

2ej  
63

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO



FACULTAD DE QUIMICA



EXAMENES PROFESIONALES  
FAC. DE QUIMICA

RESOLUCION DE PROBLEMAS DE EQUILIBRIO  
LIQUIDO - VAPOR MULTICOMPONENTE CON  
ECUACIONES DE ESTADO CUBICAS  
UTILIZANDO UNA MICROCOMPUTADORA

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE  
INGENIERO QUIMICO

P R E S E N T A :

JESUS MUÑOZ OCOTERO



México, D.F.

1986



## **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 está 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.

## I N D I C E

CAPITULO	Pag.
I.- Introducción . . . . .	1
II.- Cálculo de propiedades termodinámicas a partir de una ecuación de estado . . . . .	5
A. Generalidades . . . . .	5
B. Cálculo de las constantes de componentes puros . . . . .	10
B.1. Resoluciones particulares . . . . .	11
B.2. Dependencia de $a$ con respecto a la temperatura a través de la función $\alpha(T_r, \omega)$ . . . . .	15
C. Extensión a mezclas. Reglas de mezclado . . . . .	14
D. Propiedades termodinámicas en mezclas multicomponentes . . . . .	15
III.- Equilibrio líquido-vapor en sistemas de una etapa . . . . .	16
A. Criterios de equilibrio . . . . .	16
B. Planteamiento de los problemas de ELV . . . . .	21
B.1. Puntos de rocío y burbuja . . . . .	20
B.2. Vaporizaciones súbitas o flash . . . . .	23
C. Resolución de los problemas de ELV . . . . .	25
C.1. Puntos de burbuja y rocío . . . . .	25
C.2. Vaporizaciones súbitas o flash . . . . .	27
C.2.1. Flash isotérmico o isobárico . . . . .	27
C.2.2. Flash adiabático . . . . .	32
C.2.3. Flash isentrópico . . . . .	37
C.2.4. Flash (V/P) constante . . . . .	37
C.3. Estimación inicial de las incógnitas . . . . .	41
C.3.1. Puntos de burbuja y rocío . . . . .	41
C.3.2. Vaporizaciones súbitas o flash . . . . .	46
D. Descripción de los programas . . . . .	48
D.1. Puntos de burbuja y rocío . . . . .	48
D.1.1. Primera parte : Programa que calcula los parámetros de los	

componentes puros . . . . .	49
D.1.2. Segunda parte : Programa que calcula los puntos de burbuja y rocío . . . . .	50
D.2. Vaporizaciones súbitas o flash . . . . .	52
D.2.1. Primera parte : Programa que calcula los parámetros de componentes puros . . . . .	52
D.2.2. Segunda parte : Programa que calcula un punto de burbuja y uno de rocío . . . . .	52
D.2.3. Tercera parte : Programa que resuelve el flash . . . . .	52
E. Cálculo de propiedades . . . . .	53
E.1. Resolución analítica de una ecuación cúbica . . . . .	54
E.2. Resolución numérica de la ecuación cúbica (2-13) . . . . .	57
F. Ejemplos . . . . .	58
F.1. Puntos de burbuja y rocío . . . . .	58
F.2. Vaporizaciones súbitas o flash . . . . .	65
IV.- Construcción de la campana de la zona de dos fases . . . . .	75
A. Generalidades . . . . .	75
B. Algoritmo . . . . .	78
C. Descripción del programa . . . . .	81
D. Ejemplo . . . . .	82
V.- Simulación de una columna de platos para la destilación multicomponente . . . . .	88
A. Conceptos . . . . .	88
A.1. Modelo . . . . .	88
A.2. Simulación . . . . .	89
A.3. Cascada . . . . .	89
B. Descripción del sistema hipotético . . . . .	90
C. Formulación del modelo matemático. Ecuaciones fundamentales . . . . .	
D. Resolución del modelo matemático . . . . .	98

## CAPITULO

Pag.

3. Descripción del programa . . . . .	103
F. Ejemplo . . . . .	105
VI.- Banco de datos . . . . .	111
VII.- Conclusiones y recomendaciones . . . . .	133
VIII.- Apéndices . . . . .	135
A-1. Cálculo de los parámetros de los componentes puros . . . . .	136
A-2. Cálculo de los puntos de burbuja o de rocío . . . . .	141
B-1. Cálculo de un punto de burbuja y uno de rocío . . . . .	146
B-2. Cálculo del flash . . . . .	150
C-1. Cálculo de los puntos necesarios para construir la parte de dos fases de un diagrama termodinámico . . . . .	156
D-1. Simulación de una columna de destilación multicomponente . . . . .	159
E-1. Actualizador del banco de datos . . . . .	166
IX.- Notación . . . . .	168
X.- Bibliografía . . . . .	172

## CAPITULO I

## INTRODUCCION

Algunos de los problemas que frecuentemente se presentan en el diseño o simulación de un proceso químico, son los relacionados con la estimación adecuada de las diferentes propiedades físicas de las corrientes que intervienen en el proceso. Es por esto que el ingeniero químico debe disponer de una herramienta para evaluar dichas propiedades.

Durante los últimos años la habilidad para predecir propiedades termodinámicas y el equilibrio que ocurre entre una fase líquida y una vapor ha mejorado considerablemente. Un número representativo de métodos se basan en ecuaciones de estado. La primera ecuación de estado práctica la propuso J. D. van der Waals en 1873. Esta ecuación es un ejemplo importante, aunque sencillo, de una ecuación de estado cúbica en el volumen.

En 1949 Otto Redlich y J. N. S. Wong propusieron una ecuación de dos constantes, esta ecuación está basada en consideraciones principalmente prácticas y parece de un razonamiento teórico riguroso. La ecuación de Redlich-Wong se ha utilizado para correlacionar presión, volumen y temperatura, para estimar entalpías, equilibrio líquido-vapor y equilibrio entre fases.

Aún cuando se ha encontrado que esta ecuación da resultados razonablemente buenos al ajustar datos experimentales, K. S. Pitzer demostró que el teorema de estados correspondientes de dos parámetros no era suficiente para predecir datos volumétricos, introduciendo un tercer parámetro (factor acéntrico) necesario para una buena representación de la mayoría de las sustancias, con la excepción de algunas como el hidrógeno, helio y agua. Esto dio lugar a una serie de modificaciones

nes a la ecuación original de Redlich-Kwong, para obtener una mayor - precisión y desde entonces un gran número de ellas se han desarrollado.

Han aparecido ecuaciones tan simples que incluyen únicamente dos parámetros y por otro lado se han publicado ecuaciones con cincuenta parámetros. Este último tipo de ecuaciones se han utilizado para predecir con gran exactitud propiedades de fluidos; se puede citar como ejemplo la ecuación de BWR, la de Lee-Kesler y otras con fundamentos semiteóricos.

Aún cuando estas ecuaciones son deseables para trabajos de alta precisión no son prácticos para el cálculo rutinario de propiedades - termodinámicas, ya que consumen un considerable tiempo de computación. Por lo tanto, el atractivo de las ecuaciones de estado simples radica en la facilidad de cálculo. La mayoría de las ecuaciones de este tipo son cúbicas en el volumen y han disfrutado de gran popularidad debido a que la expresión cúbica es el orden de ecuación más bajo capaz de - representar adecuadamente el comportamiento tanto de líquidos como de vapores.

El presente trabajo consiste en la implementación de programas de cómputo para el cálculo de propiedades termodinámicas utilizando ecuaciones de estado cúbicas, para resolver problemas relacionados - con el equilibrio líquido-vapor multicomponente. Estos programas se - desarrollaron para las microcomputadoras Apple II (en lenguaje BASIC Applesoft), con que cuenta el Departamento de Computación de la Facultad de Química.

En la tabla I-A se listan las siete ecuaciones de estado utilizadas en esta tesis, indicándose el año en que fué propuesta la ecuación y el número de referencia en la bibliografía.

Tabla I-A.- ECUACIONES DE ESTADO IMPLEMENTADAS

<u>Autor (es) / Título</u>	<u>Fecha</u>	<u>No. de referencia</u>
Medlich-Kwong	1949	30
Soave original	1972	36
Soave- Graboski-Daubert	1978	7
Peng-Robinson	1976	21
Schmidt-Wenzel	1980	33
Harmens-Knapp	1980	10
Katel-Teja	1981	19

En el capítulo II se presenta un panorama general para el cálculo de propiedades termodinámicas con ecuaciones de estado. Este capítulo es un ejemplo de las herramientas que proporciona la termodinámica para la evaluación, por diferentes métodos, de las propiedades termodinámicas.

El planteamiento de problemas típicos de equilibrio líquido-vapor multicomponente y los procedimientos de resolución a estos problemas se presentan en el capítulo III.

En el capítulo IV se da una aplicación a los problemas resueltos en el capítulo III. Aquí se indica el tipo de diagramas termodinámicos que es posible construir a partir de la información obtenida.

En el capítulo V se presenta la formulación de un modelo matemático generalizado para un sistema de destilación por etapas de mezclas multicomponentes evaluando propiedades con las ecuaciones de estado.

Para realizar las pruebas correspondientes se construyó un archivo de datos (capítulo VI), potencialmente interrumpido por 468 componentes.

Los programas desarrollados se almacenaron en discos ( el Disk II



del Apple utiliza discos flexibles de 5 1/4 pulgadas). Para identificar el contenido de cada uno de los discos se etiquetaron de la siguiente manera :

Disco No.	Contenido
1	Cálculo de puntos de burbuja y/o rocío.
2	Cálculo de vaporizaciones súbitas o flash.
3	Construcción de la campana de la zona de dos fases.
4	Simulación de una columna de platos para la destilación multicomponente.

Cada uno de los discos contiene un Banco de Datos y un programa que permite modificarlo, de modo que cada uno de los discos es independiente de los otros. La descripción de los programas se expone en su oportunidad.

## CAPITULO II

CALCULO DE PROPIEDADES TERMODINAMICAS A PARTIR DE  
UNA ECUACION DE ESTADOA. GENERALIDADES

La importancia de una ecuación de estado no sólo estriba en que ésta relaciona las variables presión (P), volumen molar (v), temperatura (T) y composición (para mezclas uniformes), sino que a partir de la ecuación de estado se pueden encontrar todas las propiedades que caracterizan a un sistema como son : la entalpía, la entropía, la energía libre de Gibbs, la energía libre de Helmholtz, el potencial químico, la fugacidad, etcétera.

Existen dos caminos para calcular propiedades termodinámicas a partir de ecuaciones de estado, de acuerdo a que la ecuación sea explícita en el volumen molar o en la presión; esto se ilustra con las siguientes relaciones

$$v = v(T, P, \text{composición}) \quad (2-1)$$

$$P = P(T, v, \text{composición}) \quad (2-2)$$

Para el primer caso las expresiones para calcular la entalpía, la entropía y el coeficiente de fugacidad del componente i en una mezcla multicomponente son : (propiedades termodinámicas utilizadas en esta tesis)

$$H(T, P) - H^0(T) = \int_0^P \left[ v - T \left( \frac{\partial v}{\partial T} \right)_{P,n} \right] dP \quad (2-3)$$

$$S(T, P) - S^0(T, P) = \int_0^P \left[ \frac{nR}{P} - \left( \frac{\partial v}{\partial T} \right)_{P,n} \right] dP \quad (2-4)$$

$$\ln \varphi_i = \int_0^P \left[ \frac{\bar{V}_i}{RT} - \frac{1}{P} \right] dP \quad (2-5)$$

Donde V = volumen total ( V = nv )

n = número de moles de mezcla

R = constante universal de los gases

H = entalpía de la mezcla

S = entropía de la mezcla

$\bar{V}_i$  = volumen molar parcial del componente i

$\varphi_i$  = coeficiente de fugacidad del componente i

El superíndice (°) significa las propiedades calculadas como gas ideal. En el punto D de este capítulo se indica como calcular dichas propiedades.

En el segundo caso, es decir, para las ecuaciones de estado explícitas en la presión las expresiones para las mismas propiedades termodinámicas son :

$$H(T, P) - H^\circ(T) = \int_V^\infty \left[ P - T \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_{V,n} \right] dV + PV - nRT \quad (2-6)$$

$$S(T, P) - S^\circ(T, P) = \int_V^\infty \left[ \frac{nR}{V} - \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_{V,n} \right] dV + nR \ln \frac{PV}{nRT} \quad (2-7)$$

$$\ln \varphi_i = \int_V^\infty \left[ \frac{1}{RT} \left( \frac{\partial P}{\partial n_i} \right)_{T, V, n_{j \neq i}} - \frac{1}{V} \right] dV - \ln \frac{PV}{nRT} \quad (2-8)$$

La deducción de las expresiones anteriores se puede consultar en los textos de Balzhiser (5) o Fraunitz (26).

Las ecuaciones (2-5) a (2-8) son válidas tanto para mezclas gaseosas como para líquidas incluyendo toda clase de compuestos. El punto

clave en su utilización consiste en contar con la ecuación de estado adecuada a la aplicación que se desea, la cual debe ser válida desde el gas ideal ( $P = 0$  o  $V = \infty$ ) hasta las condiciones ( $P, T$ ) deseadas.

