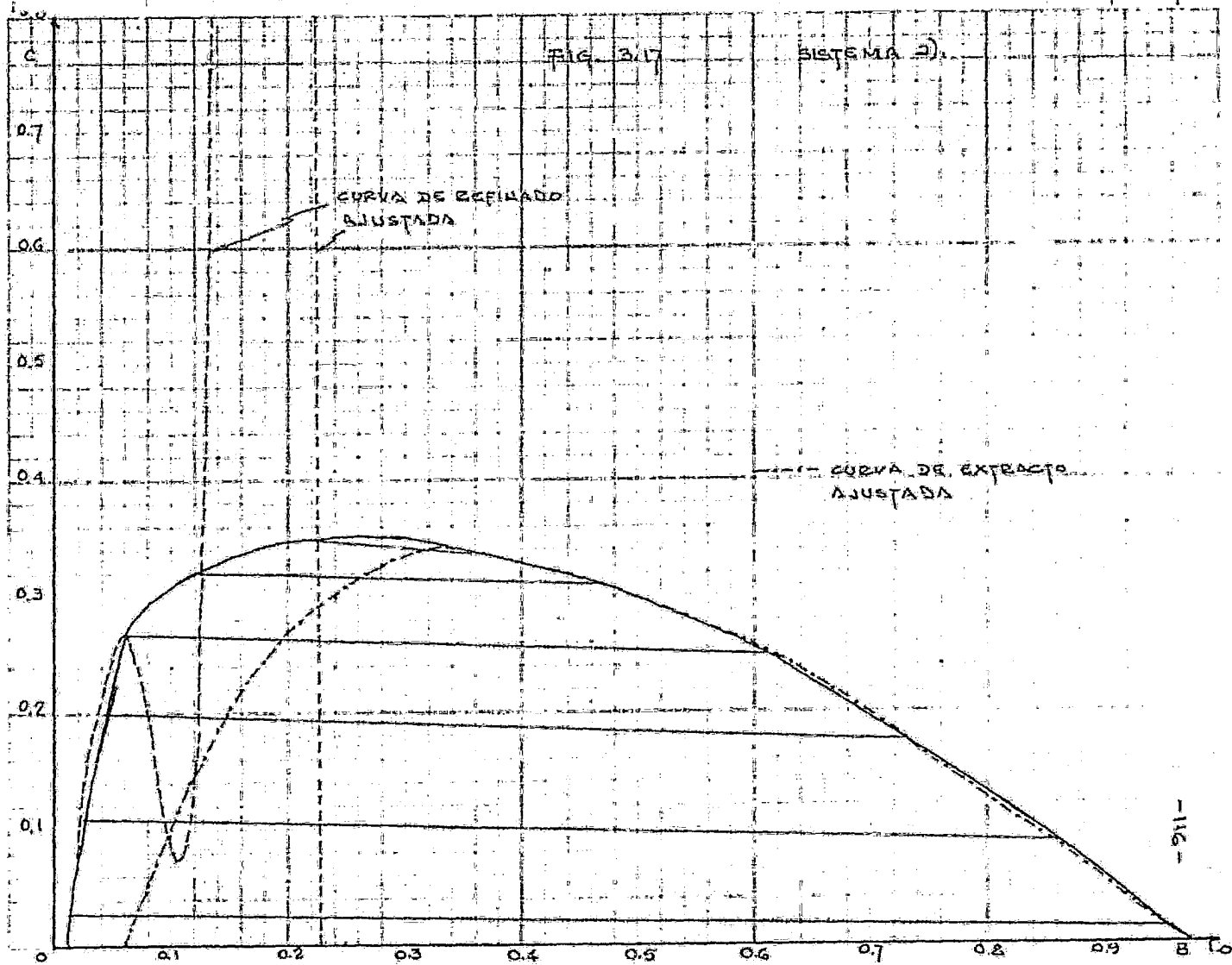
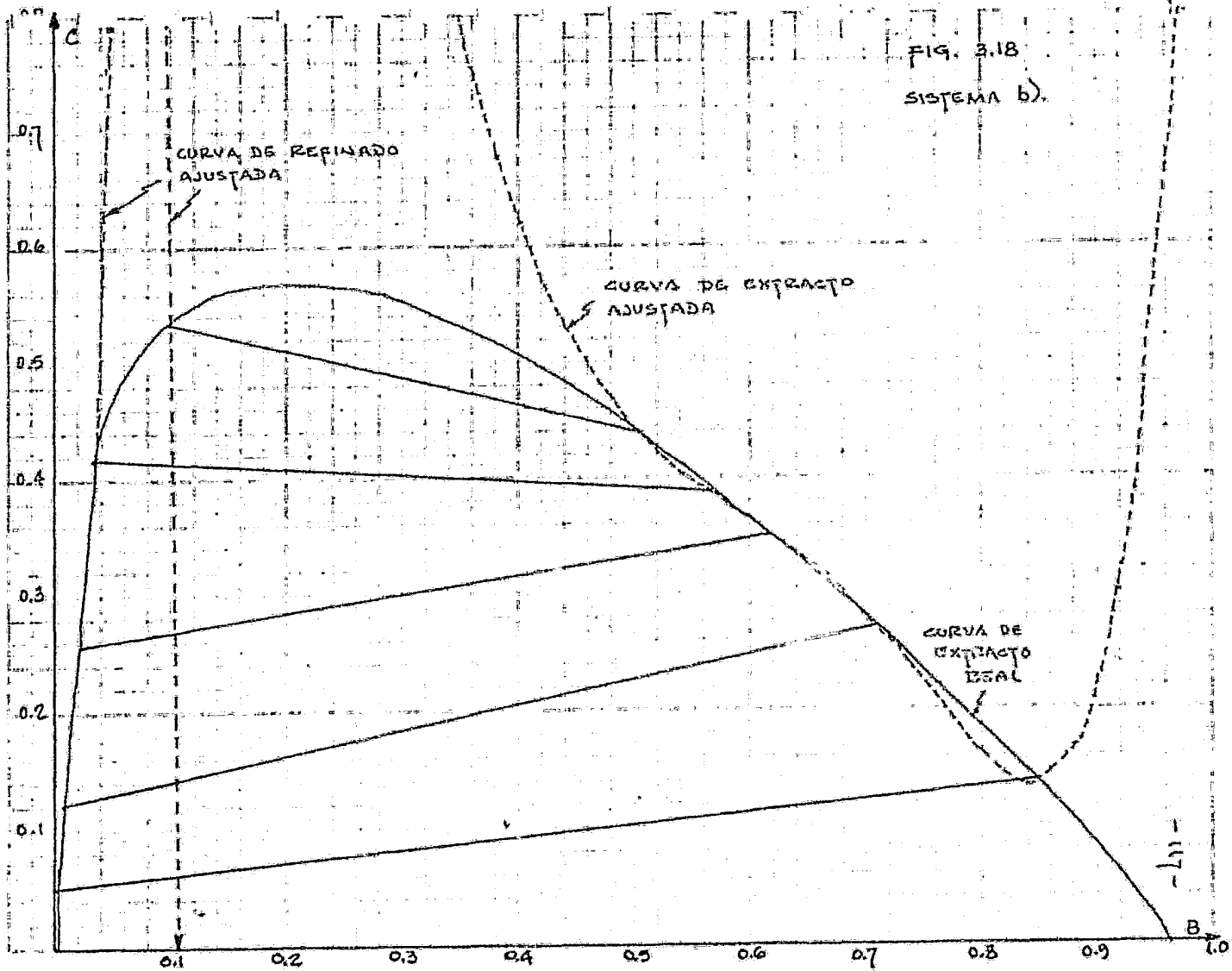


FIG. 3.18  
SISTEMA b).



SISTEMA A

SISTEMA C

CURVA DE EXTRACTO AJUSTADA

CURVA DE EXTRACTO REAL

118

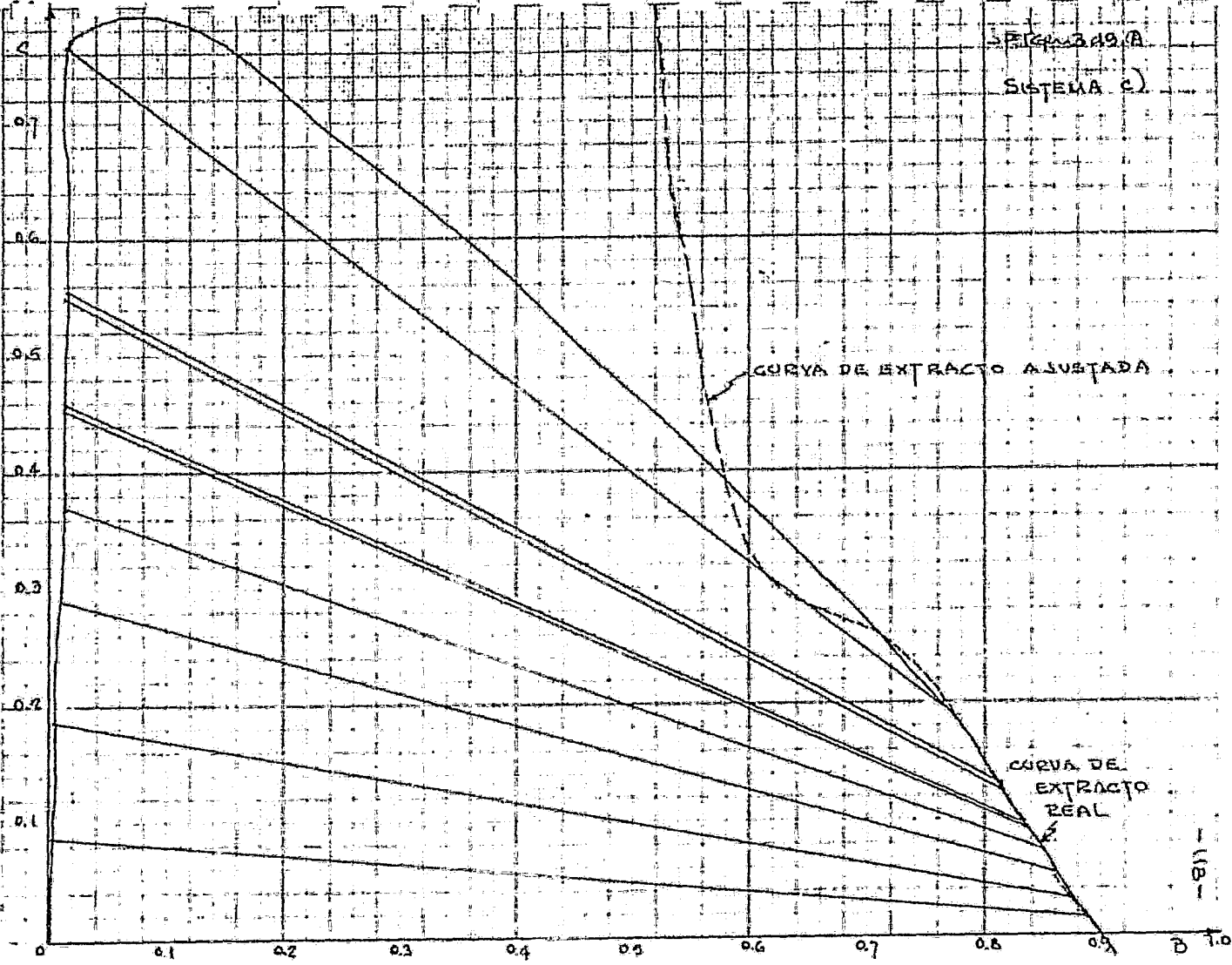
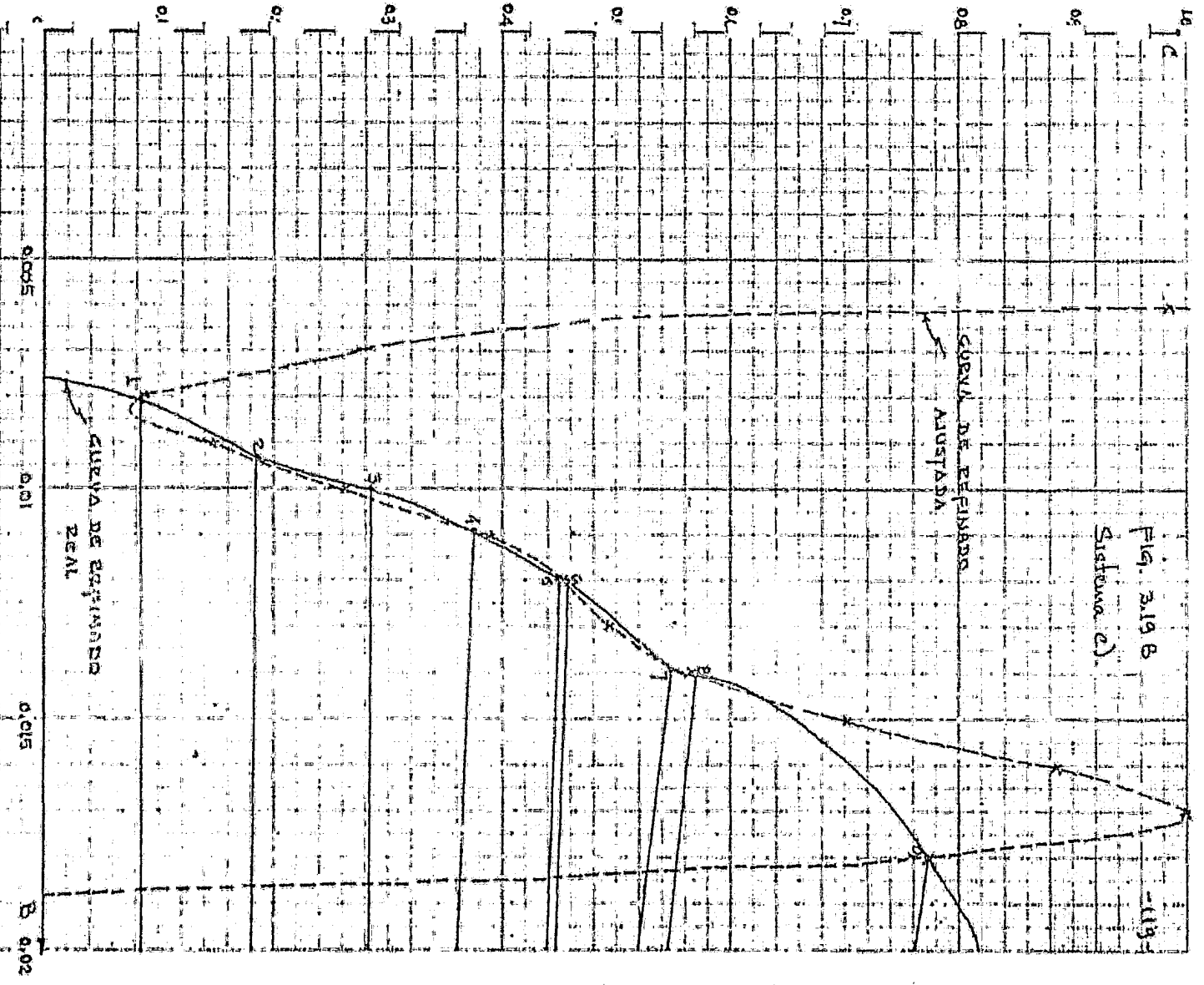
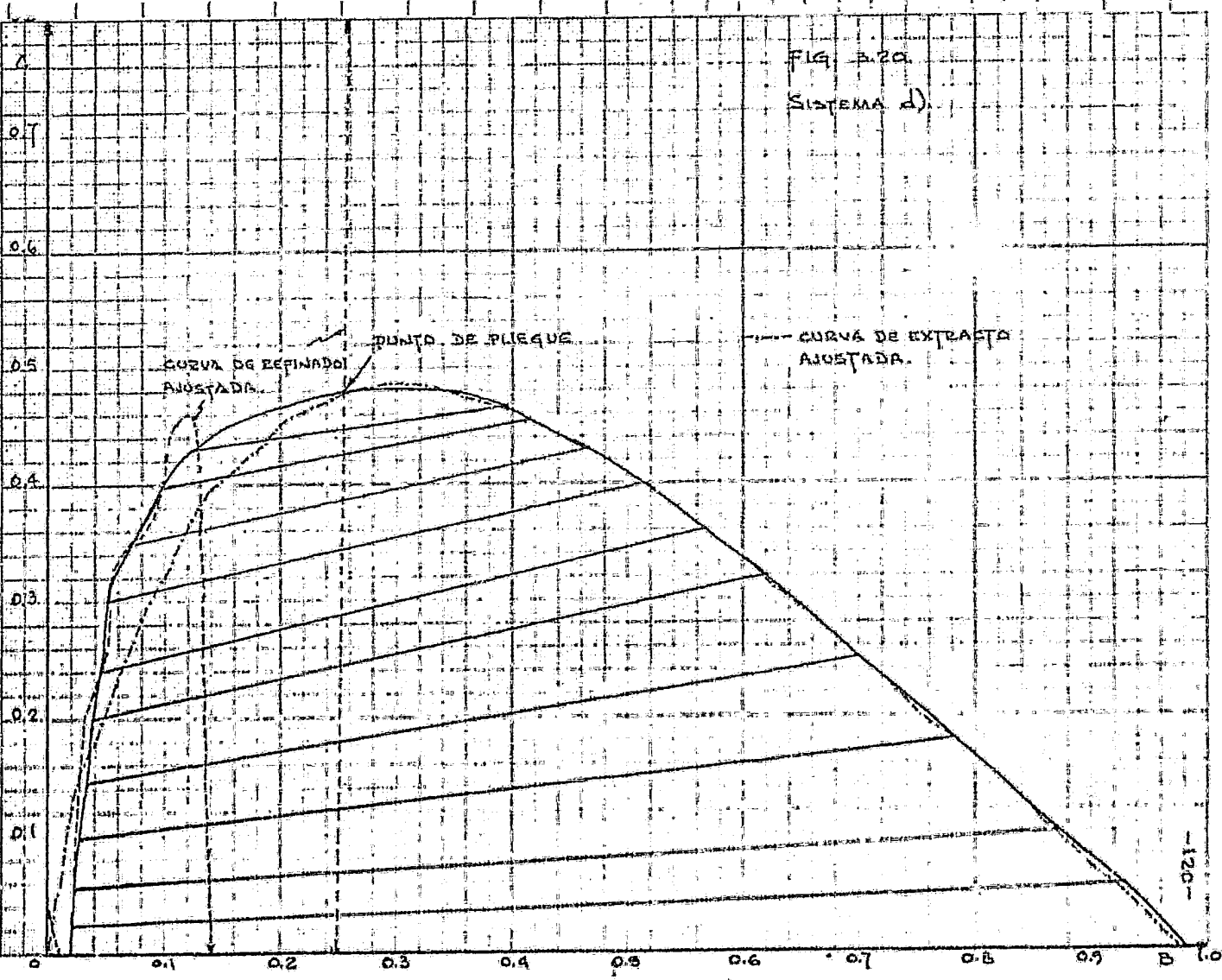