Como se mencionó en la introducción, se implementaron siete ecuaciones de estado cúbicas, todas explícitas en la presión por lo que enfocaremos nuestra atención a las expresiones (2-6) a (2-8) para el cálculo de las propiedades termodinámicas mencionadas. El resto de las propiedades se obtienen de las dos primeras,  $H$  y  $S$ , por las relaciones usuales :

$$\begin{aligned} U &= H - P V \\ A &= H - P V - T S \\ G &= H - T S \end{aligned} \quad (2-9)$$

$$C_p = \left( \frac{\partial H}{\partial T} \right)_p, \text{ etcétera}$$

donde  $U$  = energía interna

$A$  = energía libre de Helmholtz

$G$  = energía libre de Gibbs

$C_p$  = capacidad calorífica a presión constante

El cálculo de propiedades termodinámicas con este tipo de ecuaciones de estado requiere del uso de una computadora por la gran cantidad de operaciones que es necesario efectuar, sin embargo las ventajas que representa su uso son enormes, entre las que destacan las siguientes :

- a) Se utiliza el mismo procedimiento para el cálculo de propiedades de líquidos como de gases, ya sea mezclas o en componentes puros.
- b) No se necesita ninguna otra información para calcular fugacidades en mezclas gaseosas o líquidas, basta solamente la ecuación de estado.
- c) Para calcular entalpías y entropías de mezclas líquidas y gaseosas se necesita además de la ecuación de estado, la información

del calor específico de cada componente como gas ideal en función de la temperatura.

- d) La ecuación de estado contiene implícitamente ( con ayuda del inciso anterior) la información de la capacidad calorífica de gases reales o líquidos y calores de mezclado.
- e) Para incluir los casos en donde ocurran reacciones químicas basta añadir la información de la entalpía y energía libre de Gibbs de formación de los diferentes componentes en un estado determinado (normalmente se escoge el componente puro en su estado natural a 1 atm. y 25 °C).

Para el cálculo de las propiedades termodinámicas expresadas por las ecuaciones (2-6) a (2-8) se utilizó una ecuación cúbica general, de modo que ésta representara a las siete ecuaciones de estado implementadas y tiene la siguiente forma :

$$P = \frac{R T}{v - b} - \frac{a}{v^2 + (b + c)v - db} \quad (2-10)$$

donde a es función de la temperatura; b, c y d son constantes.

En la tabla II-A se dan los valores de los parámetros c y d para cada una de las siete ecuaciones de estado.

La ecuación de estado general (2-10) puede reescribirse en términos del factor de compresibilidad (zeta) y aplicando una transformación a las variables a, b, c y d.

El factor de compresibilidad se define como :

$$Z = \frac{P v}{R T} \quad (2-11)$$

y la transformación de variables está dada por :

$$A = \frac{a P}{(RT)^2} \quad ; \quad B = \frac{b P}{R T} \quad ; \quad C = \frac{c P}{R T} \quad y \quad D = \frac{d P}{R T} \quad (2-12)$$

Tabla II-A.- VALOR DE LAS CONSTANTES c y d PARA CADA UNA DE LAS  
SIETE ECUACIONES DE ESTADO INTERMEDIADAS.

<u>EQUACION DE ESTADO</u>	<u>VALOR DE c</u>	<u>VALOR DE d</u>
Redlich-Kwong	$\emptyset$	$\emptyset$
Soave original	$\emptyset$	$\emptyset$
Graboski-Laubert	$\emptyset$	$\emptyset$
Peng-Robinson	b	b
Schmidt-Wenzel	$3 \cdot \pi \cdot b$	$3 \cdot \pi \cdot b$
Harmens-Knapp	$b \cdot \left[ \frac{1 - 3\epsilon_0(\pi)}{\beta \cdot \epsilon_0(\pi)} \right]$	$b \cdot \left[ \frac{1 - 3\epsilon_0(\pi)}{\beta \cdot \epsilon_0(\pi)} \right]$
Fatel-Teja	$c(\pi)$	$c(\pi)$

Las cantidades A, B, C y D son adimensionales.

Sustituyendo las ecuaciones (2-11) y (2-12) en la ec. (2-10) e igualando a cero se tiene

$$f(Z) = Z^3 - (1-C)Z^2 + (A-B-C-B^2-BC-BD)Z - (AB-DB-DB^2) = 0 \quad (2-13)$$

### B. CALCULO DE LAS CONSTANTES DE COMPONENTES Puros

A continuación se presenta el cálculo de las constantes de componentes puros así como el de los parámetros de cada una de las siete ecuaciones de estado. Siguiendo el procedimiento acostumbrado, las constantes de los componentes puros se calculan utilizando las propiedades críticas de las sustancias, mediante las siguientes relaciones

$$a = \Omega_a \cdot (R^2 T_c^2 / P_c) \alpha(T_r, \omega) \quad (2-14)$$

$$b = \Omega_b \cdot (R T_c / P_c) \quad (2-15)$$

$$c = \Omega_c \cdot (R T_c / P_c) \quad (2-16)$$

$$d = \Omega_d \cdot (R T_c / P_c) \quad (2-17)$$

donde  $T_c$  = temperatura crítica

$P_c$  = presión crítica

$T_r$  = temperatura reducida ( $T_r = T/T_c$ )

$\omega$  = factor acéntrico de Pitzer

$\alpha(T_r, \omega)$  se encuentra ajustando la presión de vapor del componente puro. Es un factor adimensional y en el punto crítico  $\alpha(T_r, \omega) = 1$ . Las cantidades  $\Omega_a$ ,  $\Omega_b$ ,  $\Omega_c$  y  $\Omega_d$  deben satisfacer las condiciones de Van der Waals en el punto crítico, esto es que la primera y segundas derivadas de la presión con respecto al volumen a temperatura constante sean iguales a cero

$$\left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = \left( \frac{\partial^2 P}{\partial V^2} \right)_T = 0 \quad (2-18)$$

lo cual equivale a que la primera y segunda derivadas con respecto a  $Z$  de la función  $F(Z)$  definida por la ec. (2-13) sean iguales a cero

$$\frac{d F(Z)}{d Z} = \frac{d^2 F(Z)}{d Z^2} = 0 \quad (2-19)$$

sustituyendo la ec. (2-13) en la ec. (2-19) y utilizando el hecho de que la ec. (2-13) también debe cumplirse en el punto crítico se obtienen las siguientes tres ecuaciones :

$$3 \epsilon_c + \eta_c = 1 \quad (2-20)$$

$$\eta_a = (1 + \eta_b - \epsilon_c)^3 \quad (2-21)$$

$$\eta_b^3 + (2 - 3 \epsilon_c) \eta_b^2 + (3 \epsilon_c^2 + \eta_c - \eta_d) \eta_b - \epsilon_c^3 = 0 \quad (2-22)$$

donde  $\epsilon_c$  es  $Z$  calculada por la ecuación de estado en el punto crítico. Se tiene un sistema de tres ecuaciones con cinco variables ( $\eta_a, \eta_b, \eta_c, \eta_d$  y  $\epsilon_c$ ). Es necesario por tanto asignarle valores a dos de ellas o establecer dos relaciones para encontrar las variables restantes.

### 5.1. RESOLUCIONES PARTICULARES

- Ecuaciones de estado de Redlich-Kwong, Soave original y Graboski-Daubert :

En este caso se hace la siguiente asignación :

$$\eta_c = \eta_d = 0 \quad (2-23)$$

obteniéndose los siguientes valores para  $\eta_a, \eta_b$  y  $\epsilon_c$  :

$$\eta_a = \frac{1}{9(2^{1/3} - 1)} = 0.4274802355403 \quad (2-24)$$

$$\eta_b = \frac{2^{1/3} - 1}{3} = 0.095664051996496 \quad (2-25)$$

$$\epsilon_c = 1/3 \quad (2-26)$$



- Ecuación de estado de Peng-Robinson :

Para este caso las asignaciones son :

$$\Omega_c = \Omega_b \quad y \quad \Omega_d = \Omega_b \quad (2-27)$$

obteniendo los siguientes valores

$$\Omega_a = 0.4572355289208 \quad (2-28)$$

$$\Omega_b = \Omega_c = \Omega_d = 0.0777966739030 \quad (2-29)$$

$$\Sigma_c = 0.3074013086988 \quad (2-30)$$

- Ecuación de estado de Schmidt-Wenzel :

En este caso se hacen las siguientes asignaciones :

$$\Omega_c = \Omega_d \quad y \quad \Omega_c = 3m \cdot \Omega_b \quad (2-31)$$

los valores de las constantes se obtienen mediante el siguiente procedimiento :

Resolver la ecuación cúbica para  $\beta_c$  de

$$(1 + 6m)\beta_c^3 + 3\beta_c^2 + 3\beta_c - 1 = 0 \quad (2-32)$$

$$\text{luego} \quad \beta_c = \frac{1}{3(1 + \beta_c m)} \quad (2-33)$$

$$\Omega_a = (1 - \Sigma_c + \Omega_b)^3 \quad (2-34)$$

$$\Omega_b = \beta_c \cdot \Sigma_c \quad (2-35)$$

$$\Omega_c = \Omega_d = 3m \cdot \Omega_b \quad (2-36)$$

- Ecuación de estado de Harmens-Knapp :

Para este caso las asignaciones son :

$$\Omega_c = \Omega_d \quad y \quad \Omega_c = f(\Sigma_c) \quad \left[ \text{ver ec. (2-41)} \right] \quad (2-37)$$

las constantes se calculan mediante las siguientes relaciones ;

$$\epsilon_c = 0.0301 + 0.0384 \pi^2 + z_c \quad (2-38)$$

$$\eta_a = 1 - 3 \epsilon_c + 3 \epsilon_c^2 + \beta \epsilon_c (3 - 6 \epsilon_c + \epsilon_c) \quad (2-39)$$

$$\eta_b = \eta_c = \eta_d = \beta \cdot \epsilon_c \quad (2-40)$$

$$\text{donde } \beta = 0.10770 + 0.76405 \epsilon_c - 1.24282 \epsilon_c^2 + 0.96210 \epsilon_c^3 \quad (2-41)$$

$z_c$  = factor de compresibilidad crítico

- Ecuación de estado de Patel-Teja :

En este caso se hacen las siguientes asignaciones :

$$\eta_c = \eta_d \quad (2-42)$$

las constantes se calculan mediante el siguiente procedimiento :

$$\epsilon_c = 0.329032 - 0.076799 \pi + 0.0211947 \pi^2 \quad (2-43)$$

resolver la ecuación cúbica para  $\eta_b$  de :

$$\eta_b^3 + (2 - 3 \epsilon_c) \eta_b^2 + 3 \epsilon_c^2 \cdot \eta_b - \epsilon_c^3 = 0 \quad (2-44)$$

$$\eta_a = (1 - \epsilon_c + \eta_b)^3 \quad (2-45)$$

$$\eta_c = \eta_d = 1 - 3 \cdot \epsilon_c \quad (2-46)$$

## B.2. DEPENDENCIA DE $\alpha$ CON RESPECTO A LA TEMPERATURA A TRAVÉS DE LA FUNCIÓN $\alpha(\text{Tr}, \pi)$

Como se mencionó antes, la función  $\alpha(\text{Tr}, \pi)$  es necesaria para predecir correctamente las presiones de vapor de componentes puros; esta función siguiendo el trabajo de Soave (36) se define como :

$$\alpha = \left[ 1 + \pi (1 - \sqrt{\text{Tr}}) \right]^2 \quad (2-47)$$

para cada una de las siete ecuaciones de estado implementadas, excepto

para las ecuaciones de Redlich-Kwong y Harmens-Knapp, alfa está dada por la ec. (2-47). El valor del parámetro  $m$  es diferente para cada una de las ecuaciones de estado y son para :

$$\text{Soave original : } m = 0.480 + 1.574w - 0.176w^2 \quad (2-48)$$

$$\text{Graboski-Daubert : } m = 0.48502 + 1.55171w - 0.15613w^2 \quad (2-49)$$

$$\text{Peng-Robinson : } m = 0.37464 + 1.54226w - 0.26992w^2 \quad (2-50)$$

$$\text{Patel-Teja : } m = 0.452413 + 1.30982w - 0.295937w^2 \quad (2-51)$$

$$\text{Schmidt-Wenzel : } \begin{cases} m = m_0 + (5Tr - 3m_0 - 1)^2 / 70 & \text{para } Tr \leq 1 \\ m = m_0 + (4 - 3m_0)^2 / 70 & \text{para } Tr > 1 \end{cases} \quad (2-52)$$

$$\text{donde } m_0 = 0.465 + 1.347w - 0.528w^2 \quad (2-54)$$

Para la ecuación de Redlich-Kwong alfa está dada por :

$$\alpha = 1 / \sqrt{Tr} \quad (2-55)$$

Y para la ecuación de Harmens-Knapp alfa se define como :

$$\alpha = \left[ 1 + AH (1 - \sqrt{Tr}) - BH (1 - 1/Tr) \right]^2 \quad \text{para } Tr \leq 1 \quad (2-56)$$

$$\left. \begin{aligned} \text{donde } AH &= 0.50 + 0.27767w + 2.17225w^2 \\ BH &= -0.022 + 0.338w - 0.845w^2 \end{aligned} \right\} \quad \text{para } w \leq 0.2 \quad (2-57)$$

$$\left. \begin{aligned} AH &= 0.41311 + 1.14657w \\ BH &= 0.0118 \end{aligned} \right\} \quad \text{para } w > 0.2 \quad (2-58)$$

$$\alpha = 1 - (0.6258 + 1.5227w) \ln Tr + (0.1533 + 0.41w) (\ln Tr)^2 \quad (2-59)$$

para  $Tr > 1$

### C. EXTENSION A MEZCLAS. REGLAS DE MEZCLADO

La ecuación de estado cúbica general ec. (2-10) puede usarse para calcular propiedades de una mezcla si las constantes  $a$ ,  $b$ ,  $c$  y  $d$  son sustituidas por las constantes de la mezcla  $a_m$ ,  $b_m$ ,  $c_m$  y  $d_m$  ; para cal-

cular las constantes de la mezcla es necesario definir las reglas de combinación o mezclado de las constantes. Para las ecuaciones cúbicas en general las reglas de mezclado que han tenido gran aceptación son :

$$a_m = \sum_{i=1}^N \frac{Z_i}{Z_j} \sum_{j=1}^N Z_j a_{ij} \quad ; \quad a_{ij} = \sqrt{a_i a_j} \cdot (1 - k_{ij}) \quad (2-60)$$

$$b_m = \sum_{i=1}^N Z_i b_i \quad (2-61)$$

$$c_m = \sum_{i=1}^N Z_i c_i \quad (2-62)$$

$$d_m = \sum_{i=1}^N Z_i d_i \quad (2-63)$$

donde  $N$  es el número de componentes de la mezcla;  $Z_i$  es la fracción mol del componente  $i$ ; las  $b_i$ ,  $c_i$  y  $d_i$  son las constantes para los componentes puros; y las  $a_{ij}$  implican las  $a$  de los componentes puros (subíndices iguales) y los coeficientes cruzados (subíndices diferentes);  $k_{ij}$  es un factor de corrección empírico que se obtiene experimentalmente para cada par de componentes en la mezcla y recibe el nombre de parámetro de interacción binario. El número de interacciones en una mezcla multicomponente es  $N(N-1)/2$ , ya que  $k_{ij} = k_{ji}$  y  $k_{ii} = 0$ .

Los parámetros de interacción binarios  $k_{ij}$  han sido considerados en esta tesis independientes de la temperatura, presión y composición siendo así constantes para cada par de componentes.

#### D. PROPIEDADES TERMODINÁMICAS EN MEZCLAS MULTICOMPONENTES

La aplicación de la ec. (2-10) para mezclas multicomponentes en las relaciones termodinámicas (2-6) a (2-8) origina las siguientes expresiones para el cálculo de propiedades :

a) Entalpía :

$$H = \sum_{i=1}^N Z_i H_i^0 + RT \cdot \left[ (Z-1) + A_m \left( 1 - \frac{T}{a_m} \cdot \frac{da_m}{dT} \right) \cdot L \right] \quad (2-64)$$

$$H_1^g = (CACP_1)T + \frac{(CBCP_1)T^2}{2} + \frac{(CCCP_1)T^3}{3} + \frac{(CDCP_1)T^4}{4} + (CECP_1) \quad (2-65)$$

$$CECP_1 = (\Delta H_1^g)_1 - (CACP_1)T_0 - \frac{(CBCP_1)T_0^2}{2} - \frac{(CCCP_1)T_0^3}{3} - \frac{(CDCP_1)T_0^4}{4} \quad (2-66)$$

b) Entropía :

$$S = \sum_{i=1}^N Z_i (S_i^c - R \ln Z_i) - R \ln P + R \cdot \left[ \ln(Z - B_m) - A_m \left( \frac{T}{a_m} \cdot \frac{da_m}{dT} \right) \cdot L \right] \quad (2-67)$$

$$S_1^g = (CACF_1) \ln T + (CBCP_1)T + \frac{(CCCP_1)T^2}{2} + \frac{(CDCP_1)T^3}{3} + (CFCP_1) \quad (2-68)$$

$$CFCP_1 = (\Delta S_1^g)_1 - (CACF_1) \ln T_0 - (CBCP_1)T_0 - \frac{(CCCP_1)T_0^2}{2} - \frac{(CDCP_1)T_0^3}{3} + R \ln F_0 \quad (2-69)$$

c) Coeficiente de fugacidad :

$$\ln \psi_1 = - \ln (Z - B_m) + \frac{B_1}{(Z - B_m)} + A_1 L + \frac{2 A_m (B_1 + C_1)}{(Q^2 - I)} - \frac{A_m}{I} \cdot \left( L + \frac{2 Q}{Q^2 - I} \right) \cdot \left[ (B_m + C_m)(B_1 + C_1) + 2(D_m B_1 + B_m D_1) \right] \quad (2-70)$$

$$\text{donde } I = (B_m + C_m)^2 + 4B_m D_m \quad (2-71)$$

$$Q = 2Z + B_m + C_m \quad (2-72)$$

$$L = \frac{1}{\sqrt{I}} \ln \frac{Q - \sqrt{I}}{Q + \sqrt{I}} \quad (2-73)$$

$$A_1 = \frac{P}{(RT)^2} \sum_{j=1}^N Z_j a_{1j} \quad (2-74)$$

$$B_i = (P / RT) b_i \quad (2-75)$$

$$C_i = (P / RT) c_i \quad (2-76)$$

$$D_i = (P / RT) d_i \quad (2-77)$$

$$A_m = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N Z_i Z_j A_{ij} ; A_{ij} = \sqrt{A_i A_j} \cdot (1 - k_{ij}) \quad (2-78)$$

$$B_m = \sum_{i=1}^N Z_i B_i \quad (2-79)$$

$$C_m = \sum_{i=1}^N Z_i C_i \quad (2-80)$$

$$D_m = \sum_{i=1}^N Z_i D_i \quad (2-81)$$

CACP<sub>i</sub>, CBCP<sub>i</sub>, CCCP<sub>i</sub> y CDCP<sub>i</sub> son constantes de la ecuación del calor específico a presión constante del componente i como gas ideal y tiene la forma siguiente :

$$C_{pi}^{\circ} = (CACP_i) + (CBCP_i)T + (CCCP_i)T^2 + (CDCP_i)T^3 \quad (2-82)$$

( $\Delta H_f^{\circ}$ )<sub>i</sub> y ( $\Delta S_f^{\circ}$ )<sub>i</sub> son la entalpía y entropía de formación respectivamente de los componentes puros como gases ideales a 1 atm y 25 °C.

P<sub>o</sub> y T<sub>o</sub> denota el estado de referencia para el cálculo de H y S.

( P<sub>o</sub> = 1 atm y T<sub>o</sub> = 298.15 °K)

Por último se tiene

$$\frac{A_m}{a_m} \cdot \frac{da_m}{dT} = \frac{P}{(RT)^2} \cdot T \frac{da_m}{dT} \quad (2-83)$$

La derivada de a<sub>m</sub> con respecto a la temperatura es diferente para cada una de las ecuaciones de estado, por lo que a continuación se indica su valor :

- para Redlich-Kwong

$$\frac{T}{a_m} \cdot \frac{da_m}{dT} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N z_i z_j \frac{a_{ij}}{a_m} \left\{ - \left[ \frac{1}{4\alpha_i \sqrt{\text{Tr}_i}} + \frac{1}{4\alpha_j \sqrt{\text{Tr}_j}} \right] \right\} \quad (2-84)$$

- para Soave original, Graboski-Daubert, Peng-Robinson y Patel-Teja

$$\frac{T}{a_m} \cdot \frac{da_m}{dT} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N z_i z_j \frac{a_{ij}}{a_m} \left\{ - \left[ \frac{m_i \sqrt{\text{Tr}_i}}{2 \sqrt{\alpha_i}} + \frac{m_j \sqrt{\text{Tr}_j}}{2 \sqrt{\alpha_j}} \right] \right\} \quad (2-85)$$

- para Schmidt-Wenzel

$$\frac{T}{a_m} \cdot \frac{da_m}{dT} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N z_i z_j \frac{a_{ij}}{a_m} \left\{ - \left[ \frac{m_i \sqrt{\text{Tr}_i} + (1 - \sqrt{\text{Tr}_i})(2/7)(5\text{Tr}_i - 3m_{O_i})\text{Tr}_i}{2\sqrt{\alpha_i}} \right. \right. \\ \left. \left. + \text{igual par } j \right] \right\} \quad (2-86)$$

- para Harmens-Knapp

$$\frac{T}{a_m} \cdot \frac{da_m}{dT} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N z_i z_j \frac{a_{ij}}{a_m} \left\{ - \left[ \frac{(AE/2) \sqrt{\text{Tr}_i} + (BE/\text{Tr}_i)}{\sqrt{\alpha_i}} + \text{igual par } j \right] \right\} \\ \text{para } \text{Tr}_i \leq 1 \quad (2-87)$$

$$\frac{T}{a_m} \cdot \frac{da_m}{dT} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N z_i z_j \frac{a_{ij}}{a_m} \left\{ - \left[ \frac{(\emptyset.6258 + 1.5227 m_i) + (\emptyset.3066 + \emptyset.32 m_i) \cdot \right. \right. \\ \left. \left. \cdot \ln \text{Tr}_i + \text{igual par } j \right] \right\} \\ \text{para } \text{Tr}_i > 1 \quad (2-88)$$

## C A P I T U L O   I I I

## EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR EN SISTEMAS DE UNA ETAPA

Las relaciones de equilibrio líquido-vapor (ELV) son necesarias para resolver problemas de procesos químicos y de la industria del petróleo, tales como el cálculo de puntos de burbuja y rocío y el equilibrio de vaporización súbita o flash. El planteamiento de estos problemas y los procedimientos de resolución son los objetivos de este capítulo. Por lo tanto es conveniente establecer los criterios de equilibrio y definir algunas propiedades termodinámicas útiles en la resolución de estos problemas.

A. CRITERIOS DE EQUILIBRIO

En esta sección se considerarán los criterios termodinámicos que deben satisfacerse para que exista un estado de equilibrio entre una fase líquida y una vapor.

Las restricciones impuestas por la Termodinámica para estados de equilibrio de sistemas de multifases y multicomponentes fueron deducidos por Gibbs (C) para sistemas cerrados a temperatura y presión constantes y se enuncia de la siguiente manera : " En un sistema cerrado a T y P constantes el estado de equilibrio es aquel para el cual la energía de Gibbs,  $G = U + PV - TS$ , es mínima ". Este criterio de equilibrio proporciona un método general para determinar los estados de equilibrio. Se escribe una expresión para G como función del número de moles de los componentes en las diversas fases y se encuentra entonces el conjunto de valores de los números que minimizan G, sujeto a las restricciones de la conservación de la materia.

Aplicando este criterio de equilibrio entre una fase líquida y una vapor se obtiene



$$T^L = T^V \quad (3-1) \quad 20$$

$$P^L = P^V \quad (3-2)$$

$$\mu_i^L = \mu_i^V \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (3-3)$$

donde  $\mu_i$  es el potencial químico del componente  $i$ ; los superíndices  $L$  y  $V$  denotan las fases líquida y vapor respectivamente.

El potencial químico es una propiedad intensiva del sistema y es función de la temperatura, presión y composición del sistema.

La condición de equilibrio (3-1) se refiere al equilibrio térmico de las fases, de lo contrario habría transferencia de calor, la ecuación (3-2) es con respecto al equilibrio mecánico, ya que de otra manera la interfase no estaría fija y por último la ecuación (3-3) es la referente a la transferencia de masa.

En la práctica se ha encontrado otra propiedad que resulta más cómoda para resolver problemas de equilibrio, se le ha dado el nombre de fugacidad. Su definición para este sistema es

$$\mu_i^L - \mu_i^V = R T \ln \frac{f_i^L}{f_i^V} \quad (3-4)$$

donde  $f_i$  es la fugacidad del componente  $i$ . Si se sustituye la ec. (3-4) en la ec. (3-3) se obtiene que en el equilibrio

$$f_i^L = f_i^V \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (3-5)$$

la fugacidad tiene, en consecuencia, las mismas características de utilidad que el potencial químico como criterio de equilibrio.