Fig. 3.19 B  
Sistema c)





### 3.3.2. Discusión y comentarios de los resultados obtenidos.

Para el primer tipo de representación (base libre de disolvente) se ve que para los sistemas a), b) y d) no se podrá encontrar resultados correctos para las corrientes de refinado cuando el punto de mezcla, dado por las ecuaciones (2.5) y (2.6)\*, se encuentre por debajo de la primera línea de unión, en este caso el punto estaría a la izquierda de esta línea. Además los resultados obtenidos para esta corriente tendrían un error mayor al 10 % para los casos de los sistemas a) y d).

Para los cuatro sistemas se tiene un ajuste casi perfecto para la curva de extracto, pero solo hasta el último punto de equilibrio. No se obtendrían resultados correctos en la zona donde se encuentra el punto de pliegue.

Para los sistemas b) y c) se podrían encontrar resultados casi correctos, esto es, con un error menor del 1 %, pero solo donde se tiene información de equilibrio, porque fuera de esta zona la curva ajustada sigue una trayectoria diferente a la de la curva de solubilidad. No se podrá confiar de los resultados que se obtengan del sistema b) cuando el punto de mezcla se encuentre a la izquierda de la primera línea de unión ni a la derecha de la última, sin embargo para el sistema c) solo los resultados

\* Teniendo las composiciones de dos componentes del punto de mezcla, se puede encontrar la tercera por diferencia.

que se obtengan cuando el punto de mezcla esté a la derecha de la última línea de unión serán falsos.

De lo anterior se deduce que solo en el caso del sistema c) se tiene un ajuste casi perfecto y por lo tanto los resultados de las corrientes de refinado y extracto serían correctos a excepción de la zona cercana al punto de pliegue.

Del segundo tipo de representación (fracción masa en diagrama triángulo rectangular) se tiene que para el sistema a) no se lograría resultados correctos por encima del quinto punto de equilibrio en la corriente de refinado y todos los resultados obtenidos para la corriente de extracto serían correctos. Pero por encima de la última línea de unión no se tiene forma de obtener resultados correctos ya que la curva de refinado ajustada sigue una trayectoria ascendente y la curva de extracto ajustada desciende a la izquierda de este punto.

Para el sistema b) los resultados que se obtengan para la corriente de refinado, cuando el punto de mezcla se encuentre debajo de la cuarta línea de unión, son correctos; pero por encima de esta línea los resultados serían falsos. Para la corriente de extracto, solo los resultados que se obtengan cuando el punto de mezcla se encuentre entre la primera y la última líneas de unión serían correctos o con un máximo de un 3 % de error. Los re-

sultados obtenidos cuando el punto de mezcla esté por encima de la última línea de unión serán falsos y cuando esté por debajo de la primera no será posible encontrar ningún resultado, ya que la curva ajustada no pasa por esta zona.

Para el sistema c) los resultados de la corriente de extracto serán todos correctos a excepción de los que se obtengan en el caso de que el punto de mezcla se encuentre por encima de la última línea de unión. Los resultados que se obtengan para la corriente de refinado en los casos en que el punto de mezcla esté entre la primera y la última líneas de unión serán correctos o con un máximo del 1 % de error. Por encima de la última línea de unión y por debajo de la primera no se logrará encontrar ningún resultado.

Para el sistema d) todos los resultados en las corrientes de refinado y extracto serán correctos o con un máximo del 2 % de error a excepción de los casos en que el punto de mezcla se encuentre por encima de la última línea de unión y solo para la corriente de refinado, en donde la curva ajustada no sigue la trayectoria de la curva de solubilidad.

Se puede decir entonces que el segundo tipo de representación es mejor que el primero, para nuestros propósitos, aunque no lo óptimo que se desea, ya que por falta de información de equilibrio tiene ciertas limitaciones.



### 3.4. Cálculo de un extractor.

Se elaboró un programa de computadora, el cual se encuentra en el Apéndice II, para calcular las composiciones y flujos de las corrientes de refinado y extracto en un extractor de una sola etapa, teniendo como datos los puntos de equilibrio, el flujo y composición de la mezcla a separar y el flujo y composición del disolvente, bajo las siguientes condiciones:

- a) Presión constante
- b) Temperatura constante
- c) A estas condiciones de presión y temperatura, el sistema ternario presente un diagrama de equilibrio del tipo I.

Este programa utiliza el método de ajuste por mínimos cuadrados del listado del Apéndice I y resuelve el extractor por el siguiente método:

Conociendo los flujos y composiciones de las corrientes de alimentación y del diluyente con el que se hará la extracción y después de haber ajustado un modelo matemático a los datos de equilibrio físico, por medio de un balance de materia, ecuaciones (2.5) y (2.6), calcula las composiciones del punto de mezcla y lo localiza dentro de la campana de equilibrio, en caso de que el punto de mezcla quede fuera de la campana, el programa está diseñado para dar el siguiente mensaje: "EL PUNTO SE EN--

CUENTRA FUERA DE LA CURVA DE SOLUBILIDAD." Y por lo tanto no puede haber lugar a que se lleve a cabo una extracción y terminan los cálculos.

En caso de que el punto de mezcla esté dentro de la campana de equilibrio, la computadora estima -- las ecuaciones de todas las rectas de unión y busca entre cuales rectas se encuentra el punto de mezcla, interpola la ecuación de la recta de unión que pasa por el punto, llama a la subrutina NEWTON que, por medio del método Newton-Raphson, que se describe en el Apéndice IV, calcula -- las composiciones de las corrientes de refinado y extracto; por último hace un balance de materia para calcular -- los flujos de estas corrientes y presenta los resultados en forma de tabla.

Previendo los problemas que se presentan en los ajustes, el programa está diseñado para que en caso de no encontrar solución debido a lo que se menciona -- en la sección 3.3.2, envíe estos mensajes: "NO HAY CONVERGENCIA EN NEWTON-RAPHSON EN 101 ITERACIONES." ó "NO CONVERGE EN 6 ITERACIONES." cuando ya pasó seis veces por -- el método de Newton-Raphson, pero el balance final no es correcto.

Los resultados obtenidos para un problema -- al azar de los cuatro sistemas anteriormente mencionados son los siguientes. Estos problemas se encuentran ejemplificados gráficamente en las figuras 3.21, 3.22, 3.23 y 3.24.

PROBLEMA NO. 2

CALCULO DE UN EXTRACTOR

ALIMENTACION DE LA MEZCLA A SEPARAR:

FLUJO: 600.00 LB/HR

COMPOSICION EN FRACCION MASA

AGUA (XAF) = 0.9000

M-IS-CETONA (XBF) = 0.0000

ACIDO ACETICO (XCF) = 0.2000

ALIMENTACION DEL DISOLVENTE:

FLUJO 500.00 LB/HR

COMPOSICION EN FRACCION MASA

AGUA (XAS) = 0.0000

M-IS-CETONA (XBS) = 1.0000

ACIDO ACETICO (XCS) = 0.0000

CALCULO DE LOS PRODUCTOS REFINADO Y EXTRACTO

	FLUJO (LB/HR)	AGUA XA	M-IS-CETONA XB	ACIDO ACETICO XC
PRODUCTO REFINADO	347.35	0.85347	0.02248	0.12405
PRODUCTO EXTRACTO	352.65	0.02326	0.88246	0.09428

RELACION DE SOLUTO RECUPERADO EN EL EXTRACTO

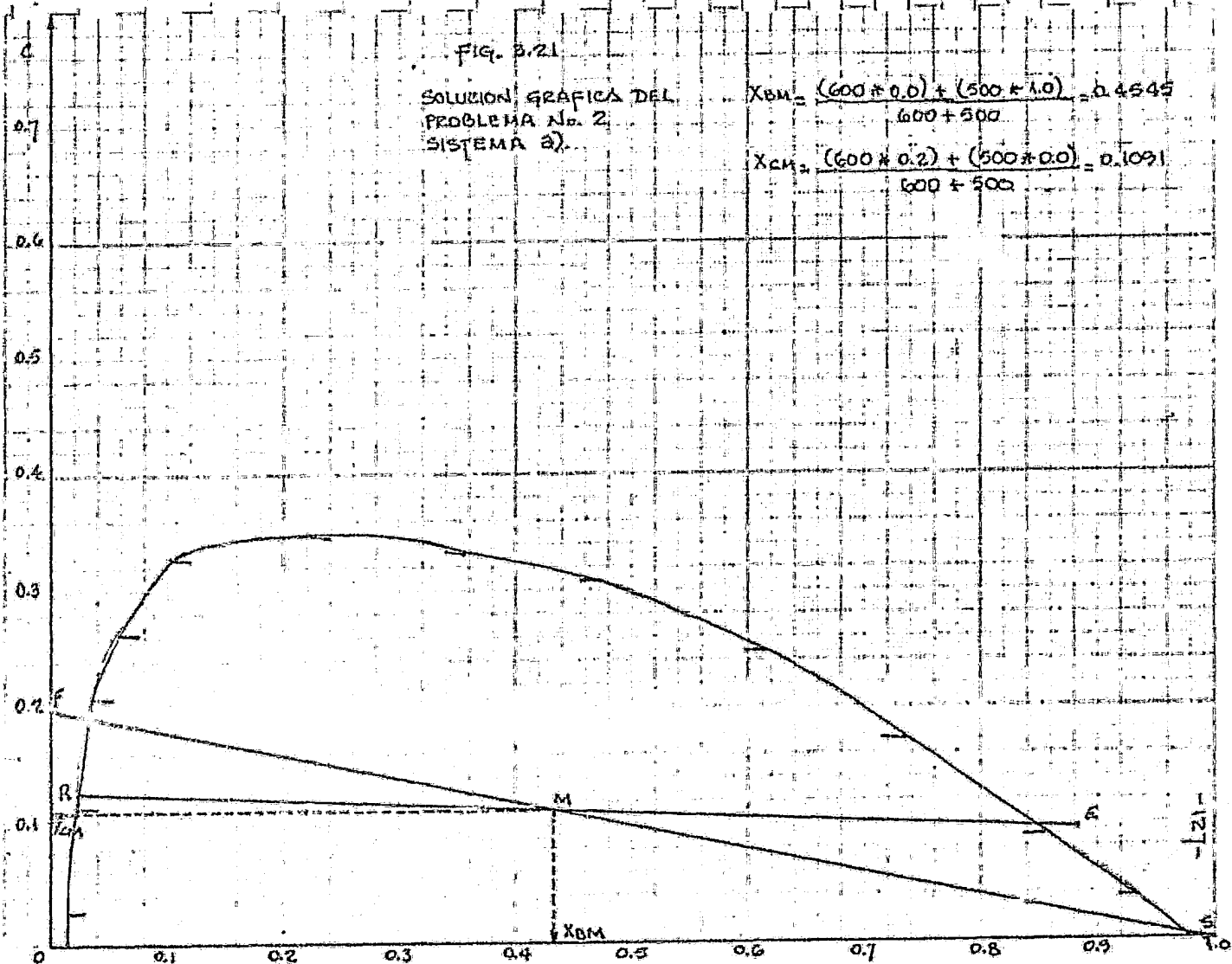
A SOLUTO ALIMENTADO EN LA MEZCLA A SEPARAR 45.419

FIG. 3.21

SOLUCION GRAFICA DEL  
PROBLEMA No. 2  
SISTEMA 2).