#### OTRAS DEFINICIONES

- a) Relación de equilibrio líquido-vapor.- Aunque no es producto de la Termodinámica, la relación de equilibrio  $K_1$ , es una cantidad que resulta de gran utilidad en la resolución de los problemas de equi-

librio. La relación de equilibrio para un componente se define como :

$$K_i = K(T, P, X, Y) = \frac{Y_i}{X_i} \quad (3-6)$$

como está indicado  $K_i$  es función de la composición de ambas fases, temperatura y presión.

b) Relación fugacidad-coeficiente de fugacidad.- La relación es la siguiente :

$$f_i = \varphi_i Z_i P \quad (3-7)$$

donde  $Z_i$  es la fracción mol de  $i$ .

Para un componente en una mezcla multicomponente en fase vapor la ecuación (3-7) da

$$f_i^V = \varphi_i^V Y_i P \quad (3-8)$$

y para un componente en una mezcla líquida

$$f_i^L = \varphi_i^L X_i P \quad (3-9)$$

de acuerdo con la ec. (3-5), estas dos expresiones deben ser iguales, es decir,

$$\varphi_i^L X_i P = \varphi_i^V Y_i P \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (3-10)$$

y de la ecuación (3-6)

$$K_i = \frac{Y_i}{X_i} = \frac{\varphi_i^L}{\varphi_i^V} \quad (3-11)$$

donde  $\varphi_i^V$  y  $\varphi_i^L$  se calcularán con la ec. (2-7C). Entonces la relación de equilibrio  $K_i$  se evaluará, de ahora en adelante, con ecuaciones de estado.

### 3. PLANTEAMIENTO DE LOS PROBLEMAS DE ELV

Se tiene un sistema de dos fases, una líquida y una vapor, con  $N$  componentes. Las variables intensivas que definen a este sistema son :  $T, P, X_1, X_2, \dots, X_N, Y_1, Y_2, \dots, Y_N$ . El número de variables inten-

sivas anteriores es  $(2N + 2)$ . Las dos fases se encuentran en equilibrio y por ello cumplen con las condiciones (3-1) y (3-2), el equilibrio con respecto a la transferencia de masa está establecido por la ec. (3-3); estas  $N$  ecuaciones son relaciones entre las variables intensivas del sistema ya que los potenciales químicos son funciones de ellas. Además las fracciones mol deben sumar la unidad :

$$\sum_{i=1}^N X_i = 1 \quad (3-12)$$

$$\sum_{i=1}^N Y_i = 1 \quad (3-13)$$

Se tiene, entonces,  $(N + 2)$  ecuaciones con  $(2N + 2)$  incógnitas. Para poder resolver un problema de equilibrio es necesario especificar el valor de  $N$  variables intensivas; el sistema de las  $(N + 2)$  ecuaciones nos proporcionará el valor de las restantes  $(N + 2)$  variables intensivas.

El número de variables intensivas que es necesario especificar en un problema de equilibrio se conoce como grados de libertad del sistema; su cálculo para el caso general de  $M$  fases con  $N$  componentes sigue el mismo camino que en el caso tratado anteriormente para dos fases, dando como resultado

$$GL = N - M + 2 \quad (3-14)$$

donde  $GL$  son los grados de libertad. En el caso de dos fases  $GL = N$ , que es el resultado obtenido con anterioridad. A la ec. (3-14) se le conoce como la Regla de las Fases de Gibbs.

### B.1. PUNTOS DE BURBUJA Y RCCIG

Las  $N$  variables a especificar pueden ser la temperatura y la composición de una fase o la presión y composición de una fase. La composición de una fase se especifica con  $(N - 1)$  fracciones mol ya que la fracción mol restante se obtiene por diferencia con la unidad. Para

ilustrar lo anterior a continuación se muestra en forma de cuadro los problemas típicos de equilibrio líquido-vapor multicomponente :

PUNTOS DE BURBUJA Y ROCÍO

Tipo de problema cálculo de :	Especificaciones	Incógnitas
Temperatura de burbuja	$P, X_1$ 's	$T, Y_1$ 's
Temperatura de rocío	$P, Y_1$ 's	$T, X_1$ 's
Presión de burbuja	$T, X_1$ 's	$P, Y_1$ 's
Presión de rocío	$T, Y_1$ 's	$P, X_1$ 's

3.2. VAPORIZACIONES SUBITAS O FLASH

La figura (3-a) es la representación esquemática general de un flash en estado estacionario. Una corriente de alimentación que fluye con una velocidad de  $F$  moles por unidad de tiempo, y está formada por  $N$  componentes de fracción molar  $Z_i$ , entra en un recipiente que se mantiene a una temperatura  $T$  y una presión  $P$ . Las corrientes de salida se supone que están en equilibrio entre sí a  $T$  y  $P$ . Dependiendo de la naturaleza de los componentes y de la composición de la alimentación, existirá una fase vapor y una líquida. Se supone también que no se llevan a cabo reacciones químicas. El problema consiste en encontrar la cantidad y composición de cada una de las fases en equilibrio dada ciertas especificaciones. Aunque los casos donde se especifican  $F$  y  $T$  y donde se especifican  $HF$  y  $P$  son los más comunes, se considerarán casos donde se especifiquen pares diferentes de variables en el proceso de vaporización súbita o flash.

En forma de cuadro los problemas considerados son :

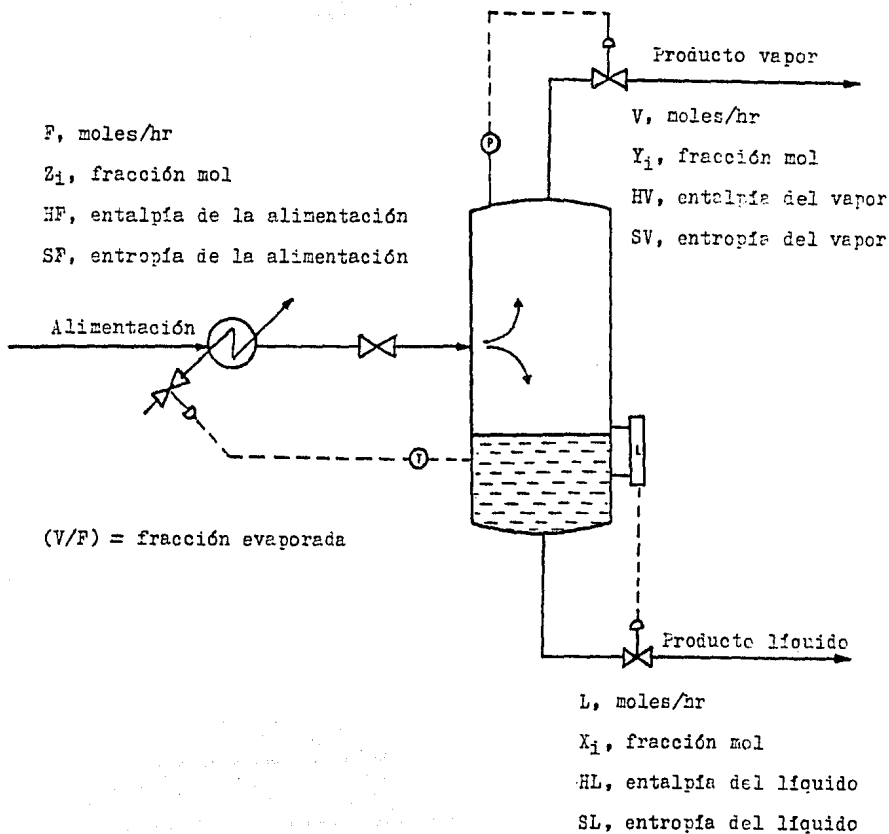


Fig. (3-a).- REPRESENTACION ESQUEMATICA GENERAL DE UN FLASH  
EN ESTADO ESTACIONARIO.

VAPORIZACION SUBITA O FLASH

Tipo de Flash	Especificaciones	Incógnitas
Isotérmico	P, T, Z <sub>1</sub> 's	X <sub>1</sub> 's, Z <sub>1</sub> 's, (V/F)
Adiabático	P, HF, Z <sub>1</sub> 's	T, X <sub>1</sub> 's, Y <sub>1</sub> 's, (V/F)
Isoentrópico	P, SF, Z <sub>1</sub> 's	T, X <sub>1</sub> 's, Y <sub>1</sub> 's, (V/F)
(V/F) constante	P, (V/F), Z <sub>1</sub> 's	T, X <sub>1</sub> 's, Y <sub>1</sub> 's
Isobárico	T, P, Z <sub>1</sub> 's	X <sub>1</sub> 's, Y <sub>1</sub> 's, (V/F)
Adiabático	T, HF, Z <sub>1</sub> 's	P, X <sub>1</sub> 's, Y <sub>1</sub> 's, (V/F)
Isoentrópico	T, SF, Z <sub>1</sub> 's	P, X <sub>1</sub> 's, Y <sub>1</sub> 's, (V/F)
(V/F) constante	T, (V/F), Z <sub>1</sub> 's	P, X <sub>1</sub> 's, Y <sub>1</sub> 's

C. RESOLUCION DE LOS PROBLEMAS DE DLVC. 1. PUNTOS DE BURBUJA Y ROCIO

- Para el vapor en el punto de burbuja debe satisfacerse la ecuación (3-15) o en términos de la relación de equilibrio

$$SS = \sum_{i=1}^N K_i X_i = 1 \quad (3-15)$$

La composición del vapor en el punto de burbuja en el equilibrio está dada por

$$Y_i = X_i \frac{\varphi_i^L}{\varphi_i^V} \quad (3-16)$$

- Para el líquido en el punto de rocío las ecuaciones son

$$SS = \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{K_i} = 1 \quad (3-17)$$

$$X_i = Y_i \frac{\varphi_i^V}{\varphi_i^L} \quad (3-18)$$

Un algoritmo generalizado se propone a continuación para los cálculos de los puntos de burbuja y rocío :

- 1.- Estimación inicial de las incógnitas.
- 2.- Con T, P y las  $X_i$ 's calcular :
  - 2.1.- Parámetros de la mezcla líquida [ ec. (2-78) a (2-81) ]
  - 2.2.- Resolver para  $\beta$  de la ec. cúbica (2-13) [ raíz de menor valor ]
  - 2.3.- Calcular  $\varphi_i^L$  con la ec. (2-70)
- 3.- Con T, P y las  $Y_i$ 's calcular :
  - 3.1.- Parámetros de la mezcla vapor [ ec. (2-78) a (2-81) ]
  - 3.2.- Resolver para  $\beta$  de la ec. (2-13) [ raíz de mayor valor ]
  - 3.3.- Calcular  $\varphi_i^V$  con la ec. (2-70)
- 4.- Calcular las relaciones de equilibrio  $K_i = \varphi_i^L / \varphi_i^V$
- 5.- Cálculo de la función SS :
  - 5.1.- Para el punto de burbuja con la ec. (3-15)
  - 5.2.- Para el punto de rocío con la ec. (3-17)
- 6.- Comprobar si se ha alcanzado la convergencia. Si la cantidad SS calculada por la ec. (3-15) o (3-17) está suficientemente cerca de la unidad el proceso termina.
- 7.- En caso de no cumplirse la condición del punto (6) se calcula una nueva temperatura o presión utilizando el método de Newton-Raphson :
  - 7.1.- En caso de que la temperatura sea la incógnita se calculan las relaciones de equilibrio a  $T + 1$  °K para evaluar numéricamente la derivada del error (SS - 1) con respecto a T manteniendo las composiciones de las fases líquida y vapor constantes. Si llamamos S1 a la suma de las fracciones mol desconocidas, evaluadas a la temperatura (T + 1), entonces la nueva temperatura está dada por :

$$(T)_{\text{nueva}} = (T)_{\text{anterior}} + DT \quad (3-19)$$

$$\text{donde } DT = (F1 - F0) \cdot T / (F1 - T \cdot F0 / (T + 1)) - T \quad (3-20)$$

$$F1 = \text{LOG}( S1 ) \quad \text{y} \quad F\emptyset = \text{LOG}( SS ) \quad (3-21)$$

7.2.- Cuando la presión es la incógnita se calculan las relaciones de equilibrio a P-1.01 ata para evaluar la derivada del error (SS - 1) con respecto a P manteniendo las composiciones de las fases líquida y vapor constantes. Si llamamos S1 a la suma de las fracciones mol desconocidas, evaluadas a la presión ( P-1.01 ), entonces la nueva presión está dada por :

$$(P) \text{ nueva} = (P)_{\text{anterior}} + DP$$

$$\text{donde } DP = P \cdot (S1 - SS) / ( S1 - 1 - ( SS - 1 ) \cdot P / ( P \cdot 1.01 ) ) - P \quad (3-22)$$

8.- Calcular los nuevos valores de la composición.

$$8.1.- \text{ Para el punto de burbuja con } Y_1 = K_1 X_1 / SS \quad (3-23)$$

$$8.2.- \text{ Para el punto de rocío con } X_1 = Y_1 / K_1 SS \quad (3-24)$$

9.- Regresar al punto (2).

El diagrama de bloques de este algoritmo se muestra en la fig. (3-b)

En el punto E de este capítulo se explica el cálculo de propiedades el cual es común a todos los programas desarrollados en esta tesis.