$$X_{CM} = \frac{(600 \times 0.0) + (500 \times 1.0)}{600 + 500} = 0.4545$$

$$X_{CM} = \frac{(600 \times 0.2) + (500 \times 0.0)}{600 + 500} = 0.1091$$



-127-

PROBLEMA NO. 0

CALCULO DE UN EXTRACTOR

ALIMENTACION DE LA MEZCLA A SEPARAR:

FLUJO: 1500.00 L3/HR

COMPOSICION EN FRACCION MASA

AGUA (XAF) = 0.5900

BENCENO (XBF) = 0.0100

PIRIDINA (XCF) = 0.3000

ALIMENTACION DEL DISOLVENTE:

FLUJO 1250.00 LA/HR

COMPOSICION EN FRACCION MASA

AGUA (XAS) = 0.0100

BENCENO (XBS) = 0.9900

PIRIDINA (XCS) = 0.0100

CALCULO DE LOS PRODUCTOS REFINADO Y EXTRACTO

	FLUJO (L3/HR)	AGUA XA	BENCENO XB	PIRIDINA XC
PRODUCTO REFINADO	1141.04	0.90253	0.00400	0.09347
PRODUCTO EXTRACTO	1003.75	0.01098	0.76785	0.22117

RELACION DE SOLUTO RECUPERADO EN EL EXTRACTO

A SOLUTO ALIMENTADO EN LA MEZCLA A SEPARAR 79.077



PROBLEMA NO. 1

CÁLCULO DE UN EXTRACTOR

ALIMENTACION DE LA MEZCLA A SEPARAR:

FLUJO: 750.00 LB/HR

COMPOSICION EN FRACCION MASA

ETIL BENCENO (XAF) = 0.7450

ETILEN GLICOL (XDF) = 0.0350

ESTIRENO (XCF) = 0.2200

ALIMENTACION DEL DISOLVENTE:

FLUJO 750.00 LB/HR

COMPOSICION EN FRACCION MASA

ETIL BENCENO (XAS) = 0.0000

ETILEN GLICOL (XBS) = 1.0000

ESTIRENO (XCS) = 0.0000

CÁLCULO DE LOS PRODUCTOS REFINADO Y EXTRACTO

	FLUJO (LB/HR)	ETIL BENCENO XA	ETILEN GLICOL XD	ESTIRENO XC
PRODUCTO REFINADO	609.20	0.77080	0.00936	0.21178
PRODUCTO EXTRACTO	89.80	0.07460	0.86500	0.04040

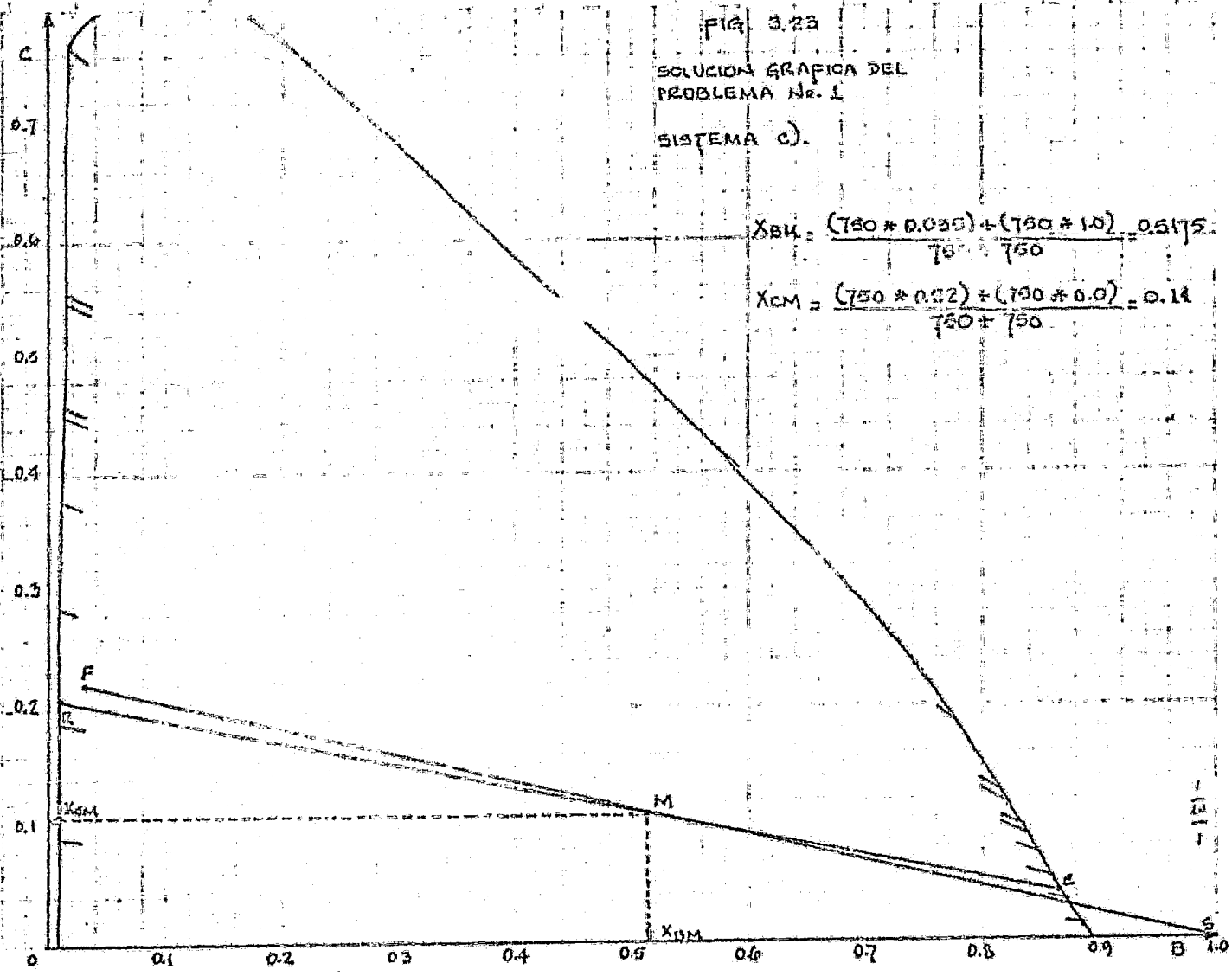
RELACION DE SOLUTO RECUPERADO EN EL EXTRACTO  
A SOLUTO ALIMENTADO EN LA MEZCLA A SEPARAR 21.810

FIG. 3.23

SOLUCION GRAFICA DEL  
PROBLEMA No. 1  
SISTEMA C).

$$X_{BU} = \frac{(750 * 0.035) + (750 * 1.0)}{750 + 750} = 0.5175$$

$$X_{CM} = \frac{(750 * 0.02) + (750 * 0.0)}{750 + 750} = 0.14$$





PROBLEMA NO. 1

CALCULO DE UN EXTRACTOR

ALIMENTACION DE LA MEZCLA A SEPARAR:

FLUJO: 750.00 LB/HR

COMPOSICION EN FRACCION MASA

AGUA (XAF) = 0.7500

M-IB-CETONA (XBF) = 0.0050

DIMETIL CETONA (XCF) = 0.2450

ALIMENTACION DEL DISOLVENTE:

FLUJO 750.00 LB/HR

COMPOSICION EN FRACCION MASA

AGUA (XAS) = 0.0000

M-IB-CETONA (XBS) = 1.0000

DIMETIL CETONA (XCS) = 0.0000

CALCULO DE LOS PRODUCTOS REFINADO Y EXTRACTO

	FLUJO AGUA (LB/HR)	YA	M-IB-CETONA XB	DIMETIL CETONA XC
PRODUCTO REFINADO	581.04	0.89011	0.02919	0.07470
PRODUCTO EXTRACTO	168.96	0.04477	0.80204	0.15279

RELACION DE SOLUTO RECUPERADO EN EL EXTRACTO

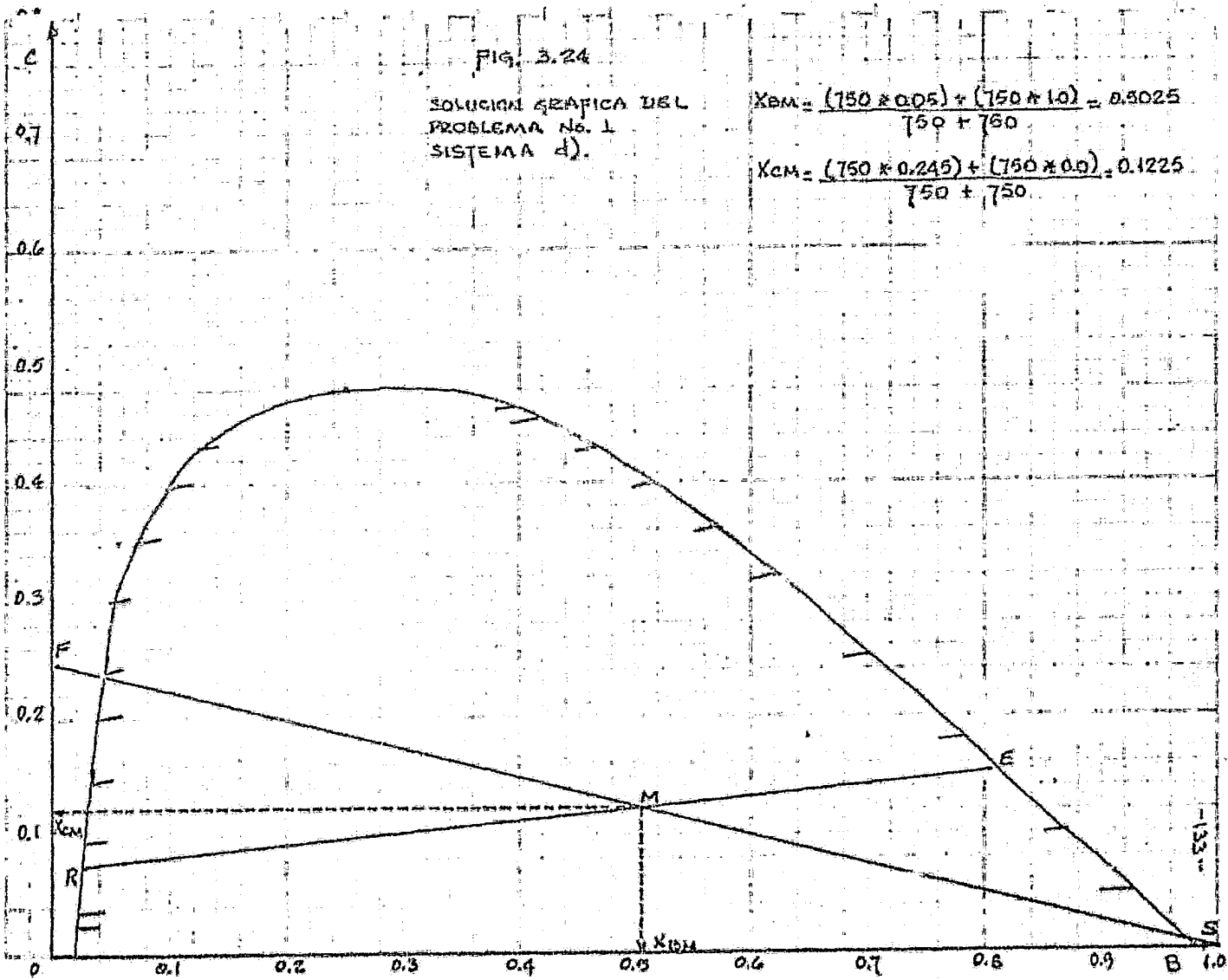
A SOLUTO ALIMENTADO EN LA MEZCLA A SEPARAR 70.246

FIG. 3.24

SOLUCION GRAFICA DEL  
 PROBLEMA No. 1  
 SISTEMA d).

$$X_{CM} = \frac{(750 \times 0.05) + (750 \times 1.0)}{750 + 750} = 0.5025$$

$$X_{CM} = \frac{(750 \times 0.245) + (750 \times 0.0)}{750 + 750} = 0.1225$$



#### 4. CONCLUSIONES.

I. Tratando los datos de equilibrio de los cuatro sistemas ternarios por el Método de Mínimos Cuadrados para la representación de Diagrama Triángulo Rectangular se tienen menos problemas que en la realización por la representación de Diagrama Base Disolvente Libre y por el Método de Diferencias Finitas Divididas, logrando además resultados muy cercanos a los verdaderos para problemas de extracción líquido-líquido en extractores de una sola etapa para los sistemas ternarios tratados.

II. Para localizar las composiciones de las corrientes de refinado y extracto se utilizó el Método de Newton Raphson, ya que después de varias pruebas con diferentes métodos se encontró que éste converge con mayor rapidez y reporta resultados más confiables, del orden de un 95 a 100 % de exactitud.

III. En base a lo anteriormente mencionado, se puede concluir que este método de cálculo se puede aplicar a cualquier diagrama ternario del cual se proporcione más de 10 datos de equilibrio repartidos a todo lo largo de la campana, los datos del sistema binario A-B y las coordenadas del punto de pliegue. De lo contrario se corre el riesgo de que el trazo de la curva ajustada tenga una trayectoria diferente a la del diagrama real, ocasionando con esto que se tengan resultados o mensajes falsos.

IV. Este programa no está diseñado para hacer --

cálculos de interpolación o extrapolación para la obtención de datos de equilibrio, debido a que éstos se dan como información de un sistema determinado.