## C.2. VAPORIZACIONES SUBITAS O FLASH

La resolución de este tipo de problemas serán analizados por separado.

### C.2.1. FLASH ISOTERMICO O ISOBARICO

En este problema se especifica la alimentación global, la temperatura y la presión. Se desea saber si la alimentación es una sola fase, líquida o vapor, o una mezcla de ambas, encontrando la relación de vaporización (V/F) y las composiciones de las fases resultantes.

En caso de un flash isotérmico, en primer término se calculan las temperaturas de burbuja y rocío de la alimentación a la presión especi-



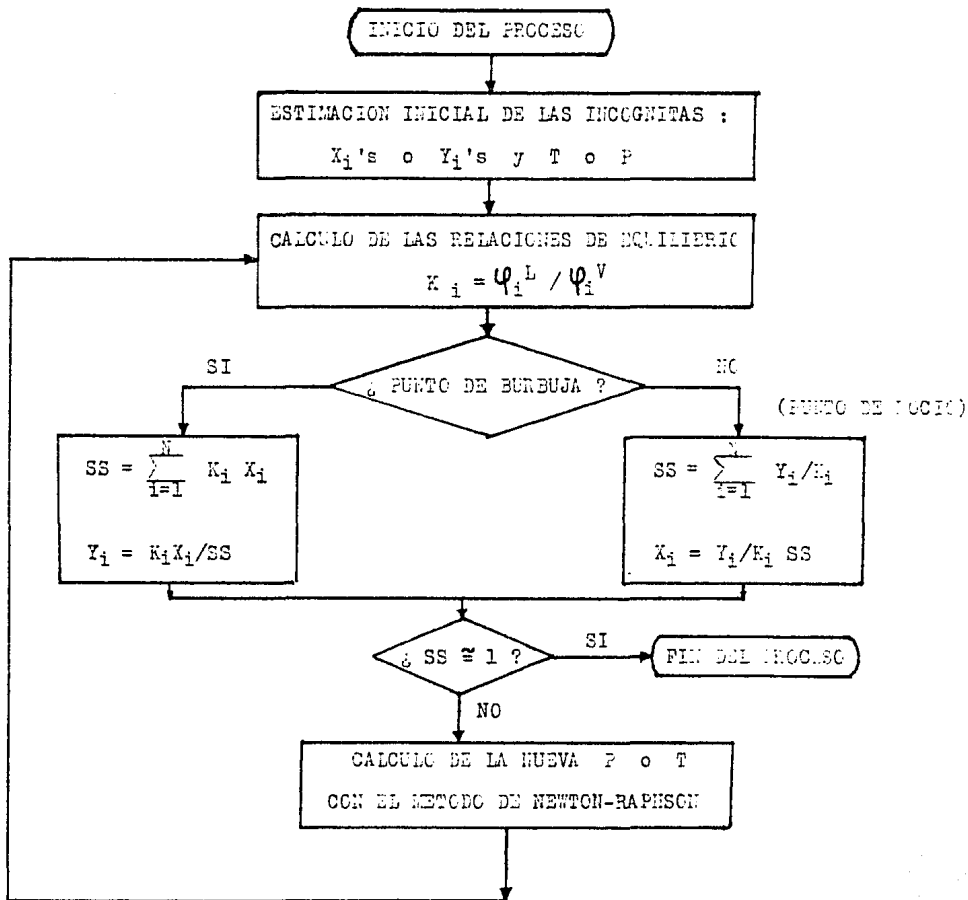


Fig. (3-b).- CALCULO DE LOS PUNTOS DE BURBUJA Y ROCIO

ficada. Si la temperatura especificada  $T$  es mayor que la temperatura de rocío, entonces la alimentación es solo vapor y  $(V/F) = 1$ . Si la temperatura  $T$  es menor que la temperatura de burbuja, entonces la alimentación es solo líquido y  $(V/F) = 0$ . Si la temperatura  $T$  está entre la temperatura de rocío y burbuja entonces la alimentación es una mezcla líquido-vapor con  $0 < (V/F) < 1$ .

En el caso de un flash isobárico, en primer término se calculan las presiones de burbuja y rocío de la alimentación a la temperatura especificada. Si la presión especificada  $P$  es menor que la presión de rocío, entonces la alimentación es solo vapor y  $(V/F) = 1$ . Si la presión  $P$  es mayor que la presión de burbuja, entonces la alimentación es solo líquido y  $(V/F) = 0$ . Si la presión  $P$  está entre la presión de rocío y burbuja entonces la alimentación es una mezcla líquido-vapor con  $0 < (V/F) < 1$ .

Aplicando un balance de materia al tanque flash para el componente  $i$ , se obtiene [ ver fig. (3-a) ]

$$F Z_i = L X_i + V Y_i \quad (3-25)$$

de acuerdo con un balance global de materia,

$$F = L + V \quad (3-26)$$

y de la ec. anterior

$$L = F - V \quad (3-27)$$

Sustituyendo la ec. (3-27) en la ec. (3-25), dividiendo entre  $F$ , introduciendo la relación de equilibrio para eliminar las  $Y_i$ 's, se obtiene

$$Z_i = X_i \cdot \left[ 1 + (K_i - 1) V/F \right] \quad (3-28)$$

y despejando la fracción mol del líquido se obtiene la siguiente ecuación

$$X_i = \frac{Z_i}{1 + (K_i - 1) V/F} \quad (3-29)$$

Utilizando la relación de equilibrio se obtiene una relación similar para la fracción mol en la fase vapor :

$$Y_i = \frac{Z_i K_i}{1 + (K_i - 1) V/F} \quad (3-30)$$

Para las ecuaciones anteriores se debe cumplir que :  $0 \leq V/F \leq 1$

Sea :

$$SX = \sum_{i=1}^N X_i \quad X_i = \frac{Z_i}{1 + (K_i - 1) V/F} \quad (3-31)$$

$$SY = \sum_{i=1}^N Y_i \quad Y_i = \frac{Z_i K_i}{1 + (K_i - 1) V/F} \quad (3-32)$$

$$f = SY - SX \quad (3-33)$$

Como SX y SY deben ser iguales a la unidad, entonces la cantidad f debe ser igual a cero. Combinando las ecuaciones (3-31), (3-32) y (3-33) se obtiene :

$$f = \sum_{i=1}^N \frac{Z_i (K_i - 1)}{1 + (K_i - 1) V/F} = 0 \quad (3-34)$$

La cantidad f es función de la relación de vaporización y en menor medida de las composiciones de las fases líquidas y vapor. Para encontrar el valor de V/F se utiliza el método de Newton-Raphson para obtener la raíz de una ecuación. Esto es

$$(V/F)_{\text{nueva}} = (V/F)_{\text{anterior}} - \frac{f}{\frac{d f}{d V/F}} \quad (3-35)$$

$$\text{donde} \quad \frac{d f}{d V/F} = - \sum_{i=1}^N \frac{Z_i (K_i - 1)^2}{[1 + (K_i - 1) V/F]^2} \quad (3-35a)$$

Las ecuaciones (3-29) y (3-30) proveen nuevas estimaciones para las composiciones de las fases líquida y vapor, respectivamente.

Entonces la secuencia de cálculo o algoritmo para resolver el flash isotérmico o isobárico es :

1.- Cálculo de los puntos de burbuja y rocío a las condiciones especificadas.

2.- Comprobar si se está en la zona de dos fases o una sola.

2.1.- Para el flash isotérmico :

- Si  $T \geq T_{\text{rocío}}$  la mezcla de alimentación es vapor y  $(V/F) = 1$
- Si  $T \leq T_{\text{burbuja}}$  la mezcla de alimentación es líquido y  $(V/F) = 0$
- Si  $T_{\text{burbuja}} < T < T_{\text{rocío}}$  la mezcla de alimentación es una mezcla líquido-vapor con  $0 < (V/F) < 1$

2.2.- Para el flash isobárico :

- Si  $P \leq P_{\text{rocío}}$  la mezcla de alimentación es vapor y  $(V/F) = 1$
- Si  $P \geq P_{\text{burbuja}}$  la mezcla de alimentación es líquido y  $(V/F) = 0$
- Si  $P_{\text{rocío}} < P < P_{\text{burbuja}}$  la mezcla de alimentación es una mezcla líquido-vapor con  $0 < (V/F) < 1$

3.- Estimación inicial de las incógnitas.

4.- Calcular las relaciones de equilibrio.

5.- Calcular  $SX$ ,  $SY$  y  $f$  ecuaciones (3-31), (3-32) y (3-33) respectivamente.

6.- Comprobar que se ha alcanzado la convergencia.

Si el valor absoluto de  $f$  es menor que una tolerancia preestablecida (p.e.  $1 \times 10^{-5}$ ) entonces los valores de las composiciones y de  $(V/F)$  son correctos y el proceso termina.

7.- En caso de no cumplirse el paso (6) se calcula por medio del método de Newton-Raphson un nuevo valor de  $(V/F)$  tal que la función  $f$  se acerque a cero; y se obtienen nuevos valores para las  $X_1$ 's y  $Y_1$ 's, normalizando los valores obtenidos por las ecuaciones (3-29) y (3-30), esto es  $X_1 / SX$  y  $Y_1 / SY$  para  $1 \leq i \leq N$

8.- Regresar al punto (4).

El diagrama de bloques para este algoritmo se muestra en la fig. (3-c).

### C.2.2. FLASH ADIABATICO

En el caso de un flash adiabático, la temperatura o presión del tanque es una incógnita más. En consecuencia es necesario disponer de una ecuación adicional para resolver el problema. Esta ecuación es el balance de energía para el tanque flash. Considerando operación a régimen permanente el balance de energía está dado por :

$$HF \cdot F = HV \cdot V + HL \cdot L \quad (3-36)$$

Varios autores (12) proponen las siguientes funciones que satisfacen el balance de materia y energía :

$$f = SY - SX \quad (3-36a)$$

$$g = \frac{HV \cdot SY \cdot (V/F) + HL \cdot SX \cdot (1 - V/F)}{HF} - 1 \quad (3-36b)$$

las cuales deben ser cero simultáneamente, las incógnitas son  $(V/F)$  y  $T$  o  $P$ , además de las composiciones de las dos fases en equilibrio. El algoritmo de cálculo es similar al seguido anteriormente, solo que ahora tenemos dos ecuaciones con dos incógnitas. Las composiciones de las fases en equilibrio se obtienen utilizando las ecuaciones (3-29) y (3-30) y se actualizan de igual forma que en el cálculo de los puntos de burbuja o rocío o del flash isotérmico. Para resolver el sistema de ecuaciones se utiliza el método de Newton-Raphson, que encuentra las raíces de un sistema de ecuaciones no lineales.

El algoritmo para el flash adiabático es :

- 1.- Cálculo de los puntos de burbuja y rocío a las condiciones especificadas.
- 2.- Comprobar si se está en la zona de dos fases o una sola.