A P E N D I C E I



```

1  SRESEI FREE                                00000001
2  FILE 6(KIND=MEMOIE,MAXRECSIZE=22)          00000002
3  FILE 5(KIND=DISK,FILETYPE=7,TITLE="AURA .") 00000003
10 *****C                                00000010
11 C                                          C          00000011
12 C   ESTE PROGRAMA AJUSTIA LOS DATOS DE EQUILIBRIO DE UN SISTEMA C          00000012
13 C   TERNARIO POR EL METODO DE MINIMOS CUADRADOS. C          00000013
14 C   LA SOLUCION DEL SISTEMA DE ECUACIONES DADO POR LAS ECUACIO- C          00000014
15 C   NES NORMALES SE RESUELVE POR EL METODO DE ELIMINACION ---- C          00000015
16 C   GAUSSIANA. LA SUBROUTINA SIMULT PUEDE SER MODIFICADA, NO ASI C          00000016
17 C   LAS SUBROUTINAS DECOMP, SOLVE, IMPRV Y SING QUE CONSTITUYEN C          00000017
18 C   EL METODO. C          00000018
19 C                                          C          00000019
20 C                                          C          00000020
21 C   TESIS. C          00000021
22 C                                          C          00000022
23 C   ELABORADO POR: JOSE LUIS RODRIGUEZ MILLER C          00000023
24 C   ASESORADO POR: M. EN C. CARITINO MORENO PADILLA C          00000024
25 C   TEMA: ANALISIS DE EXTRACCION LIQUIDO-LIQUIDO C          00000025
26 C   POR METODOS NUMERICOS. C          00000026
27 C                                          C          00000027
28 C                                          C          00000028
29 *****C                                00000029
30 DIMENSION X(30), Y(30), AU(30), B(30), L(30,30) 00000030
31 DIMENSION X1(30), Y1(30), XI(30), YI(30), YCAL(30) 00000050
32 DIMENSION ALGH(20), BCUN(20), CCOR(20) 00000060
33 DIMENSION EMQ(30), HRJG(5,30), COEF(30,30,5) 00000065
34 DIMENSION AU1(0:30), AI1(0:30), YH2C(0:30) 00000070
35 DIMENSION YMC(30,5), YICUR(30,5), XICUR(30,5) 00000075
36 DIMENSION CUMPA(5), CUMPB(5), CUMPC(5) 00000080
37 DIMENSION NAMEA(5), NAMEB(5), NAMEC(5) 00000085
38 DATA NDATA5 / 10. / 00000090
    
```

A4

95	READ (5,250) NAMEA	00000095
96	READ (5,250) NAMEB	00000096
97	READ (5,250) NAMEC	00000097
100	READ /, NP	00000100
110	DO 1 I=1, NP	00000110
120	DO 1 I=1, NP	00000120
130	READ /, ACON(I), BCON(I)	00000130
140	CCON(I)=1.-ACON(I)-BCON(I)	00000140
150	IF (BCON(I)+GE.0.0) GO TO 20	00000150
160	WRITE (6,204)	00000160
170	GO TO 500	00000170
180	20 X(I)=CCON(I)/(ACON(I)+LCUN(I))	00000180
190	Y(I)=BCON(I)/(ACON(I)+LCUN(I))	00000190
200	XICUR(I,ICURVE) = X(I)	00000200
210	1 CONTINUE	00000210
220	IF (ICURVE.EQ.1.0) WRITE(6,104)	00000220
230	IF (ICURVE.EQ.2.0) WRITE(6,107)	00000230
240	N=NP	00000240
250	WRITE (6,102) NAMEA, NAMEB, NAMEC, (ACON(I), BCON(I), CCON(I),	00000250
251	/I=1, NP)	00000251
260	SUMY=0.0	00000260
270	SUMX=0.0	00000270
280	SUMYX=0.0	00000280
290	SUMYX5=0.0	00000290
300	SUMYX2=0.0	00000300
310	SUMYX4=0.0	00000310
320	SUMYX5=0.0	00000320
321	SUMYX6=0.0	00000321
322	SUMYX7=0.0	00000322
323	SUMYX8=0.0	00000323
324	SUMYX9=0.0	00000324
325	SUMYX1=0.0	00000325
340	SUMX2=0.0	00000340
350	SUMX3=0.0	00000350



IBM

```

360 SUMX4=0.0
370 SUMX5=0.0
380 SUMX6=0.0
390 SUMX7=0.0
400 SUMX8=0.0
410 SUMX9=0.0
411 SUMX10=0.0
412 SUMX11=0.0
413 SUMX12=0.0
414 SUMX13=0.0
415 SUMX14=0.0
416 SUMX15=0.0
417 SUMX16=0.0
418 SUMX17=0.0
419 SUMX18=0.0
440 DO 2 I=1, NP
450 SUMY=SUMY+Y(I)
460 SUMX=SUMX+X(I)
470 SUMYX=SUMYX+(X(I)*Y(I))
480 SUMYX2=SUMYX2+(Y(I)*(X(I)**2))
490 SUMYX3=SUMYX3+(Y(I)*(X(I)**3))
500 SUMYX4=SUMYX4+(Y(I)*(X(I)**4))
510 SUMYX5=SUMYX5+(Y(I)*(X(I)**5))
520 SUMYX6=SUMYX6+(Y(I)*(X(I)**6))
530 SUMYX7=SUMYX7+(Y(I)*(X(I)**7))
540 SUMYX8=SUMYX8+(Y(I)*(X(I)**8))
550 SUMYX9=SUMYX9+(Y(I)*(X(I)**9))
560 SUMYX10=SUMYX10+(Y(I)*(X(I)**10))
570 SUMX2=SUMX2+(X(I)**2)
580 SUMX3=SUMX3+(X(I)**3)
590 SUMX4=SUMX4+(X(I)**4)
600 SUMX5=SUMX5+(X(I)**5)
610 SUMX6=SUMX6+(X(I)**6)
620 SUMX8=SUMX8+(X(I)**8)

```

```

00000360
00000370
00000380
00000390
00000400
00000410
00000411
00000412
00000413
00000414
00000415
00000416
00000417
00000418
00000419
00000440
00000450
00000460
00000470
00000480
00000490
00000500
00000510
00000520
00000530
00000540
00000550
00000560
00000570
00000580
00000590
00000600
00000610
00000620

```



50  
 100  
 150  
 200  
 250  
 300  
 350  
 400  
 450  
 500  
 550  
 600  
 650  
 700  
 750  
 800  
 850  
 900  
 950  
 1000



630	SUMX7=SUMX7+(X(I)**7)	00000630
640	SUMX9=SUMX9+(X(I)**9)	00000640
650	SUMX10=SUMX10+(X(I)**10)	00000650
660	SUMX11=SUMX11+(X(I)**11)	00000660
670	SUMX12=SUMX12+(X(I)**12)	00000670
680	SUMX13=SUMX13+(X(I)**13)	00000680
690	SUMX14=SUMX14+(X(I)**14)	00000690
700	SUMX15=SUMX15+(X(I)**15)	00000700
710	SUMX16=SUMX16+(X(I)**16)	00000710
720	SUMX17=SUMX17+(X(I)**17)	00000720
730	SUMX18=SUMX18+(X(I)**18)	00000730
750	2 CONTINUE	00000750
760	B(1)=SUMY	00000760
770	B(2)=SUMYA	00000770
780	B(3)=SUMYA2	00000780
790	B(4)=SUMYA3	00000790
800	B(5)=SUMYA4	00000800
810	B(6)=SUMYA5	00000810
820	B(7)=SUMYA6	00000820
830	B(8)=SUMYA7	00000830
840	B(9)=SUMYA8	00000840
850	B(10)=SUMYX7	00000850
860	B(11)=SUMYX1	00000860
870	A(1,1)=M	00000870
880	A(1,2)=SUMX	00000880
890	A(1,3)=SUMX2	00000890
900	A(1,4)=SUMX3	00000900
910	A(1,5)=SUMX4	00000910
920	A(1,6)=SUMX5	00000920
930	A(1,7)=SUMX6	00000930
940	A(1,8)=SUMX7	00000940
950	A(1,9)=SUMX8	00000950
960	A(1,10)=SUMX9	00000960
970	A(2,1)=SUMX	00000970
980	A(2,2)=SUMX2	00000980
990	A(2,3)=SUMX3	00000990
1000	A(2,4)=SUMX4	00001000
1010	A(2,5)=SUMX5	00001010
1020	A(2,6)=SUMX6	00001020
1030	A(2,7)=SUMX7	00001030
1040	A(2,8)=SUMX8	00001040
1050	A(2,9)=SUMX9	00001050
1060	A(2,10)=SUMX10	00001060
1070	A(3,1)=SUMX2	00001070
1080	A(3,2)=SUMX3	00001080
1090	A(3,3)=SUMX4	00001090
1100	A(3,4)=SUMX5	00001100
1110	A(3,5)=SUMX6	00001110
1120	A(3,6)=SUMX7	00001120
1130	A(3,7)=SUMX8	00001130
1140	A(3,8)=SUMX9	00001140
1150	A(3,9)=SUMX10	00001150
1160	A(3,10)=SUMX11	00001160
1170	A(4,1)=SUMX3	00001170
1180	A(4,2)=SUMX4	00001180
1190	A(4,3)=SUMX5	00001190
1200	A(4,4)=SUMX6	00001200
1210	A(4,5)=SUMX7	00001210
1220	A(4,6)=SUMX8	00001220
1230	A(4,7)=SUMX9	00001230
1240	A(4,8)=SUMX10	00001240
1250	A(4,9)=SUMX11	00001250
1260	A(4,10)=SUMX12	00001260
1270	A(5,1)=SUMX4	00001270
1280	A(5,2)=SUMX5	00001280
1290	A(5,3)=SUMX6	00001290
1300	A(5,4)=SUMX7	00001300
1310	A(5,5)=SUMX8	00001310



11

100-100000-1

11

100-100000-1



1320	A(5,6)=0U,XY	00001320
1330	A(5,7)=0U,XY	00001330
1340	A(5,8)=0U,XY	00001340
1350	A(5,9)=0U,XY	00001350
1360	A(5,10)=0U,XY	00001360
1370	A(6,1)=0U,XY	00001370
1380	A(6,2)=0U,XY	00001380
1390	A(6,3)=0U,XY	00001390
1400	A(6,4)=0U,XY	00001400
1410	A(6,5)=0U,XY	00001410
1420	A(6,6)=0U,XY	00001420
1430	A(6,7)=0U,XY	00001430
1440	A(6,8)=0U,XY	00001440
1450	A(6,9)=0U,XY	00001450
1460	A(6,10)=0U,XY	00001460
1470	A(7,1)=0U,XY	00001470
1480	A(7,2)=0U,XY	00001480
1490	A(7,3)=0U,XY	00001490
1500	A(7,4)=0U,XY	00001500
1510	A(7,5)=0U,XY	00001510
1520	A(7,6)=0U,XY	00001520
1530	A(7,7)=0U,XY	00001530
1540	A(7,8)=0U,XY	00001540
1550	A(7,9)=0U,XY	00001550
1560	A(7,10)=0U,XY	00001560
1570	A(8,1)=0U,XY	00001570
1571	A(8,2)=0U,XY	00001571
1572	A(8,3)=0U,XY	00001572
1573	A(8,4)=0U,XY	00001573
1574	A(8,5)=0U,XY	00001574
1575	A(8,6)=0U,XY	00001575
1576	A(8,7)=0U,XY	00001576
1577	A(8,8)=0U,XY	00001577
1578	A(8,9)=0U,XY	00001578
1579	A(8,10)=0U,XY	00001579
1580	A(9,1)=0U,XY	00001580
1581	A(9,2)=0U,XY	00001581
1582	A(9,3)=0U,XY	00001582
1583	A(9,4)=0U,XY	00001583
1584	A(9,5)=0U,XY	00001584
1585	A(9,6)=0U,XY	00001585
1586	A(9,7)=0U,XY	00001586
1587	A(9,8)=0U,XY	00001587
1588	A(9,9)=0U,XY	00001588
1589	A(9,10)=0U,XY	00001589
1590	A(10,1)=0U,XY	00001590
1591	A(10,2)=0U,XY	00001591
1592	A(10,3)=0U,XY	00001592
1593	A(10,4)=0U,XY	00001593
1594	A(10,5)=0U,XY	00001594
1595	A(10,6)=0U,XY	00001595
1596	A(10,7)=0U,XY	00001596
1597	A(10,8)=0U,XY	00001597
1598	A(10,9)=0U,XY	00001598
1599	A(10,10)=0U,XY	00001599
1660	DO 10 I = 1, 30	00001660
1670	AL(I) = 0.0	00001670
1680		00001680
1690	10 CONTINUE	00001690
1700	DO 150 J=1, N	00001700
1705	NR=JUR*DE-1	00001705
1710	CALL SIMUL(A, S, JUR*DE, AB)	00001710
1720	DO 8 IJ = 1, JUR*DE	00001720
1730	8 CME=(IJ, J, JUR*DE)=A3(IJ)	00001730
1740	ERROR=0.0	00001740
1750	DO 5 I=1, NR	00001750
1760	YCAL(I)=AL(I)+AL(2)*X(I)+AL(3)*X(I)**2+AL(4)*X(I)**3+AL(5)*X(I)**4+AL(6)*X(I)**5+AL(7)*X(I)**6+AL(8)*X(I)**7+AL(9)*X(I)**8+AL(10)*X(I)**9	00001760
1770		00001770



1430	A(6,7)=S0,X11	00001430
1440	A(6,8)=S0,X12	00001440
1450	A(6,9)=S0,X13	00001450
1460	A(6,10)=S0,X14	00001460
1470	A(7,1)=S0,X10	00001470
1480	A(7,2)=S0,X11	00001480
1490	A(7,3)=S0,X12	00001490
1500	A(7,4)=S0,X13	00001500
1510	A(7,5)=S0,X14	00001510
1520	A(7,6)=S0,X11	00001520
1530	A(7,7)=S0,X12	00001530
1540	A(7,8)=S0,X13	00001540
1550	A(7,9)=S0,X14	00001550
1560	A(7,10)=S0,X11	00001560
1570	A(8,1)=S0,X10	00001570
1571	A(8,2)=S0,X11	00001571
1572	A(8,3)=S0,X12	00001572
1573	A(8,4)=S0,X13	00001573
1574	A(8,5)=S0,X14	00001574
1575	A(8,6)=S0,X11	00001575
1576	A(8,7)=S0,X12	00001576
1577	A(8,8)=S0,X13	00001577
1578	A(8,9)=S0,X14	00001578
1579	A(8,10)=S0,X11	00001579
1580	A(9,1)=S0,X10	00001580
1581	A(9,2)=S0,X11	00001581
1582	A(9,3)=S0,X12	00001582
1583	A(9,4)=S0,X13	00001583
1584	A(9,5)=S0,X14	00001584
1585	A(9,6)=S0,X11	00001585
1586	A(9,7)=S0,X12	00001586
1587	A(9,8)=S0,X13	00001587
1588	A(9,9)=S0,X14	00001588
1589	A(9,10)=S0,X11	00001589
1590	A(10,1)=S0,X10	00001590
1591	A(10,2)=S0,X11	00001591
1592	A(10,3)=S0,X12	00001592
1593	A(10,4)=S0,X13	00001593
1594	A(10,5)=S0,X14	00001594
1595	A(10,6)=S0,X11	00001595
1596	A(10,7)=S0,X12	00001596
1597	A(10,8)=S0,X13	00001597
1598	A(10,9)=S0,X14	00001598
1599	A(10,10)=S0,X11	00001599
1600	GO TO I = 1, 30	00001600
1670	A0(I) = 0.0	00001670
1680	10 CONTINUE	00001680
1690	GO TO JGRADE = 5, 10	00001690
1700	JGR=JGR+0.5	00001700
1705	WRITE (0,101) JGR	00001705
1710	CALL SIMUL (A, B, JGRADE, A)	00001710
1720	GO TO IJ = 1, JGRADE	00001720
1730	B = (IJ, J0, 1) CUMVEJ = A0(IJ)	00001730
1740	ERR0R = 0.0	00001740
1750	GO TO 1, 0F	00001750
1760	YAL(I) = A0(I) + AB(2) * X(I) + A3(3) * (X(I)**2) + A4(4) * (X(I)**3) + AB(5) * A0(5) * (X(I)**4) + AB(6) * A0(6) * (X(I)**5) + AB(7) * (X(I)**6) + AB(8) * (X(I)**7) +	00001760
1770		00001770



00001770

1780		/AB(9)*(A(1)*A(1)+A(10)*(X(I)**4)+A(11)*A(1)**10)	00001780
1790		YICUR(I,ICURVE) = YCAL(I)	00001790
1800		ERR(I)=(YCAL(I)-Y(I))**2	00001800
1810		ERROR=ERRUM+ERR(I)	00001810
1820		WRONG(ICURVE,JGR)=ERROR	00001820
1830	3	CONTINUE	00001830
1832		WRITE (0,10V) (I, X(I), Y(I), YCAL(I), I=1, NP)	00001832
1834		WRITE (0,10C) ICURVE, JGR, WRONG(ICURVE,JGR)	00001834
1840	150	CONTINUE	00001840
1850		JGR=2	00001850
1860		ERRMIN=WRONG(ICURVE,JGR)	00001860
1870		JGR=3	00001870
1880	4	IF (WRONG(ICURVE,JGR).LT.ERRMIN) GO TO 5	00001880
1890	6	JGR=JGR+1	00001890
1900		IF (JGR.LE.7) GO TO 4	00001900
1910		GO TO 7	00001910
1920	5	ERRMIN=WRONG(ICURVE,JGR)	00001920
1930		JGRMIN=JGR	00001930
1940		GO TO 6	00001940
1950	7	JGRMP1=JGRMIN+1.	00001950
1951		WRITE (0,10D) ERRMIN, JGRMIN	00001951
1955		WRITE (0,10I)	00001955
1957		DO 9 IJ=1, JGRMP1	00001957
1958	9	WRITE (0,10P) IJ, COEF(IJ,JGRMIN,ICURVE)	00001958
1959	11	CONTINUE	00001960
1961	100	FORMAT (1H1,///,19X,"I",24X," X ORIGINAL",11X," Y ORIGINAL",	00001961
1962		/10X," Y CALCULADA",//,(18X,12,10X,(3F25.5,///))	00001962
1963	101	FORMAT (1H1,///,5X,"AJUSTE POR EL METODO DE MINIMOS CUADRADOS",//,	00001963
1964		/5X,"PROPORCIONADO GRADO",12,///)	00001964
1965	102	FUPMAT (///,5X,"ERROR DE LA CURVA NO.",13," CORRESPONDIENTE AL GR	00001965
1966		/ADO",13," =",F25.20,///)	00001966
1967	103	FORMAT (1H1,///,5X,"ERROR MINIMO =",F15.10,	00001967
1968		/," CORRESPONDIENTE AL AJUSTE DE GRADO",13,///)	00001968
1970	104	FORMAT (1H1,10X,"** CURVA DE REFINADO **",///)	00001970



10-10-10



```

2025 200 FORMAT (3A)
2030 500 CALL EXIT
2040 END
2050 SUBROUTINE DIMUL (A, M, MM, X)
2060 DIMENSION A(30,30), UL(30,30), IPS(30), B(30), X(30)
2070 DO 5 I = 1, 30
2080 X(I) = 0.0
2090 5 CONTINUE
2091 WRITE (0,200)
2092 WRITE (0,200) (B(I), I=1,MM)
2093 IF (MM=0) GOTO 2, 3
2094 2 WRITE (0,200)
2095 GO TO 4
2096 3 WRITE (0,210)
2097 4 IF (MM.EQ.2) WRITE (0,201) ((A(I,J), J=1,MM), I=1,MM)
2098 IF (MM.EQ.3) WRITE (0,204) ((A(I,J), J=1,MM), I=1,MM)
2099 IF (MM.EQ.4) WRITE (0,208) ((A(I,J), J=1,MM), I=1,MM)
2100 IF (MM.EQ.5) WRITE (0,209) ((A(I,J), J=1,MM), I=1,MM)
2101 IF (MM.EQ.6) WRITE (0,210) ((A(I,J), J=1,MM), I=1,MM)
2102 IF (MM.EQ.7) WRITE (0,211) ((A(I,J), J=1,MM), I=1,MM)
2103 IF (MM.EQ.8) WRITE (0,212) ((A(I,J), J=1,MM), I=1,MM)
2104 IF (MM.EQ.9) WRITE (0,213) ((A(I,J), J=1,MM), I=1,MM)
2105 IF (MM.EQ.10) WRITE (0,214) ((A(I,J), J=1,MM), I=1,MM)
2106 CALL DECOMP (MM, A, UL, INDIC)
2107 IF (INDIC.EQ.1) STOP
2108 CALL SOLVE (MM, UL, B, X)
2109 CALL IMPRV (MM, A, UL, B, X, DIGIT, INDIC, ITER)
2110 IF (INDIC.EQ.1) STOP
2111 WRITE (0,200)
2112 DO 1 I=1,MM
2113 1 WRITE (0,200) I, X(I)
2114 200 FORMAT (5A,2F5.5,/)
2115 201 FORMAT (//,2X,2F10.4,/)
2116 202 FORMAT (//,2X,"X(",I2,") J =",I2,")")
2117 204 FORMAT (//,2X,3F10.4,/)
2118 205 FORMAT (//,2X,"H(1)...H(MM)=",/)
2119 206 FORMAT (//,2X,"ELEMENTS DE LA MATRIZ:",/)
2120 207 FORMAT (1H1,///,10X,"LES COEFFICIENTES AJUSTES SUR:",/)
2121 209 FORMAT (5A,4F10.4,/)
2122 209 FORMAT (//,1X,5 F13.4,/)
2123 210 FORMAT (//,1X,6 F13.4,/)
2124 211 FORMAT (//,1X,7 F13.4,/)
2125 212 FORMAT (//,1X,8 F13.4,/)
2126 213 FORMAT (//,1X,9 F13.4,/)
2127 214 FORMAT (//,1X,10F13.4,/)
2128 215 FORMAT (1H1,///,2X,"ELEMENTS DE LA MATRIZ:",/)
2150 RETURN
2160 END
2170 SUBROUTINE DECOMP (MM, A, UL, INDIC)
2180 COMMON IPO
2190 DIMENSION A(30,30), UL(30,30), SCALES(30), IPS(30)
2200 M=MM
2210 DO 5 I=1,M
2220 IPS(I)=1
2230 ROWNRN=0.0
2240 DO 2 J=1,M
2250 UL(I,J)=A(I,J)
2260 IF (ROWNRN=ABS(UL(I,J))) I=2, 2
2270 1 ROWNRN=ABS(UL(I,J))
2280 2 CONTINUE

```

```

J002025
00002030
00002040
00002050
00002060
00002070
00002080
00002090
00002091
00002092
00002093
00002094
00002095
00002096
00002097
00002098
00002099
00002100
00002101
00002102
00002103
00002104
00002105
00002106
00002107
00002108
00002109
00002110
00002111
00002112
00002113
00002114
00002115
00002116
00002117
00002118
00002119
00002120
00002121
00002122
00002123
00002124
00002125
00002126
00002127
00002128
00002150
00002160
00002170
00002180
00002190
00002200
00002210
00002220
00002230
00002240
00002250
00002260
00002270
00002280

```



00002280

00002280

2290		IF (ROWNR) 3, 4, 3	00002290
2300	3	SCALE(1)=1.0/ROWNR	00002300
2310		GO TO 5	00002310
2320	4	INDIC=1.0	00002320
2330		CALL SING (1)	00002330
2340		SCALE(1)=0.0	00002340
2350	5	CONTINUE	00002350
2360		M=N-1	00002360
2370		DO 17 K=1, M	00002370
2380		SIG=0.0	00002380
2390		DO 11 I=K, N	00002390
2400		IP=IPS(I)	00002400
2410		SIZE=ABS(UL(IP,K))*SCALE(IP)	00002410
2420		IF (SIZE-SIG) 11, 11, 10	00002420
2430	10	SIG=SIZE	00002430
2440		IDXPIV=1	00002440
2450	11	CONTINUE	00002450
2460		IF (SIG) 13, 12, 13	00002460
2470	12	INDIC=1	00002470
2480		CALL SING (2)	00002480
2490		GO TO 17	00002490
2500	13	IF (IDXPIV-K) 14, 15, 14	00002500
2510	14	J=IPS(K)	00002510
2520		IPS(K)=IP(IDXPIV)	00002520
2530		IPS(IDXPIV)=J	00002530
2540	15	KP=IPS(K)	00002540
2550		PIVOT=UL(KP,K)	00002550
2560		KP1=K+1	00002560
2570		DO 16 I=KP1, N	00002570
2580		IP=IPS(I)	00002580
2590		EH=-UL(IP,K)/PIVOT	00002590
2600		UL(IP,K)=-EM	00002600
2610		DO 16 J=KP1, N	00002610
2620		UL(IP,J)=UL(IP,J)+EH*UL(KP,J)	00002620



M. P. ...





2970		CURE=ABS(A(I))-T	00002970
2980		IF (DXNORM*EPS)=CURE) GO TO 5	00002980
2990		IF (DXNORM*GT.CURE) DXNORM=CURE	00002990
3000	6	CONTINUE	00003000
3010		IF (I(EN-1) B, 7, 8	00003010
3020	7	DIGIT=-ALOG10(A (AX1(DXNORM/XNORM, EPS)))	00003020
3030	8	IF (DXNORM*EPS*XNORM) 10, 10, 9	00003030
3040		INDIC=1	00003040
3050	9	CONTINUE	00003050
3060		CALL SING(S)	00003060
3070		RETURN	00003070
3080	10	INDIC=0	00003080
3090		RETURN	00003090
3100		END	00003100
3110		SUBROUTINE SOLVE (NN, UL, B, X)	00003110
3120		DIMENSION UL(30,30), B(30), X(30), IPS(30)	00003120
3130		COMMON IPS	00003130
3140		N=NN	00003140
3150		NP1=N+1	00003150
3160		IP=IPS(1)	00003160
3170		X(1)=B(1P)	00003170
3180		DO 2 I=2, N	00003180
3190		IP=IPS(I)	00003190
3200		IM1=I-1	00003200
3210		SUM=0.0	00003210
3220		DO 1 J=1, IM1	00003220
3230	1	SUM=SUM+UL(IP, J)*X(J)	00003230
3240	2	X(I)=B(IP)-SUM	00003240
3250		IP=IPS(N)	00003250
3260		X(N)=X(N)/UL(IP, N)	00003260
3270		DO 4 IBACK=2, N	00003270
3280		I=NP1-IBACK	00003280
3290		IP=IPS(I)	00003290
3300		IP1=I+1	00003300



IBM Corporation

3310		SUM=0.0	00003310
3320		DO 3 J=1P1, N	00003320
3330	3	SUM=SUM+UL(IP,J)*X(J)	00003330
3340	4	X(I)=(X(I)-SUM)/UL(IP,I)	00003340
3350		RETURN	00003350
3360		END	00003360
3370		SUBROUTINE SING (IWHY)	00003370
3380	11	FORMAT (1H0,"LA MATRIZ TIENE RENGLON CERO EN DECOMPOSE",/)	00003380
3390	12	FORMAT (1H0,"MATRIZ SINGULAR EN DECOMPOSE, DIVISION ENTRE CERO EN	00003390
3400		/SOLVE.",/)	00003400
3410	15	FORMAT (1H0,"NO HAY CONVERGENCIA EN IMPROV, LA MATRIZ ES CASI SING	00003410
3420		/ILAR.",/)	00003420
3430		GO TO (1,2,3) IWHY	00003430
3440	1	WRITE (0,1)	00003440
3450		GO TO 10	00003450
3460	2	WRITE (0,2)	00003460
3470		GO TO 10	00003470
3480	3	WRITE (0,3)	00003480
3490	10	RETURN	00003490
3500		END	00003500



M. Lopez

A P E N D I C E II



```

1  SRESEI FREE                                00000001
2  FILE 6(KIND=REHUIE,MAXRECSIZE=22)         00000002
3  FILE 5(KIND=JLX,FILETYPE=7,IFILE="LUZ.")  00000003
10  C*****C                                00000010
20  C                                          C          00000020
30  C  PROGRAMA PARA CALCULAR LA SEPARACION EN UN EXTRACTOR LIQUIDO- C          00000030
40  C  LIQUIDO DE UNA SOLA ETAPA.             C          00000040
50  C                                          C          00000050
60  C  TESIS                                  C          00000060
70  C  ELABORADO POR: JOSE LUIS RODRIGUEZ MILLER C          00000070
80  C  ASESOR:      M. EN C. LAMITINO MORENO PADILLA C          00000080
81  C  TEMA:        ANALISIS DE EXTRACCION LIQUIDO-LIQUIDO C          00000081
82  C                POR METODOS NUMERICOS      C          00000082
83  C                                          C          00000083
84  C*****C                                00000084
100  DIMENSION X(30), Y(30), X1(30), Y1(30), YCAL(30) 00000100
200  DIMENSION X2(30), Y2(30), AB(30), A(30,30), B(30) 00000200
300  DIMENSION ALPH(20), SCUN(20), CCUN(20)          00000300
400  DIMENSION ERR(30), NRNG(5,30), COEF(50,50,5)  00000400
500  DIMENSION AU(0:30), A1U(30), YMC(0:50)        00000500
600  DIMENSION YMC(30,5), YICUR(0:50,5), XICUR(0:50,5) 00000600
700  DIMENSION CUMPA(5), COMPB(5), CUMPC(5)         00000700
800  DIMENSION JGR(5), NAMEA(3), NAMEB(3), NAMEC(3)  00000800
900  DIMENSION XMED(5)                               00000900
950  DIMENSION CDEFI(30)                             00000950
1000 DATA NDATUS / 10. /                            00001000
1100 READ (5,1500) NAMEA                             00001100
1200 READ (5,1500) NAMEB                             00001200
1300 READ (5,1500) NAMEC                             00001300
1400 1500 FORMAT (3A3)                                00001400
1500 READ (5,/) NP                                    00001500
1600 DU II I,URVE = 1, 2                            00001600