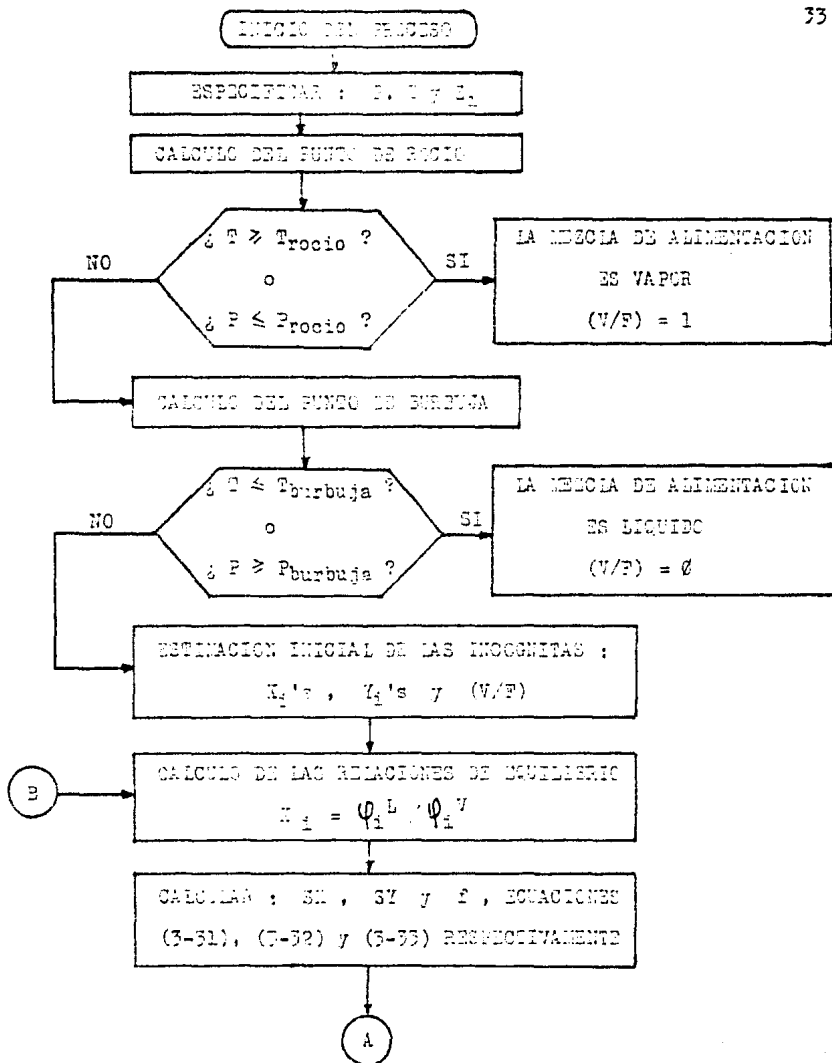
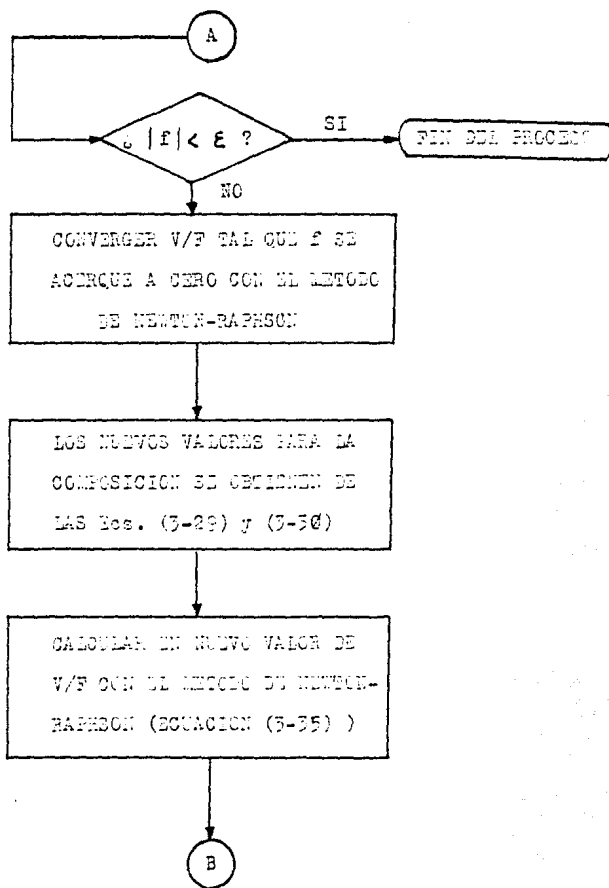


Fig. (3-c).- CALCULO DEL FLASH ISOTERMICO O ISOBARICO



Nota :

$\epsilon$  es la tolerancia preestablecida, cuyo valor utilizado dentro de los programas de cómputo es de  $1 \times 10^{-5}$ .

- Si  $H_F \geq H_{\text{rocío}}$  la mezcla de alimentación es vapor y  $(V/F) = 1$
- Si  $H_F \leq H_{\text{burbuja}}$  la mezcla de alimentación es líquido y  $(V/F) = 0$
- Si  $H_{\text{burbuja}} < H_F < H_{\text{rocío}}$  la mezcla de alimentación es una mezcla líquido-vapor con  $0 < (V/F) < 1$

3.- Estimación inicial de las incógnitas.

4.- Calcular las relaciones de equilibrio y las propiedades termodinámicas.

5.- Calcular  $S_X$ ,  $S_Y$ ,  $f$  y  $g$ , ecuaciones (3-31), (3-32), (3-36a) y (3-36b) respectivamente.

6.- Comprobar que se ha alcanzado la convergencia.

Si la cantidad  $\left[ (f^2 + g^2) / 2 \right]^{1/2}$  es menor que una tolerancia preestablecida entonces los valores de  $(V/F)$ ,  $T$  o  $P$  y composiciones son correctas y el proceso termina.

7.- En caso de no cumplirse el paso (6) se calculan las nuevas  $(V/F)$  y  $T$  o  $P$  con el método de Newton-Raphson :

7.1.- Calcular las derivadas de las funciones  $f$  y  $g$  con respecto a  $(V/F)$  :

$$\frac{df}{d(V/F)} \quad \text{con la ec. (3-35a)}$$

$$\frac{dg}{d(V/F)} = \sum_{i=1}^N \frac{Z_i K_i (HV - HL)}{(1 + (K_i - 1) V/F) \cdot HF} \quad (3-37)$$

7.2.- Calcular las relaciones de equilibrio y las propiedades termodinámicas a  $T + 0.2$  °K ( P.1.01 ata ) manteniendo las composiciones del líquido y vapor constantes, para calcular las derivadas de las funciones  $f$  y  $g$  con respecto a  $T$  o  $P$ . Los valores de las diferentes funciones se denotarán con una prima.

7.2.1.- Calcular :

$$f' = S_Y' - S_X' \quad (3-38)$$

$$g' = \frac{HV' \cdot S_Y' \cdot (V/F) + HL' \cdot S_X' \cdot (1 - V/F)}{HF} - 1 \quad (3-39)$$



iones  $SX'$  y  $SY'$  son calculadas con las ec. (3-31) y (3-32) respectivamente, utilizando las  $K_1$ 's obtenidas con la nueva temperatura o presión.

5.2.1.a. Cuando la temperatura es incógnita :

$$\frac{d f}{d T} = (f' - f) / \emptyset.2 \quad (3-40)$$

$$\frac{d g}{d T} = (g' - g) / \emptyset.2 \quad (3-41)$$

Sea :

$$DET = \frac{d f}{d(V/F)} \cdot \frac{d g}{d T} - \frac{d f}{d T} \cdot \frac{d g}{d(V/F)} \quad (3-42)$$

entonces

$$(V/F)_{nueva} = (V/F)_{anterior} - \frac{f \cdot \frac{d g}{d T} - g \cdot \frac{d f}{d T}}{DET} \quad (3-43)$$

$$(T)_{nueva} = (T)_{anterior} - \frac{g \cdot \frac{d f}{d(V/F)} - f \cdot \frac{d g}{d(V/F)}}{DET} \quad (3-44)$$

5.2.1.b. Cuando la presión es incógnita :

$$\frac{d f}{d P} = \frac{f' - f}{\emptyset.01 \cdot P} \quad (3-45)$$

$$\frac{d g}{d P} = \frac{g' - g}{\emptyset.01 \cdot P} \quad (3-46)$$

$$DET = \frac{d f}{d(V/F)} \cdot \frac{d g}{d P} - \frac{d f}{d P} \cdot \frac{d g}{d(V/F)} \quad (3-47)$$

$$(V/F)_{nueva} = (V/F)_{anterior} - \frac{f \cdot \frac{d g}{d P} - g \cdot \frac{d f}{d P}}{DET} \quad (3-48)$$

$$(P)_{\text{nueva}} = (P)_{\text{anterior}} - \frac{g \cdot \frac{i F}{d(V/F)} - f \cdot \frac{i G}{d(V/F)}}{\text{DET}} \quad (3-49)$$

donde  $\frac{i F}{d(V/F)}$  y  $\frac{i G}{d(V/F)}$  se calculan con las ec. (3-35a) y (3-37) respectivamente.

6.- Los nuevos valores para la composición se obtienen normalizando las  $X_i$ 's y  $Y_i$ 's obtenidas por las ec. (3-39) y (3-38), es decir

$$X_i = X_i / \sum X_i \quad 1 \leq i \leq N \quad (3-50)$$

$$Y_i = Y_i / \sum Y_i \quad 1 \leq i \leq N \quad (3-51)$$

7.- Regresar al punto (4).

### 3.2.5. FLASH ISOCENTRICO

El planteamiento de este tipo de problema es idéntico al caso tratado anteriormente. Para obtener las ecuaciones que describen al flash isocentrópico es necesario sustituir la entropía por la entalpía de las diferentes corrientes que intervienen en el proceso.

Un diagrama de bloques para ambos tipos de flash se muestra en la figura (3-d).

### 3.2.1. FLASH (V/F) CONSTANTE

En este caso se especifica la relación de vaporización y la temperatura o presión y se desea encontrar la temperatura o presión a la que debe operar para satisfacer la vaporización requerida. Las ecuaciones que se deben cumplir son las mismas que en el caso de un flash isotérmico. La función  $f = \sum Y_i - \sum X_i$  es ahora dependiente de T o P (la que desconocamos), y se utiliza un algoritmo basado en el método de Newton-Raphson para encontrar la raíz de la ecuación, o sea el valor de T o P.

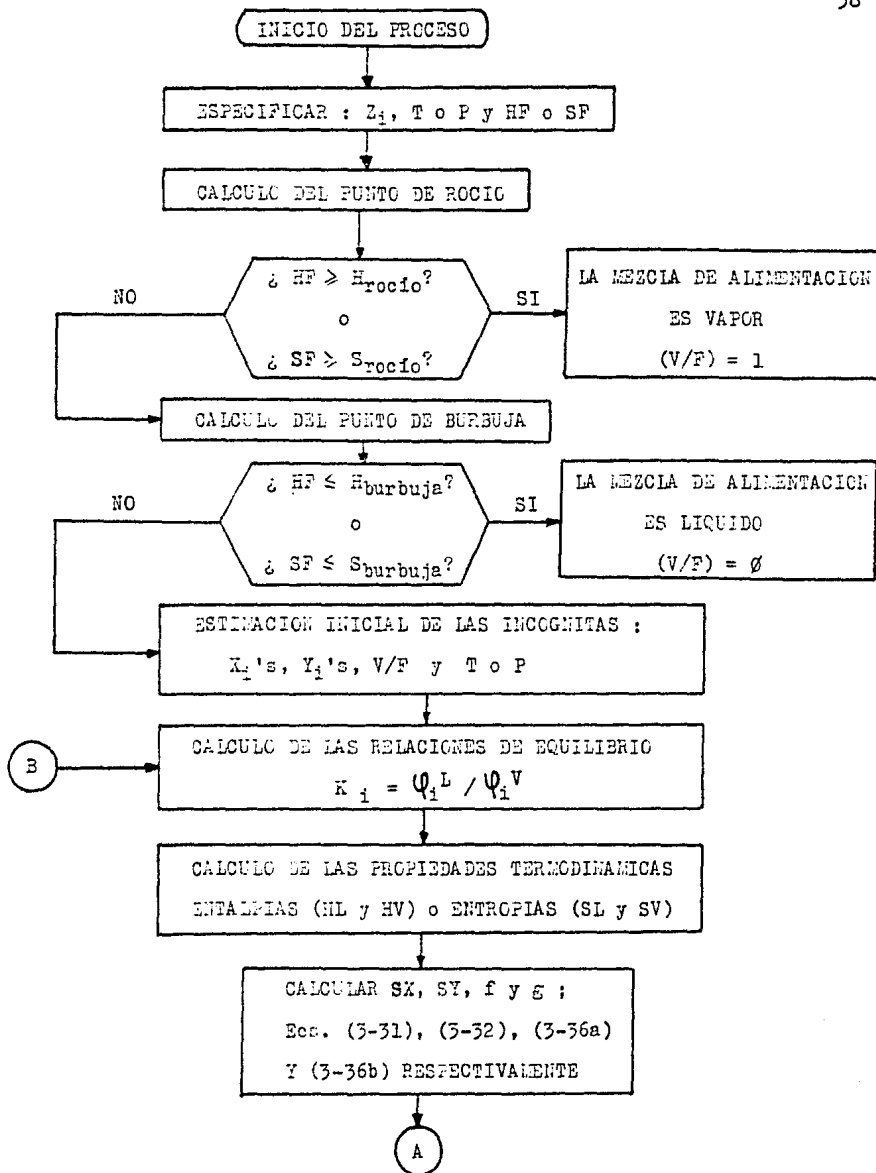
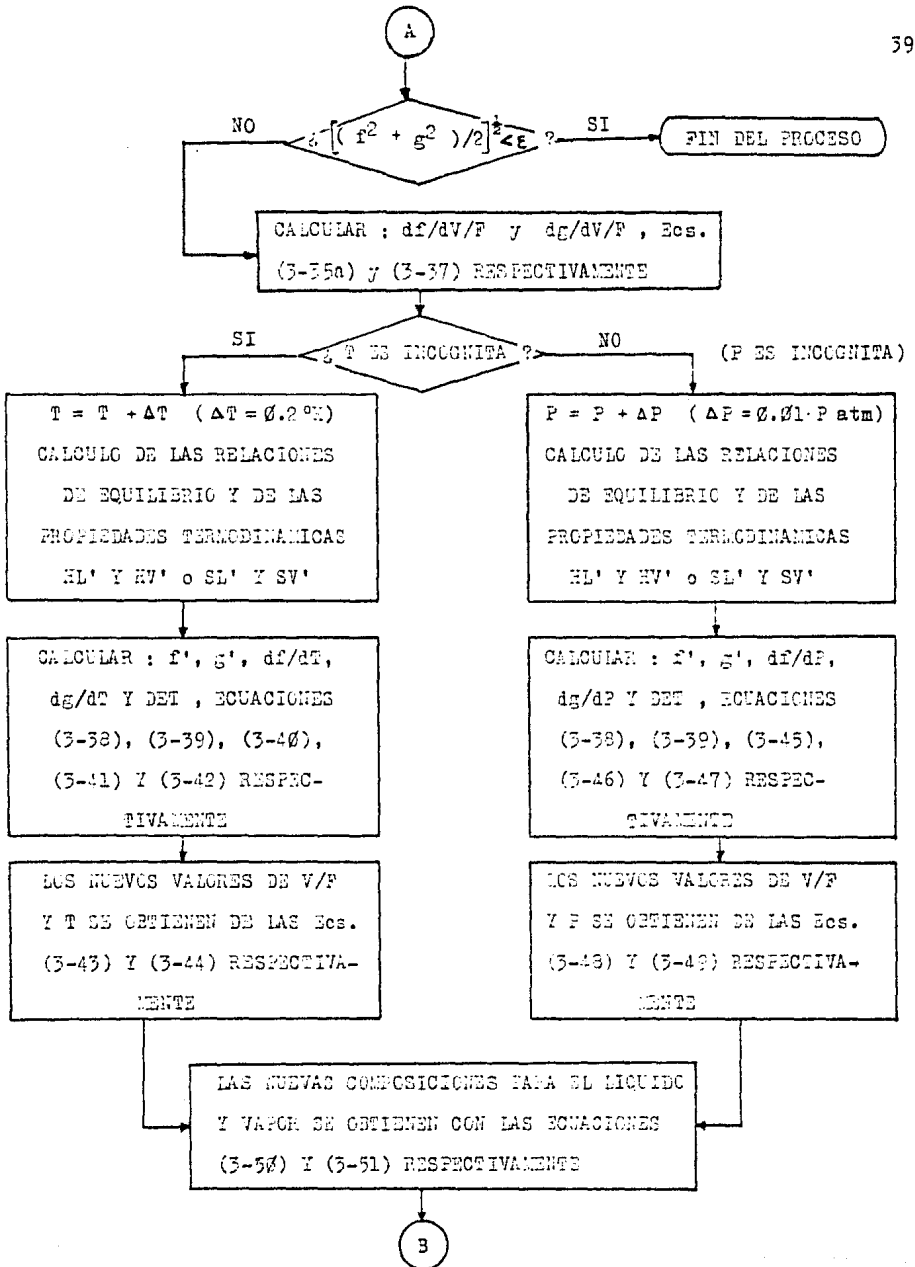