```

ADJ. IMPR. 11-11-83

```

1700      DU 1 I = 1, NP                                00001700
1800      READ (5,7) ACON(I), CCUN(I)                  00001800
1900      BCON(1) = 1 - ACON(I) - CCUN(I)              00001900
2000      IF (BCON(1) <= 6E-0+0) GO TO 20              00002000
2100      WRITE (6,204) NAMEB                           00002100
2200      GO TO 500                                       00002200
2300      20 X(I) = CCUN(I)                              00002300
2400      Y(I) = CCUN(I)                                00002400
2500      XICUR(I,LCURVE) = X(I)                        00002500
2600      YICUR(I,LCURVE) = Y(I)                       00002600
2700      1 CONTINUE                                     00002700
2800      IF (LCURVE.EQ.1) WRITE (6,104)                00002800
2900      IF (LCURVE.EQ.2) WRITE (6,107)                00002900
3000      WRITE (6,105) NAMEA, NAMEB, NAMEC, (ACON(I), BCON(I), CCUN(I)) 00003000
3100      1, I = 1, NP]                                  00003100
3200      SUMY = 0.0                                       00003200
3300      SUMX = 0.0                                       00003300
3400      SUMYX = 0.0                                       00003400
3500      SUMYX2 = 0.0                                       00003500
3600      SUMYX3 = 0.0                                       00003600
3700      SUMYX4 = 0.0                                       00003700
3800      SUMYX5 = 0.0                                       00003800
3900      SUMYX6 = 0.0                                       00003900
4000      SUMYX7 = 0.0                                       00004000
4100      SUMYX8 = 0.0                                       00004100
4200      SUMYX9 = 0.0                                       00004200
4300      SUMYX1 = 0.0                                       00004300
4400      SUMX2 = 0.0                                       00004400
4500      SUMX3 = 0.0                                       00004500
4600      SUMX4 = 0.0                                       00004600
4700      SUMX5 = 0.0                                       00004700
4800      SUMX6 = 0.0                                       00004800
4900      SUMX7 = 0.0                                       00004900
5000      SUMX8 = 0.0                                       00005000
5100      SUMX9 = 0.0                                       00005100
5200      SUMX10 = 0.0                                       00005200
5300      SUMX11 = 0.0                                       00005300
5400      SUMX12 = 0.0                                       00005400
5500      SUMX13 = 0.0                                       00005500
5600      SUMX14 = 0.0                                       00005600
5700      SUMX15 = 0.0                                       00005700
5800      SUMX16 = 0.0                                       00005800
5900      SUMX17 = 0.0                                       00005900
6000      SUMX18 = 0.0                                       00006000
6100      DU 2 I = 1, NP                                00006100
6200      SUMY = SUMY + Y(I)                              00006200
6300      SUMX = SUMX + X(I)                              00006300
6400      SUMYX = SUMYX + (Y(I) * X(I))                 00006400
6500      SUMYX2 = SUMYX2 + (Y(I)*X(I)**2)             00006500
6600      SUMYX3 = SUMYX3 + (Y(I)*X(I)**3)             00006600
6700      SUMYX4 = SUMYX4 + (Y(I)*X(I)**4)             00006700
6800      SUMYX5 = SUMYX5 + (Y(I)*X(I)**5)             00006800
6900      SUMYX6 = SUMYX6 + (Y(I)*X(I)**6)             00006900
7000      SUMYX7 = SUMYX7 + (Y(I)*X(I)**7)             00007000
7100      SUMYX8 = SUMYX8 + (Y(I)*X(I)**8)             00007100
7200      SUMYX9 = SUMYX9 + (Y(I)*X(I)**9)             00007200
7300      SUMYX1 = SUMYX1 + (Y(I)*X(I)**10)            00007300
7400      SUMX2 = SUMX2 + (X(I)**2)                     00007400
7500      SUMX3 = SUMX3 + (X(I)**3)                     00007500
7600      SUMX4 = SUMX4 + (X(I)**4)                     00007600
7700      SUMX5 = SUMX5 + (X(I)**5)                     00007700
7800      SUMX6 = SUMX6 + (X(I)**6)                     00007800
7900      SUMX7 = SUMX7 + (X(I)**7)                     00007900
8000      SUMX8 = SUMX8 + (X(I)**8)                     00008000
8100      SUMX9 = SUMX9 + (X(I)**9)                     00008100
8200      SUMX10 = SUMX10 + (X(I)**10)                  00008200

```



00008300



8500	SUMX13 = SUMX13 + (X(IJ**13))	00008500
8600	SUMX14 = SUMX14 + (X(IJ**14))	00008600
8700	SUMX15 = SUMX15 + (X(IJ**15))	00008700
8800	SUMX16 = SUMX16 + (X(IJ**16))	00008800
8900	SUMX17 = SUMX17 + (X(IJ**17))	00008900
9000	SUMX18 = SUMX18 + (X(IJ**18))	00009000
9100	CONTINUE	00009100
9200	B(1) = SUMY	00009200
9300	B(2) = SUMYA	00009300
9400	B(3) = SUMYA2	00009400
9500	B(4) = SUMYA3	00009500
9600	B(5) = SUMYA4	00009600
9700	B(6) = SUMYA5	00009700
9800	B(7) = SUMYA6	00009800
9900	B(8) = SUMYA7	00009900
10000	B(9) = SUMYA8	00010000
10100	B(10) = SUMYA9	00010100
10200	A(1,1) = SUMX	00010200
10300	A(1,2) = SUMX	00010300
10400	A(1,3) = SUMX2	00010400
10500	A(1,4) = SUMX3	00010500
10600	A(1,5) = SUMX4	00010600
10700	A(1,6) = SUMX5	00010700
10800	A(1,7) = SUMX6	00010800
10900	A(1,8) = SUMX7	00010900
11000	A(1,9) = SUMX8	00011000
11100	A(1,10) = SUMX9	00011100
11200	A(2,1) = SUMX	00011200
11300	A(2,2) = SUMX2	00011300
11400	A(2,3) = SUMX3	00011400
11500	A(2,4) = SUMX4	00011500
11600	A(2,5) = SUMX5	00011600
11700	A(2,6) = SUMX6	00011700
11800	A(2,7) = SUMX7	00011800
11900	A(2,8) = SUMX8	00011900
12000	A(2,9) = SUMX9	00012000
12100	A(2,10) = SUMX10	00012100
12200	A(3,1) = SUMX2	00012200
12300	A(3,2) = SUMX3	00012300
12400	A(3,3) = SUMX4	00012400
12500	A(3,4) = SUMX5	00012500
12600	A(3,5) = SUMX6	00012600
12700	A(3,6) = SUMX7	00012700
12800	A(3,7) = SUMX8	00012800
12900	A(3,8) = SUMX9	00012900
13000	A(3,9) = SUMX10	00013000
13100	A(3,10) = SUMX11	00013100
13200	A(4,1) = SUMX3	00013200
13300	A(4,2) = SUMX4	00013300
13400	A(4,3) = SUMX5	00013400
13500	A(4,4) = SUMX6	00013500
13600	A(4,5) = SUMX7	00013600
13700	A(4,6) = SUMX8	00013700
13800	A(4,7) = SUMX9	00013800
13900	A(4,8) = SUMX10	00013900
14000	A(4,9) = SUMX11	00014000
14100	A(4,10) = SUMX12	00014100
14200	A(5,1) = SUMX3	00014200
14300	A(5,2) = SUMX4	00014300
14400	A(5,3) = SUMX5	00014400
14500	A(5,4) = SUMX6	00014500
14600	A(5,5) = SUMX7	00014600
14700	A(5,6) = SUMX8	00014700
14800	A(5,7) = SUMX9	00014800
14900	A(5,8) = SUMX10	00014900
15000	A(5,9) = SUMX11	00015000
15100	A(5,10) = SUMX12	00015100





8600	SUMX14 = SUMX14 + (X(I)**14)	00008600
8700	SUMX15 = SUMX15 + (X(I)**15)	00008700
8800	SUMX16 = SUMX16 + (X(I)**16)	00008800
8900	SUMX17 = SUMX17 + (X(I)**17)	00008900
9000	SUMX18 = SUMX18 + (X(I)**18)	00009000
9100	2 CONTINUE	00009100
9200	B(1) = SUMY	00009200
9300	B(2) = SUMYX	00009300
9400	B(3) = SUMYX2	00009400
9500	B(4) = SUMYX3	00009500
9600	B(5) = SUMYX4	00009600
9700	B(6) = SUMYX5	00009700
9800	B(7) = SUMYX6	00009800
9900	B(8) = SUMYX7	00009900
10000	B(9) = SUMYX8	00010000
10100	B(10) = SUMYX9	00010100
10200	A(1,1) = .P	00010200
10300	A(1,2) = SUMX	00010300
10400	A(1,3) = SUMX2	00010400
10500	A(1,4) = SUMX3	00010500
10600	A(1,5) = SUMX4	00010600
10700	A(1,6) = SUMX5	00010700
10800	A(1,7) = SUMX6	00010800
10900	A(1,8) = SUMX7	00010900
11000	A(1,9) = SUMX8	00011000
11100	A(1,10) = SUMX9	00011100
11200	A(2,1) = .PMX	00011200
11300	A(2,2) = SUMX2	00011300
11400	A(2,3) = SUMX3	00011400
11500	A(2,4) = SUMX4	00011500
11600	A(2,5) = SUMX5	00011600
11700	A(2,6) = SUMX6	00011700
11800	A(2,7) = SUMX7	00011800
11900	A(2,8) = SUMX8	00011900
12000	A(2,9) = SUMX9	00012000
12100	A(2,10) = SUMX10	00012100
12200	A(3,1) = SUMX2	00012200
12300	A(3,2) = SUMX3	00012300
12400	A(3,3) = SUMX4	00012400
12500	A(3,4) = SUMX5	00012500
12600	A(3,5) = SUMX6	00012600
12700	A(3,6) = SUMX7	00012700
12800	A(3,7) = SUMX8	00012800
12900	A(3,8) = SUMX9	00012900
13000	A(3,9) = SUMX10	00013000
13100	A(3,10) = SUMX11	00013100
13200	A(4,1) = .PMX3	00013200
13300	A(4,2) = SUMX4	00013300
13400	A(4,3) = SUMX5	00013400
13500	A(4,4) = SUMX6	00013500
13600	A(4,5) = SUMX7	00013600
13700	A(4,6) = SUMX8	00013700
13800	A(4,7) = SUMX9	00013800
13900	A(4,8) = SUMX10	00013900
14000	A(4,9) = SUMX11	00014000
14100	A(4,10) = SUMX12	00014100
14200	A(5,1) = SUMX4	00014200
14300	A(5,2) = SUMX5	00014300
14400	A(5,3) = SUMX6	00014400
14500	A(5,4) = SUMX7	00014500
14600	A(5,5) = SUMX8	00014600
14700	A(5,6) = SUMX9	00014700
14800	A(5,7) = SUMX10	00014800
14900	A(5,8) = SUMX11	00014900
15000	A(5,9) = SUMX12	00015000
15100	A(5,10) = SUMX13	00015100
15200	A(6,1) = SUMX5	00015200



15300	A(6,2) = SUMX6	00015300
15400	A(6,3) = SUMX7	00015400
15500	A(6,4) = SUMX8	00015500
15600	A(6,5) = SUMX9	00015600
15700	A(6,6) = SUMX10	00015700
15800	A(6,7) = SUMX11	00015800
15900	A(6,8) = SUMX12	00015900
16000	A(6,9) = SUMX13	00016000
16100	A(6,10) = SUMX14	00016100
16200	A(7,1) = SUMX6	00016200
16300	A(7,2) = SUMX7	00016300
16400	A(7,3) = SUMX8	00016400
16500	A(7,4) = SUMX9	00016500
16600	A(7,5) = SUMX10	00016600
16700	A(7,6) = SUMX11	00016700
16800	A(7,7) = SUMX12	00016800
16900	A(7,8) = SUMX13	00016900
17000	A(7,9) = SUMX14	00017000
17100	A(7,10) = SUMX15	00017100
17200	A(8,1) = SUMX7	00017200
17300	A(8,2) = SUMX8	00017300
17400	A(8,3) = SUMX9	00017400
17500	A(8,4) = SUMX10	00017500
17600	A(8,5) = SUMX11	00017600
17700	A(8,6) = SUMX12	00017700
17800	A(8,7) = SUMX13	00017800
17900	A(8,8) = SUMX14	00017900
18000	A(8,9) = SUMX15	00018000
18100	A(8,10) = SUMX16	00018100
18200	A(9,1) = SUMX3	00018200
18300	A(9,2) = SUMX7	00018300
18400	A(9,3) = SUMX10	00018400
18500	A(9,4) = SUMX11	00018500
18600	A(9,5) = SUMX12	00018600
18700	A(9,6) = SUMX13	00018700
18800	A(9,7) = SUMX14	00018800
18900	A(9,8) = SUMX15	00018900
19000	A(9,9) = SUMX16	00019000
19100	A(9,10) = SUMX17	00019100
19200	A(10,1) = SUMX9	00019200
19300	A(10,2) = SUMX10	00019300
19400	A(10,3) = SUMX11	00019400
19500	A(10,4) = SUMX12	00019500
19600	A(10,5) = SUMX13	00019600
19700	A(10,6) = SUMX14	00019700
19800	A(10,7) = SUMX15	00019800
19900	A(10,8) = SUMX16	00019900
20000	A(10,9) = SUMX17	00020000
20100	A(10,10) = SUMX15	00020100
20200	DO 10 I = 1, 30	00020200
20300	AB(I) = 0.0	00020300
20400	10 CONTINUE	00020400
20500	DO 150 JGRADE = 3, 10	00020500
20600	JGR = JGRADE - 1	00020600
20700	CALL SIMUL (A, J, JGRADE, ADJ	00020700
21000	DO 8 IJ = 1, JGRADE	00021000
21100	9 CUEF(IJ, JGR, I CURVE) = AB(IJ)	00021100
21200	ERROR = 0.0	00021200
21300	DO 3 I = 1, 30	00021300
21400	YCAL(I) = 0.0	00021400
21500	DO 35 IJ = 1, JGRADE	00021500
21600	YCAL(I) = YCAL(IJ) * (CUEF(IJ, JGR, I CURVE) ** (IJ - 1))	00021600
21700	35 CONTINUE	00021700
21800	ERR(I) = YCAL(I) - Y(I) ** 2	00021800



M. J. ...

```

15600      A(6,5) = SUMX9      00015600
15700      A(6,6) = SUMX10   00015700
15800      A(6,7) = SUMX11   00015800
15900      A(6,8) = SUMX12   00015900
16000      A(6,9) = SUMX13   00016000
16100      A(6,10) = SUMX14  00016100
16200      A(7,1) = SUMX6     00016200
16300      A(7,2) = SUMX7     00016300
16400      A(7,3) = SUMX8     00016400
16500      A(7,4) = SUMX9     00016500
16600      A(7,5) = SUMX10    00016600
16700      A(7,6) = SUMX11    00016700
16800      A(7,7) = SUMX12    00016800
16900      A(7,8) = SUMX13    00016900
17000      A(7,9) = SUMX14    00017000
17100      A(7,10) = SUMX15   00017100
17200      A(8,1) = SUMX7     00017200
17300      A(8,2) = SUMX8     00017300
17400      A(8,3) = SUMX9     00017400
17500      A(8,4) = SUMX10    00017500
17600      A(8,5) = SUMX11    00017600
17700      A(8,6) = SUMX12    00017700
17800      A(8,7) = SUMX13    00017800
17900      A(8,8) = SUMX14    00017900
18000      A(8,9) = SUMX15    00018000
18100      A(8,10) = SUMX16   00018100
18200      A(9,1) = SUMX8     00018200
18300      A(9,2) = SUMX9     00018300
18400      A(9,3) = SUMX10    00018400
18500      A(9,4) = SUMX11    00018500
18600      A(9,5) = SUMX12    00018600
18700      A(9,6) = SUMX13    00018700
18800      A(9,7) = SUMX14    00018800
18900      A(9,8) = SUMX15    00018900
19000      A(9,9) = SUMX16    00019000
19100      A(9,10) = SUMX17   00019100
19200      A(10,1) = SUMX9     00019200
19300      A(10,2) = SUMX10    00019300
19400      A(10,3) = SUMX11    00019400
19500      A(10,4) = SUMX12    00019500
19600      A(10,5) = SUMX13    00019600
19700      A(10,6) = SUMX14    00019700
19800      A(10,7) = SUMX15    00019800
19900      A(10,8) = SUMX16    00019900
20000      A(10,9) = SUMX17    00020000
20100      A(10,10) = SUMX18   00020100
20200      DU 10 I = 1, 30     00020200
20300      AB(I) = 0.0         00020300
20400      10 CONTINUE        00020400
20500      DU 15 JGRADE = 5, 10 00020500
20600      JGR = JGRADE - 1    00020600
20700      CALL SIMUL1 (A, Y, JGRADE, AB) 00020700
21000      DU 8 IJ = 1, JGRADE 00021000
21100      5 COEF(I,J,JGRADE,CURVE) = AB(I,IJ) 00021100
21200      ERROR = 0.0         00021200
21300      DU 3 I = 1, NP      00021300
21400      YCAL(I) = 0.0      00021400
21500      DU 35 IJ = 1, JGRADE 00021500
21600      YCAL(IJ) = YLAL(IJ) + (COEF(IJ,JGRADE,CURVE))*(X(I)**(IJ-1)) 00021600
21700      35 CONTINUE        00021700
21800      ERR(IJ) = (YLAL(IJ)-Y(IJ))**2 00021800
21900      ERROR = ERROR + ERR(IJ) 00021900
22000      AHONG(I,JGRADE,JGR) = ERROR 00022000
22100      3 CONTINUE         00022100
22200      150 CONTINUE       00022200