Fig. (3-d).- CALCULO DE UN FLASH ADIABATICO O ISCENTROPICO.



El algoritmo de cálculo es el siguiente :

- 1.- Cálculo de los puntos de burbuja y rocío a las condiciones especificadas para acotar la incógnita.
- 2.- Comprobar si se está en la zona de dos fases o una sola.
  - Si  $(V/F) \geq 1$  la mezcla de alimentación es vapor
  - Si  $(V/F) \leq \delta$  la mezcla de alimentación es líquido
  - Si  $\delta < (V/F) < 1$  la alimentación es una mezcla líquido-vapor
- 3.- Estimación inicial de las incógnitas.
- 4.- Calcular las relaciones de equilibrio.
- 5.- Calcular SK, SY y F, ecuaciones (3-31), (3-32) y (3-36a) respectivamente.
- 6.- Comprobar que se ha alcanzado la convergencia.

Si el valor absoluto de f es menor que una tolerancia preestablecida entonces los valores de las composiciones y de T o P son correctos y el proceso termina.

- 7.- En caso de no cumplirse el paso (6) se calculan la nueva temperatura o presión con el método de Newton-Raphson :

- 7.1.- Cuando la temperatura es incógnita :

Calcular las relaciones de equilibrio a  $T + 0.2^\circ\text{K}$  manteniendo las composiciones del líquido y vapor constantes, para calcular la derivada de la función f con respecto a T. Entonces

$$(T)_{\text{nueva}} = (T)_{\text{anterior}} - \frac{f}{\frac{df}{dT}} \quad (3-32)$$

donde  $\frac{df}{dT}$  se calcula con la ec. (3-40).

- 7.2.- Cuando la presión es incógnita :

Calcular las relaciones de equilibrio a  $P \cdot 1.01$  atm manteniendo las composiciones del líquido y vapor constantes, para cal-

cular la derivada de la función  $f$  con respecto a  $P$ . Entonces

$$(P) \text{ nueva} = (P) \text{ anterior} - \frac{f}{\frac{d f}{d P}} \quad (3-53)$$

donde  $\frac{d f}{d P}$  se calcula con la ec. (3-45).

8.- Los nuevos valores para la composición se obtienen mediante las ecuaciones (3-50) y (3-51).

9.- Regresar al punto (4).

El diagrama de este tipo de flash se muestra en la fig. (3-e).

### C.3. ESTIMACION INICIAL DE LAS INCOGNITAS

En los algoritmos de cálculo propuestos anteriormente para los problemas de ELV considerados, se hace mención en uno de los puntos a la estimación inicial de las incógnitas. En esta sección se indicará como se llevaron a cabo dichas estimaciones iniciales.

#### C.3.1. PUNTOS DE BURBUJA Y ROCÍO

- Temperatura y composición.

Cuando la temperatura y la composición (de una de las fases) son incógnitas se trata de los problemas relacionados con el cálculo de la temperatura de burbuja o de rocío. En ambos casos para hacer la estimación inicial de la composición se hace uso de relaciones de equilibrio ideales que se definen como :

$$K_i = \frac{P_{VAP_i}}{P} \quad 1 \leq i \leq N \quad (3-54)$$

donde  $P_{VAP_i}$  = presión de vapor del componente  $i$ ;  $P$  es la presión total del sistema.

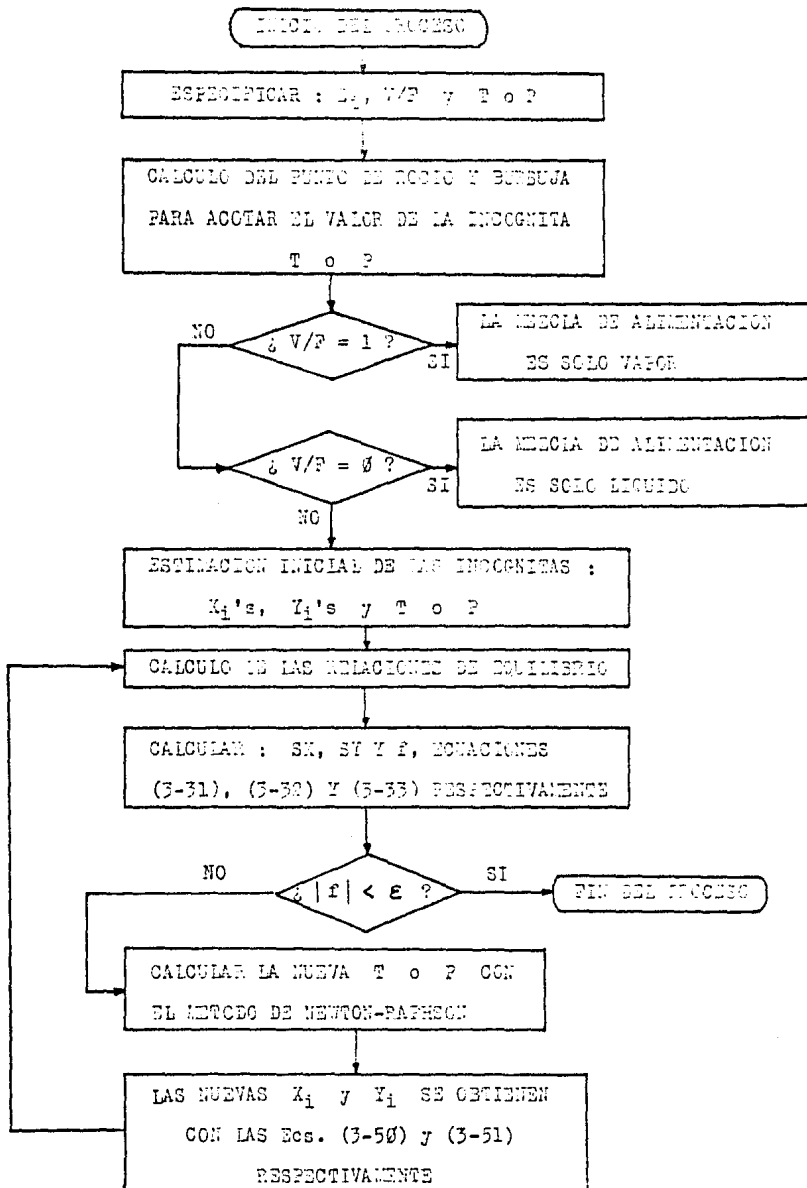


Fig. (3-e).-- CALCULO DEL FLASH V/F CONSTANTE

El cálculo de PVAP se hace mediante el siguiente procedimiento :

Como el logaritmo de la presión de vapor de una sustancia es aproximadamente lineal con respecto a la recíproca de la temperatura absoluta, se puede escribir lo siguiente (35)

$$\log_{10} \left( \frac{PVAP}{P_c} \right) = a - \left( \frac{b}{T_r} \right) \quad (3-55)$$

donde  $a$  y  $b$  son constantes. La curva de presión de vapor termina en el punto crítico donde  $PVAP/P_c = 1$  ( $T_r = 1$ ); por tanto, en el punto crítico, la ecuación de presión de vapor reducida [ ec. (3-55) ] se convierte en

$$\varnothing = a - b \quad (3-56)$$

o sea,  $a = b$ . En consecuencia, la ec. (3-55) se escribirá :

$$\log_{10} \left( \frac{PVAP}{P_c} \right) = a \left( 1 - \frac{1}{T_r} \right) \quad (3-57)$$

Así pues,  $a$  es la pendiente negativa de la curva de presión de vapor reducida cuando  $\log_{10} (PVAP/P_c)$  en función de  $1/T_r$  se representa mediante una línea recta. Para determinar el valor de  $a$  en función de parámetros conocidos, se utilizó la definición del factor acéntrico  $\omega$ , sugerido por Pitzer :

$$\omega = - \log_{10} \left( \frac{PVAP}{P_c} \right) \Bigg|_{T_r = \varnothing.7} - 1.0 \varnothing \varnothing \quad (3-58)$$

Si despejamos  $a$  de la ec. (3-57), sustituyendo el término logarítmico por el de la ec. (3-58) y teniendo en cuenta que  $T_r$  debe ser igual a  $\varnothing.7$  se obtiene

$$a = \frac{7}{3} ( 1 + \omega ) \quad (3-59)$$

Sustituyendo este resultado en la ec. (3-57) se tiene :

$$\log_{10} \left( \frac{PVAP}{P_c} \right) = \frac{7}{3} \cdot ( 1 + \omega ) \cdot \left( 1 - \frac{1}{T_r} \right) \quad (3-60)$$



y en logaritmos base e :

$$\ln \left( \frac{PVAP}{P_c} \right) = 5.3727 \cdot (1 + w) \cdot \left( 1 - \frac{1}{T_r} \right) \quad (3-61)$$

que es la expresión utilizada en los programas de cómputo. Entonces las  $K_i$  ideales de la ec. (3-54) están dadas por :

$$K_i = \frac{P_{c_i} \cdot \left[ \exp(5.3727 \cdot (1 + w_i) \cdot (1 - 1/T_{r_i})) \right]}{P} \quad (3-62)$$

Dado que las  $K_i$  son función de la temperatura y la temperatura es incógnita, se tiene que recurrir a un método numérico para encontrar la temperatura tal que haga que la suma de las fracciones mol desconocidas sumen la unidad. El algoritmo es el siguiente :

- 1.- Suponer  $T = 400 \text{ } ^\circ\text{K}$
- 2.- Calcular las  $K_i$  con la ec. (3-62) para  $1 \leq i \leq N$
- 3.- Calcular las fracciones mol desconocidas.
  - 3.1.- Para el cálculo de la temperatura de burbuja :  $Y_i = K_i X_i$
  - 3.2.- Para el cálculo de la temperatura de rocío :  $X_i = Y_i / K_i$
- 4.- Calcular la suma de las fracciones mol obtenidas.

$$SY = \sum_{i=1}^N Y_i = \sum_{i=1}^N K_i X_i$$

$$SX = \sum_{i=1}^N X_i = \sum_{i=1}^N Y_i / K_i$$

- 5.- Comprobar si se ha alcanzado la convergencia.

Si el valor de SX o SY están lo suficientemente cerca de la unidad el proceso termina. La temperatura es correcta y se normalizan las composiciones obtenidas ( $X_i = X_i / SX$  o  $Y_i = Y_i / SY$ ,  $1 \leq i \leq N$ )

- 6.- En caso de no cumplirse el paso (5) se calcula por medio del método de Newton-Raphson un nuevo valor de T tal que SX o SY se acerquen a la unidad.
- 7.- Regresar al punto (2).