```

```

00015600
00015700
00015800
00015900
00016000
00016100
00016200
00016300
00016400
00016500
00016600
00016700
00016800
00016900
00017000
00017100
00017200
00017300
00017400
00017500
00017600
00017700
00017800
00017900
00018000
00018100
00018200
00018300
00018400
00018500
00018600
00018700
00018800
00018900
00019000
00019100
00019200
00019300
00019400
00019500
00019600
00019700
00019800
00019900
00020000
00020100
00020200
00020300
00020400
00020500
00020600
00020700
00021000
00021100
00021200
00021300
00021400
00021500
00021600
00021700
00021800
00021900
00022000
00022100
00022200

```

```

00015600
00015700
00015800
00015900
00016000
00016100
00016200
00016300
00016400
00016500
00016600
00016700
00016800
00016900
00017000
00017100
00017200
00017300
00017400
00017500
00017600
00017700
00017800
00017900
00018000
00018100
00018200
00018300
00018400
00018500
00018600
00018700
00018800
00018900
00019000
00019100
00019200
00019300
00019400
00019500
00019600
00019700
00019800
00019900
00020000
00020100
00020200
00020300
00020400
00020500
00020600
00020700
00021000
00021100
00021200
00021300
00021400
00021500
00021600
00021700
00021800
00021900
00022000
00022100
00022200

```

00022200

```

22900      JGR = 2
23000      ERRMIN = AHUNG(ICURVE,JGR)
23100      JGR = 3
23200      4  IF (WRUNG(ICURVE,JGR),LT,ERRMIN) GO TO 5
23300      6  JGR = JGR + 1
23400      IF (JGR.GE.7) GO TO 4
23500      GO TO 1000
23600      5  ERRMIN = AHUNG(ICURVE,JGR)
23700      JGRMIN = JGR
23800      GO TO 6
23900      1000 JJGR(ICURVE) = JGRMIN
24000      11  CONTINUE
24100      ICURVE = 1
24200      JGRMIN = JJGR(ICURVE)
24300      IF (YICUR(1,1),EQ,0.0) GO TO 115
24400      A0(0) = 0.0
24500      A1(0) = 0.0
24600      GO TO 116
24700      115  A0(0) = -1.
24800      116  DO 12 I = 1, NP
24900      IF (XICUR(I,1),EQ,XICUR(I,2)) GO TO 121
25000      A1(I) = (ILUR(I,1)-YICUR(I,2))/(XICUR(I,1)-XICUR(I,2))
25100      A0(I) = YICUR(I,1)-A1(I)*XICUR(I,1)
25200      GO TO 121
25300      121  A1(I) = A1(I-1)
25400      A0(I) = YICUR(I,1) - (A1(I)*XICUR(I,1))
25500      12  CONTINUE
25600      DO 18 J=1, NP
25700      READ (5,/) FEEJ, SOLVEN
25800      READ (5,/) XAF, XCF, XAS, XCS
25900      XBF = 1.-XAF-XCF
26000      IF (XBF.GE.0.0) GO TO 154
26100      WRITE (6,22) NAMEB
26200      GO TO 10
26300      753  XBS = 1.-XAS-XCS
26400      IF (XBS.GE.0.0) GO TO 154
26500      WRITE (6,22) NAMEB
26600      GO TO 10
26700      222  FURMAI (///('SY,**** REVISAR DATOS DEL PROBLEMA. ****',//
26800      /LUX,**** CONCENTRACION DE",3AS," MENOR DE CERVA. ****',//
26900      CONTINUE
27000      754  WRITE (6,24) DATOS
27100      130  WRITE (6,24) FEEJ, NAMEA, XAF, NAMEB, XBF, NAMEC, XCF
27200      WRITE (6,24) SOLVEN, NAMEA, XAS, NAMEB, XBS, NAMEC, XCS
27300      XCONMZ = ((FEEJ*XAF)+(SOLVEN*XAS))/(FEEJ+SOLVEN)
27400      YCONMZ = ((FEEJ*XBF)+(SOLVEN*XBS))/(FEEJ+SOLVEN)
27500      ZCONMZ = ((FEEJ*XCF)+(SOLVEN*XCS))/(FEEJ+SOLVEN)
27600      13  XNZ = SCLJXNZ
27700      YNZ = SCLJXNZ
27800      DO 14 I = 0, NP
27900      IF (A0(I),EQ,-1.) I = I + 1
28000      YZC(I) = A0(I) + (A1(I)*XZ)
28100      14  CONTINUE
28200      DO 26 I=0, NP
28300      JGRMIN = JJGR(ICURVE)
28400      JGRMIN = JGRMIN + 1
28500      DO 26 I = 1, JGRMIN
28600      YIC(I,ICURVE) = GDEF(I,JGRMIN,ICURVE)*(XNZ**(I-1))
28700      26  CONTINUE
28800      IBC = 0
28900      YI = 0.0
29000      IF (XNZ-XICUR(I,1)) 50, 50, 50

```

```

00022900
00023000
00023100
00023200
00023300
00023400
00023500
00023600
00023700
00023800
00023900
00024000
00024100
00024200
00024300
00024400
00024500
00024600
00024700
00024800
00024900
00025000
00025100
00025200
00025220
00025300
00025310
00025400
00025500
00025510
00025520
00025530
00025600
00025700
00026000
00026100
00026200
00026300
00026400
00026500
00026600
00026700
00026800
00026900
00027000
00027100
00027200
00027250
00027300
00027400
00027500
00027600
00027700
00027800
00027900
00028000
00028010
00028100
00028100
00028400
00028500
00028600
00028700
00028800
00028900
00029200
00029300
00029310
00029310

```



50 12/20/68







```

39700 209 FORMAT (/,5X,"RELACION DE SOLUTO RECUPERADO EN EL EXTRACCION",
39750 //,5X,"A SULOJTO ALIMENTADO EN LA MEZCLA A SEPARAR",FB,3,/)
39800 300 FORMAT (/,5X,"SERIE DE DATOS NU.",I3,".",//,5X,3A5,FB,5,/)
39900 //,5X,3A5,FB,5,//,5X,3A5,FB,5,//,5X,"COMPOSICIONES EN FRACCION MASA",
40000 //,5X,"CURVA DE REFINAVO ? X =",F10,5," Y =",F10,5,/)
40100 400 FORMAT (/,5X,"CURVA DE EXTRACCION : X =",F10,5," Y =",F10,5,/)
40150 280 FORMAT (LH1,/,5X,"PRBLEMA NU.",I3,/)
40200 500 CALL EXLT
40300 END
40400 SUBROUTINE SIMULT (A, B, MM, X)
40500 DIMENSION A(50,30), UL(50,30), IPS(30), B(30), X(30)
40600 DO 5 I = 1, 50
40700 X(I) = 0.0
40800 5 CONTINUE
40900 CALL DELIMP ('M, A, UL, INDIC)
41000 IF (INDIC.EQ.1) STOP
41100 CALL SOLVE ('M, UL, B, X)
41200 CALL IMPROV ('M, A, UL, B, X, DIGIT, INDIC, ITER)
41300 IF (INDIC.EQ.1) STOP
41700 RETURN
41800 END
41900 SUBROUTINE DECOMP ('M, A, UL, INDIC)
42000 COMMON /PS
42100 DIMENSION A(50,30), UL(50,30), SCALES(50), IPS(50)
42200 N = 40
42300 DO 5 I = 1, N
42400 IPS(I) = 1
42500 ROWNRH = 0.0
42600 DO 2 J = 1, N
42700 UL(I,J) = A(I,J)
42800 IF (ROWNRH-ABS(UL(I,J))) 1, 2, 2
42900 1 ROWNRH = ABS(UL(I,J))
43000 2 CONTINUE
43100 IF (ROWNRH) 3, 4, 3
43200 3 SCALES(I) = 1.0/ROWNRH
43300 GO TO 5
43400 4 INDIC = 1.0
43500 CALL SING ( 1 )
43600 SCALES(I) = 0.0
43700 5 CONTINUE
43800 NM1 = N - 1
43900 DO 17 K = 1, NM1
44000 SIG = 0.0
44100 DO 11 I = K, N
44200 IP = IPS(I)
44300 SIZE = ABS(UL(IP,K))*SCALES(IP)
44400 IF (SIZE-SIG) 11, 11, 10
44500 10 SIG = SIZE
44600 IUXPLV = 1
44700 11 CONTINUE
44800 IF (SIG) 12, 12, 13
44900 12 INDIC = 1
45000 CALL SING ( 2 )
45100 GO TO 17
45200 13 IF (IUXPLV) 14, 15, 14
45300 14 J = IPS(K)
45400 IPS(K) = IPS(IUXPLV)
45500 IPS(IUXPLV) = J
45600 15 KP = IPS(K)
45700 PIVOT = UL(KO,K)
45800 KP1 = K + 1
45900 DO 16 I = KP1, N
46000 IP = IPS(I)
46100 EN = -UL(IP,K)/PIVOT
46200 UL(IP,K) = -EN
46300 DO 16 J = KP1, N

```



00046300



```

40100 400 FORMAT (1,3X,"CUMVA DE LA (NACTO = X =",F10.5," Y =",F10.5,/)
40150 280 FORMAT (1H1,/,/,15X,"PROBLEMA NO.",I3/)
40200 500 CALL EXIT
40300 END
40400 SUBROUTINE DIMULI (A, U, M, X)
40500 DIMENSION A(30,30), UL(30,30), IPS(30), B(30), X(30)
40600 DO 5 I = 1, 30
40700 X(I) = 0.0
40800 5 CONTINUE
40900 CALL DECOMP (M, A, UL, INDIC)
41000 IF (INDIC.EQ.1) STOP
41100 CALL SOLVE (M, UL, B, X)
41200 CALL IMPROV (M, A, UL, B, X, DIGIT, INDIC, ITER)
41300 IF (INDIC.EQ.1) STOP
41700 RETURN
41800 END
41900 SUBROUTINE DECOMP (M, A, UL, INDIC)
42000 COMMON IP0
42100 DIMENSION A(40,30), UL(30,30), SCALES(30), IPS(30)
42200 N = M
42300 DO 5 I = 1, N
42400 IPS(I) = 1
42500 RUMNRN = 0.0
42600 DO 2 J = 1, N
42700 UL(I,J) = A(I,J)
42800 1: RUMNRN = ABS(UL(I,J)) 1, 2, 2
42900 1 RUMNRN = ABS(UL(I,J))
43000 2 CONTINUE
43100 IF (RUMNRN) 3, 4, 3
43200 3 SCALES(I) = 1.0/RUMNRN
43300 GO TO 5
43400 4 INDIC = 1.0
43500 CALL SING ( 1 )
43600 SCALES(I) = 0.0
43700 5 CONTINUE
43800 NMI = N - I
43900 DO 17 K = 1, NMI
44000 SIG = 0.0
44100 DO 15 I = K, N
44200 IP = IP0(I)
44300 SIZE = ABS(UL(IP,K))*SCALES(IP)
44400 IF (SIZE.EQ.16) 11, 11, 10
44500 10 JIG = SIZE
44600 IUXPIV = 1
44700 11 CONTINUE
44800 IF (JIG, 13, 12, 13
44900 12 INDIC = 1
45000 CALL SING ( 2 )
45100 GO TO 17
45200 13 IF (IUXPIV.NE.14, 15, 14
45300 14 J = IPS(K)
45400 IPS(K) = IPS(IUXPIV)
45500 IPS(IUXPIV) = J
45600 15 KP = IP0(K)
45700 PIVOT = UL(KP,K)
45800 KP1 = K + 1
45900 DO 16 I = KP1, N
46000 IP = IP0(I)
46100 EH = -UL(IP,K)/PIVOT
46200 UL(IP,K) = EH
46300 DO 16 J = KP1, N
46400 UL(IP,J) = UL(IP,J)+EH*UL(KP,J)
46500 16 CONTINUE

```

```

0004000
00040100
00040150
00040200
00040300
00040400
00040500
00040600
00040700
00040800
00040900
00041000
00041100
00041200
00041300
00041700
00041800
00041900
00042000
00042100
00042200
00042300
00042400
00042500
00042600
00042700
00042800
00042900
00043000
00043100
00043200
00043300
00043400
00043500
00043600
00043700
00043800
00043900
00044000
00044100
00044200
00044300
00044400
00044500
00044600
00044700
00044800
00044900
00045000
00045100
00045200
00045300
00045400
00045500
00045600
00045700
00045800
00045900
00046000
00046100
00046200
00046300
00046400
00046500

```



```

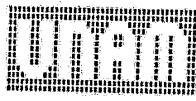
46500 17 CONTINUE
46700 KP = IPS(N)
46800 IF (UL(IP,N)) 19, 18, 19
46900 18 INDIC = 1
47000 CALL SING ( 2 )
47100 RETURN
47200 19 INDIC = 0
47300 RETURN
47400 END
47500 SUBROUTINE IMPROV (N, A, UL, B, X, DIGIT, INDIC, IIER)
47600 DIMENSION A(50,50), UL(50,50), U(50), X(50), R(50), UX(50)
47700 DOUBLE PRECISION SU
47800 N = NI
47900 EPS = 1.0E-6
48000 ITHAX = 10
48100 XNORM = 0.0
48200 DO 1 I = 1, N
48300 1 XNORM = AMAX1(XNORM,ABS(X(I)))
48400 IF (XNORM) 3, 2, 3
48500 2 DIGITS = -ALOG10(EPS)
48600 GO TO 10
48700 3 DO 9 ITER = 1, ITHAX
48800 DO 5 I = 1, N
48900 SUM = 0.0
49000 DO 4 J = 1, N
49100 4 SUM = SUM + A(I,J)*X(J)
49200 SUM = B(I)-SUM
49300 5 R(I) = SUM
49400 CALL SOLVE (N, UL, R, UX)
49500 DXNORM = 0.0
49600 DO 6 I = 1, N
49700 I = X(I)
49800 X(I) = A(I)*X(I)
49900 CORE = ABS(X(I)-I)
50000 IF (DXNORM+EPS+CORE) GO TO 8
50100 IF (DXNORM+GT.CORE) DXNORM = CORE
50200 6 CONTINUE
50300 IF (IITER-1) 9, 7, 8
50400 7 DIGIT = -ALOG10(AMAX1(DXNORM/XNORM, EPS))
50500 8 IF (DXNORM+EPS+XVJRM) 10, 10, 9
50600 INDIC = 1
50700 9 CONTINUE
50800 CALL SING ( 3 )
50900 RETURN
51000 10 INDIC = 0
51100 RETURN
51200 END
51300 SUBROUTINE SOLVE (N, UL, B, X)
51400 DIMENSION UL(50,50), B(50), X(50), IPS(50)
51500 COMMON IPS
51600 N = NI
51700 NP = N + 1
51800 IP = IPS(1)
51900 X(1) = B(1)/IP
52000 DO 2 I = 2, N
52100 IP = IPS(I)
52200 Inl = I - 1
52300 SUM = 0.0
52400 DO 1 J = 1, Inl
52500 1 SUM = SUM + UL(I,J) * X(J)
52600 2 X(I) = (B(I) - SUM) / IP
52700 IP = IPS(N)
52800 X(N) = (B(N) - SUM) / IP

```

```

00046600
00046700
00046800
00046900
00047000
00047100
00047200
00047300
00047400
00047500
00047600
00047700
00047800
00047900
00048000
00048100
00048200
00048300
00048400
00048500
00048600
00048700
00048800
00048900
00049000
00049100
00049200
00049300
00049400
00049500
00049600
00049700
00049800
00049900
00050000
00050100
00050200
00050300
00050400
00050500
00050600
00050700
00050800
00050900
00051000
00051100
00051200
00051300
00051400
00051500
00051600
00051700
00051800
00051900
00052000
00052100
00052200
00052300
00052400
00052500
00052600
00052700
00052800

```



UNIVERSITY MICROFILMS



```

53400      00 3 J = 1P1, N                      00053400
53500      3  SUM = SUM + UL(IP,J) * X(J)      00053500
53600      4  X(I) = (X(I)-SUM)/UL(IP,I)      00053600
53700      RETURN                              00053700
53800      END                                00053800
53900      SUBROUTINE FING (IWHY)              00053900
54000      11  FORMAT (1H02///,5X,***** LA MATRIZ TIENE REGLON CERU EN DECOMPOSE 00054000
54100      / *****//)                          00054100
54200      12  FORMAT (1H02///,5X,***** MATRIZ SINGULAR EN DECOMPOSE, DIVISION EN 00054200
54300      /TRE CERU EN SOLVE. *****,//)          00054300
54400      13  FORMAT (1,0,///,5X,***** NO HAY CONVERGENCIA EN IMPROV, LA MATRIZ 00054400
54500      /ES CASI SINGULAR. *****,//)          00054500
54600      GO TO (1, 2, 3) IWHY                00054600
54700      1  WRITE (0,11)                      00054700
54800      GO TO IV                               00054800
54900      2  WRITE (0,12)                      00054900
55000      GO TO IV                               00055000
55100      3  WRITE (0,13)                      00055100
55200      10  RETURN                            00055200
55300      END                                00055300
55400      SUBROUTINE MERTON (AUM, A1M, COEF, JGR, NP, ICURVE, X, Y, XME0, 00055400
55410      /DX, I)                               00055410
55500      DIMENSION COEF(30,30,5), TERM(30), DTERM(30), YSUM(30) 00055500
55600      DIMENSION JGR(5), XMEU(2)            00055600
55700      X = XMEU(1,ICURVE)                   00055700
55800      JGRMIN = JGR(1,ICURVE)               00055800
55900      TERM(1) = COEF(1,JGRMIN,ICURVE)-AUM 00055900
56000      DTERM(1) = COEF(2,JGRMIN,ICURVE)-A1M 00056000
56100      FX = 0.0                              00056100
56200      DX = 0.0                              00056200
56300      DO 4 I = 1, 100                       00056300
56400      TERM(2) = (COEF(2,JGRMIN,ICURVE)-A1M)*X 00056400
56500      DO 1 IJ = 3, JGRMIN+1                 00056500
56600      TERM(IJ) = (COEF(IJ,JGRMIN,ICURVE)*(X**(IJ-1))) 00056600
56700      DTERM(IJ-1) = (COEF(IJ,JGRMIN,ICURVE)*(X**(IJ-2))*(IJ-1)) 00056700
56800      1  CONTINUE                            00056800
56900      DO 2 IJ = 1, JGRMIN+1                 00056900
57000      2  FX = FX + TERM(IJ)                 00057000
57100      IF (ABS(FX)-LE.0.01) GO TO 5         00057100
57200      DO 3 IJ = 1, JGRMIN                  00057200
57300      3  DX = DX + DTERM(IJ)               00057300
57400      X = X - (FX/DFX)                      00057400
57500      4  CONTINUE                            00057500
57600      5  Y = AUM + A1M * X                  00057600
57700      QELURO                                00057700
57800      END                                00057800
57900      SUBROUTINE PALAYC (X, Y, A, B, C, I) 00057900
58000      DIMENSION A(5), B(5), C(2)          00058000
58100      C(1) = 1                              00058100
58200      B(1) = A                                00058200
58300      A(1) = 1.-X**Y                          00058300
58400      QELURO                                00058400
58500      RETURN                              00058500
58600      END                                00058600
58700      END                                00058700

```



```

53700 RETURN
53800 END
53900 SUBROUTINE DING (IMHY)
54000 11 FORMAT (1H0,///,5X,"**** LA MATRIZ TIENE RENGLON CERU EN DECOMPUSE
54100 / ****",/)
54200 12 FORMAT (1H0,///,5X,"**** MATRIZ SINGULAR EN DECOMPUSE, DIVISION EY
54300 /THE CERU EN SOLYE. ****",/)
54400 13 FORMAT (1H0,///,5X,"**** NU HAY CONVERGENCIA EN IMPROY, LA MATRIZ
54500 /ES CASI SINGULAR. ****",/)
54600 GO TO (1, 2, 3) IMHY
54700 1 WRITE (0,11)
54800 GO TO 10
54900 2 WRITE (0,12)
55000 GO TO 10
55100 3 WRITE (0,13)
55200 10 RETURN
55300 END
55400 SUBROUTINE MENION (A0M, A1M, COEF, JGR, NP, ICURVE, X, Y, XMED,
55410 /DX, I)
55500 DIMENSION COEF(30,30,5), TERM(30), DTERM(30), YSUM(30)
55600 DIMENSION JGR(5), XMEU(5)
55700 X = XMEU(ICURVE)
55800 JGRMIN = JGR(ICURVE)
55900 TERM(1) = COEF(1,JGRMIN,ICURVE)-A0M
56000 DTERM(1) = COEF(2,JGRMIN,ICURVE)-A1M
56100 FX = U.V
56200 DX = 0.0
56300 DO 4 I = 1, 100
56400 TERM(2) = (COEF(2,JGRMIN,ICURVE)-A1M)*X
56500 DO 1 IJ = 3, JGRMIN+1
56600 TERM(IJ) = (COEF(IJ,JGRMIN,ICURVE)*(X**(IJ-1)))
56700 DTERM(IJ-1) = (COEF(IJ,JGRMIN,ICURVE)*(Y**(IJ-2))*(IJ-1))
56800 1 CONTINUE
56900 DO 2 IJ = 1, JGRMIN+1
57000 2 FX = FX + TERM(IJ)
57100 IF (ABS(FX)-LE.0.01) GO TO 5
57200 DO 3 IJ = 1, JGRMIN
57300 3 DX = DX + DTERM(IJ)
57400 X = X - (FX/DFX)
57500 4 CONTINUE
57600 5 Y = A0M + A1M * X
57700 RETURN
57800 END
57900 SUBROUTINE BALANC (X, Y, A, B, C, I)
58000 DIMENSION A(5), B(5), L(5)
58100 C(I) = Y
58200 B(I) = A
58300 A(I) = L.-X*Y
58400 RETURN
58500 END

```

```

00053700
00053800
00053900
00054000
00054100
00054200
00054300
00054400
00054500
00054600
00054700
00054800
00054900
00055000
00055100
00055200
00055300
00055400
00055500
00055600
00055700
00055800
00055900
00056000
00056100
00056200
00056300
00056400
00056500
00056600
00056700
00056800
00056900
00057000
00057100
00057200
00057300
00057400
00057500
00057600
00057700
00057800
00057900
00058000
00058100
00058200
00058300
00058400
00058500
00058600
00058700

```

```

00053700
00053800
00053900
00054000
00054100
00054200
00054300
00054400
00054500
00054600
00054700
00054800
00054900
00055000
00055100
00055200
00055300
00055400
00055500
00055600
00055700
00055800
00055900
00056000
00056100
00056200
00056300
00056400
00056500
00056600
00056700
00056800
00056900
00057000
00057100
00057200
00057300
00057400
00057500
00057600
00057700
00057800
00057900
00058000
00058100
00058200
00058300
00058400
00058500
00058600
00058700

```

### APENDICE III.

Método de Eliminación Gaussiana usando la estrategia del máximo pivote.

Por el método de Eliminación Gaussiana se trata de resolver un sistema de ecuaciones lineales simultáneas por medio de la construcción de la matriz de coeficientes aumentada y por medio de un proceso se obtiene la diagonal unitaria, o sea, se triangulariza la matriz. Posteriormente, por medio de sustituciones hacia atrás se logran obtener los valores de las incógnitas. La estrategia del máximo pivote se usa para eliminar el error de redondeo cuando cualquier elemento de la diagonal tiene un valor muy pequeño.

Teniendo construída la matriz de coeficientes aumentada se procede a buscar el elemento de máximo valor absoluto, aunque éste no sea el del renglón 1, columna 1. Este elemento  $A_{i,j}$  es elemento pivote. Todo el renglón  $i$  se cambia de lugar para que este elemento pivote quede en posición  $A_{i,i}$ , o sea, quede como elemento de la diagonal. Se busca otro elemento pivote, el que sea de máximo valor absoluto de los elementos que no pertenezcan al renglón  $i$  que fué cambiado de lugar. Teniendo en la diagonal todos los elementos pivote encontrados se procede a los pasos de normalización y reducción necesarios.

El primer paso de normalización trata de hacer 1 al elemento  $A_{1,1}$ , esto se logra dividiendo todo el renglón 1 entre este elemento, a continuación se hace el paso de reducción que tiene por objeto hacer cero todos los elementos debajo del  $A_{1,1}$ , esto se obtiene multiplicando el renglón 1 por  $-A_{2,1}$  y sumando este resultado a todos los elementos del renglón 2, y así sucesivamente para todos los renglones.

Posteriormente se hacen los pasos de normalización seguidos de los de reducción necesarios. Al final se obtiene la diagonal unitaria y el último renglón indica el valor de la última incógnita, realizando sustituciones hacia atrás obtenemos los valores de las demás incógnitas.

## APENDICE IV.

### Método de Newton-Raphson.

Este método se emplea para encontrar la solución de una ecuación o sistema de ecuaciones simultáneas no lineales. Específicamente, para nuestros propósitos, para encontrar la solución de las ecuaciones de la recta de reparto o de unión con la curva de refinado y de extracto.

Para encontrar la solución de estas ecuaciones, una lineal y la otra no lineal, se resta una de la otra y la solución será la X que haga que esta diferencia dé cero.

Por ejemplo:

La ecuación de la curva de refinado o de extracto es:

$$Y_1 = A_0 + A_1X + A_2X^2 + A_3X^3 + A_4X^4$$

y la ecuación de la recta de reparto es:

$$Y_2 = B_0 + B_1X$$

Por lo que la diferencia FX es:

$$Y_1 - Y_2 = FX = (A_0 - B_0) + (A_1 - B_1)X + A_2X^2 + A_3X^3 + A_4X^4$$

La X arbitraria que proporciones  $FX = 0$  es la solución de este par de ecuaciones. Si  $FX \neq 0$  se calcula la derivada de FX.

$$DFX = (A_1 - B_1) + 2A_2X + 3A_3X^2 + 4A_4X^3$$

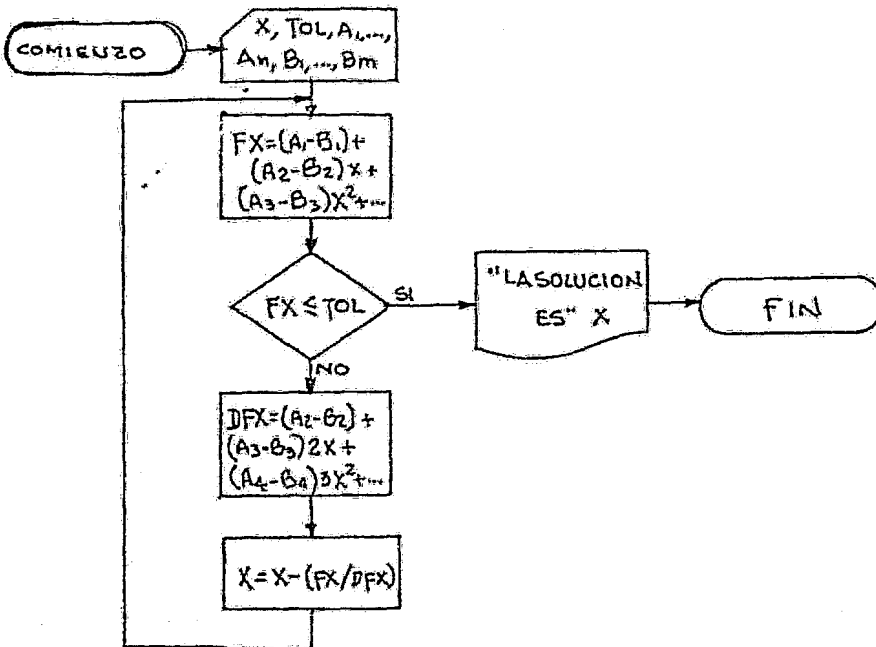


La nueva X para el cálculo de FX es:

$$X_{\text{nueva}} = X_{\text{anterior}} - (FX/DFX)$$

y se repite la secuencia hasta que FX sea cero o menor a una tolerancia arbitraria,

El diagrama de flujo de este método es el siguiente.



## BIBLIOGRAFIA.

1. PERRY, ROBERT H./CHILTON, CECIL H.

Chemical Engineers' Handbook

Fifth Edition

Mc Graw-Hill Kogakusha

Pág. 15-3 a 15-16

2. TREYBAL, ROBERT E.

Mass Transfer Operations

Second Edition

Mc Graw-Hill Kogakusha

Pág. 408 - 482

3. TREYBAL, ROBERT E.

Extracción en Fase Líquida

Primera Edición en español

Traducida por María Teresa Toral

de la 2da. edición en inglés "Liquid Extraction"

Editorial Hispano Americana

1968

Pág. 224 - 315

4. Mc CABE

Unit Operations of Chemical Engineering

First Edition

Mc Graw-Hill

Impreso en México por Novaro Editores Impresores,

S. A.

1965

5. A. S. FOUST

Principio de Operaciones Unitarias

8a. Impresión

Traducido por el Dr. J. A. Lanuza Escobar

Noviembre de 1975

Pág. 265 - 270

6. KERN, DONALD Q.

Procesos de Transferencia de Calor

9a. Impresión

CECSA

Traducido por el Ing. Nicolás Marino Ambrossi

Noviembre de 1974

Pág. 131 - 155