En la subrutina denotada por la línea 4000 del programa y llamada «Subrutina que estima temperatura y composición inicial» se encuentran las sentencias correspondientes al algoritmo de cálculo anterior. Para comprender mejor dichas sentencias hay que tener en cuenta que si la variable  $BR = 3$  se trata del cálculo de la temperatura de burbuja; si  $BR = 4$  corresponde al cálculo de la temperatura de rocío.

#### - Presión y composición.

Cuando la presión y la composición son incógnitas se trata de los problemas relacionados con el cálculo de la presión de burbuja o de rocío. La estimación inicial de las incógnitas se hace de la siguiente manera:

Teniendo en cuenta la siguiente relación (válida para soluciones ideales en equilibrio con una mezcla de gas ideal)

$$PVAP_i \cdot X_i = P \cdot Y_i \quad 1 \leq i \leq N \quad (3-63)$$

Si se trata del cálculo de la presión de burbuja el procedimiento es:

1.- Calcular  $Y_i = X_i PVAP_i$

$$SUMA = \sum_{i=1}^N Y_i \quad 1 \leq i \leq N$$

donde  $PVAP_i$  se obtiene de la ec. (3-61)

2.- Normalizar la composición obtenida.

$$Y_i = \frac{X_i PVAP_i}{SUMA} \quad \text{lo cual equivale a} \quad Y_i = \frac{\frac{X_i PVAP_i}{P}}{\sum_{i=1}^N \frac{X_i \cdot PVAP_i}{P}} \quad (P \text{ se cancela})$$

3.- Calcular la presión inicial de burbuja.

De la ec. (3-63)

$$\sum_{i=1}^N PVAP_i \cdot X_i = P \cdot \sum_{i=1}^N Y_i$$

y como  $SUMA = \sum_{i=1}^N PVAP_i \cdot X_i$  y  $\sum_{i=1}^N Y_i = 1$  entonces :

$$P = SUMA$$

Para el cálculo de la presión inicial de rocío el procedimiento es:

1.- Calcular  $X_i = Y_i / FVAP_i$

$$SUMA = \sum_{i=1}^N X_i \quad 1 \leq i \leq N$$

2.- Normalizar la composición obtenida.

$$X_i = \frac{Y_i / FVAP_i}{SUMA} \quad 1 \leq i \leq N$$

3.- Calcular la presión inicial de rocío.

De la ec. (5-63) se puede obtener la siguiente relación:

$$\sum_{i=1}^N X_i = P \sum_{i=1}^N Y_i / FVAP_i$$

y dado que

$$\sum_{i=1}^N Y_i / FVAP_i = SUMA \quad \text{y} \quad \sum_{i=1}^N Y_i = 1 \quad \text{entonces :}$$

$$P = 1/SUMA$$

En la subrutina denotada por la línea 4500 del programa " llamada «Subrutina que estima presión y composición inicial» se encuentran las sentencias correspondientes a los algoritmos de cálculo anteriores. En esta parte del programa si la variable BR = 1 el problema consiste en el cálculo de la presión de burbuja. Para el cálculo de la presión de rocío la variable BR toma el valor de 2 (BR = 2).

### C.3.2. VAPORES DE SUELTAS O FLASE

Para hacer las estimaciones iniciales de las incógnitas de estos

problemas se utiliza la información obtenida en los cálculos de los puntos de burbuja y rocío calculados con anterioridad. A continuación se indica como calcular cada una de las incógnitas.

- Relación de vaporización (V/F)

La relación de vaporización es incógnita en los flashes isotérmico, adiabático, isoentrópico e isobárico.

Para el flash isotérmico (V/F) se calcula mediante :

$$(V/F) = \frac{T - T_{\text{burbuja}}}{T_{\text{rocío}} - T_{\text{burbuja}}} \quad T \text{ es la temperatura especificada.}$$

Para el flash adiabático (V/F) se obtiene de :

$$(V/F) = \frac{HF - H_{\text{burbuja}}}{H_{\text{rocío}} - H_{\text{burbuja}}} \quad HF \text{ es la entalpía de alimentación especificada.}$$

Para el flash isoentrópico (V/F) se calcula mediante :

$$(V/F) = \frac{SF - S_{\text{burbuja}}}{S_{\text{rocío}} - S_{\text{burbuja}}} \quad SF \text{ es la entropía de alimentación especificada.}$$

Para el flash isobárico (V/F) se calcula con

$$(V/F) = \frac{P - P_{\text{burbuja}}}{P_{\text{rocío}} - P_{\text{burbuja}}} \quad P \text{ es la presión especificada}$$

- Temperatura

La temperatura es incógnita en los flashes adiabático, isoentrópico y (V/F) constante. Para todos estos casos se calcula la temperatura inicial con :

$$T = T_{\text{burbuja}} + (V/F) \left[ (T_{\text{rocío}} - T_{\text{burbuja}}) \right]$$

- Presión:

La presión es incógnita en los flashes adiabático, isoentrópico y (V/F) constante. Para estos casos la presión inicial se calcula con :

$$P = P_{\text{burbuja}} + (V/F) \left[ P_{\text{rocío}} - P_{\text{burbuja}} \right]$$

- Composición:

La composición es incógnita en todos los problemas de flasheo y se obtienen mediante el siguiente procedimiento :

1.- Calcular

$$K_i = K_{i,\text{burbuja}} + (V/F) \left[ K_{i,\text{rocío}} - K_{i,\text{burbuja}} \right]$$

$$K_i = \frac{Z_i}{1 + (K_i - 1) V/F} \quad ; \quad SK = \sum_{i=1}^N K_i$$

$$Y_i = K_i X_i \quad ; \quad SY = \sum_{i=1}^N Y_i$$

2.- Normalizar la composición obtenida para ambas fases, o sea :

$$X_i = X_i / SK \quad 1 \leq i \leq N$$

$$Y_i = Y_i / SY \quad 1 \leq i \leq N$$

Como se puede observar en todas las estimaciones iniciales, estas se hicieron interpolando linealmente de los resultados obtenidos en los cálculos de los puntos de burbuja y rocío. Estos cálculos sirven también para acotar el valor de las incógnitas.

#### D. DESCRIPCIÓN DE LOS PROGRAMAS

##### D.1. PUNTO DE BURBUJA Y ROCÍO (contenido en el disco No. 1)

Por cuestiones relacionadas con la capacidad de memoria de las Apple II, la resolución de este tipo de problemas (y todos los demás) se

tuvo que realizar por partes. Para el cálculo de puntos de burbuja y rocío se necesitaron los partes, la primera tiene que ver con el cálculo de las constantes de componentes puros principalmente y la segunda tiene que ver con el proceso iterativo que tiene lugar para resolver el problema especificado. A continuación se describen brevemente ambas partes (cada parte corresponde a un programa de cómputo).

#### D.1.1. PRIMERA PARTE : PROGRAMA QUE OBTIENE LOS PARÁMETROS DE

#### COMPONENTES Puros (ver apéndice A-1)

El programa comienza preguntando cuál de las siete ecuaciones de estado implementadas se va a escoger para el cálculo de las propiedades termodinámicas. En seguida se pide al usuario alimentar lo siguiente :

- El número de componentes que constituyen la mezcla. Un máximo de 20 componentes es permitido; el número de componentes determina en cierto grado la velocidad de procesamiento, esto es, si hay pocos componentes los programas corren más rápido.
- Por cada componente se requiere de las constantes críticas, el factor acéntrico de Pitzer, las constantes de la ecuación calorífica del gas ideal en función de la temperatura, la entalpía y energía libre de Gibbs de formación a 25 °C y 1 atm. Estos datos se pueden introducir desde el teclado o bien leyendo estos de disco. Lo último supone el conocimiento de la existencia de un banco de datos y el contenido del mismo (capítulo VI), así como la manera de identificar a los componentes (cada componente tiene un número específico). Cuando se leen datos de disco y no se encuentran completos los parámetros requeridos para todos los componentes o bien cuando se introducen desde el teclado datos no válidos el programa lo detecta e imprime un mensaje de error, pidiendo al usuario que verifique los datos.
- El estado de referencia para el cálculo de entalpías y entropías. Aquí se da a elegir entre las de formación estándar ( $P_0 = 1 \text{ atm.}$  y  $T_0 = 298.15 \text{ °K}$ ) o uno establecido por el usuario.

- Parámetros de interacción binarios (es opcional).

Sólo es necesario alimentar los  $N(N-1)/2$   $K_{1j}$ 's ; el programa genera la matriz completa de los  $K_{ij}$ 's para la mezcla.

- Seleccionar las unidades para las variables más importantes ( P, T y H). Esto es con el fin de evitar que el usuario tenga que hacer conversiones de unidades por haber utilizado un sistema único de unidades interno. Se seleccionaron 12 unidades para la presión (las más comunes), cuando se escoge una unidad del sistema inglés para la temperatura la opción es entre °F o °R, la entalpía estará en BTU/lbmol; en caso contrario para la temperatura se escoge entre °C o °K y para la entalpía entre cal/gmol o joules/gmol. Las unidades de las variables restantes están condicionadas por las elecciones hechas para P, T y H.

Una vez realizadas las actividades anteriores se procede a calcular las constantes de los componentes puros para la ecuación de estado seleccionada. Las sentencias correspondientes a estos cálculos se encuentran en la subrutina denotada por la línea 9896 del programa y llamada «Cálculo de las constantes de componentes puros». En esta subrutina están todas las ecuaciones presentadas en el capítulo II. Lo más importante en esta parte del programa es la resolución analítica de las ecuaciones cúbicas de Schmidt-Tenzel y Patel-Teja ecs. (2-32) y (2-44) respectivamente. La resolución analítica de una ecuación cúbica en general se incluye al final del capítulo en el punto E.1.

La información más relevante es enviada a disco y se llama al siguiente programa.

El listado de este programa se encuentra en el apéndice A-1.

#### D.1.2. SEGUNDA PARTE : PROGRAMA QUE CALCULA LOS LÍMITES DE BURBUJA Y NECCIO (ver apéndice A-2)

Este programa lee de disco la información enviada por el programa

anterior y a continuación se pide al usuario lo siguiente :

- Especificar que tipo de cálculo se quiera efectuar (Presión o Temperatura de burbuja o rocío).
- Elegir el tipo de resolución para el cálculo del factor de compresibilidad (Zeta). Se da la opción analítica o numérica. El diagrama de bloque para la resolución numérica se encuentra en B.2. ; el método numérico empleado es de tercer orden de Richmond cuya fórmula de iteración es :

$$X_{i+1} = X_i - \frac{2 \cdot f(X_i) \cdot \left[ \frac{df(X)}{dX} \right]_{X=X_i}}{2 \cdot \left[ \frac{df(X)}{dX} \right]_{X=X_i}^2 - f(X_i) \cdot \left[ \frac{d^2f(X)}{dX^2} \right]_{X=X_i}} \quad (5-64)$$

La decisión que se tomó para el empleo de este método de tercer orden se basó en el artículo de Gundersen (9), en el cual se exponen aspectos interesantes que tienen que ver con el tipo de raíz para el factor de compresibilidad de las fases líquida y vapor.

Cuando no hay "problemas" con las raíces encontradas para Zeta del líquido (ZL) y del vapor (ZV), la resolución analítica se recomienda para los cálculos ya que no consume prácticamente tiempo de computación; cosa que no sucede con la resolución numérica.

- Alimentar los datos requeridos :
  - Presión o Temperatura (en las unidades seleccionadas).
  - Composición (siempre en % o fracción mol). El programa normaliza la composición que se da como dato.

Inmediatamente después comienza el proceso iterativo para resolver el tipo de problema especificado. Luego se muestran los datos proporcionados y resultados obtenidos. Se da la opción de efectuar otro cálculo



para el mismo sistema (mismos componentes).

El listado de este programa está en el apéndice A-2.

## D.2. VAPORIZACIONES SUBIDAS O FLASH (contenido en el disco No. 2)

Este tipo de problemas necesitó de tres partes, la primera es idéntica a la parte 1 de los puntos de burbuja y rocío, en la segunda se especifica el tipo de flash que se desea resolver y en la tercera tiene lugar el proceso iterativo. Entonces :

### D.2.1. PRIMERA PARTE : PROGRAMA QUE CALCULA LOS PARAMETROS DE COMPONENTES PURAS

Su contenido es idéntico al descrito en D.1.1.

### D.2.2. SEGUNDA PARTE : PROGRAMA QUE CALCULA UN PUNTO DE BURBUJA Y UNO DE ROCÍO (ver apéndice B-1)

La diferencia básica que hay con respecto a la segunda parte anterior es que aquí se especifica el tipo de flash que se desea resolver y se realiza el cálculo de un punto de burbuja y de rocío que sirven para determinar si existe BW a las condiciones especificadas y para efectuar las estimaciones iniciales requeridas en la tercera parte. Entonces la información más relevante de esta segunda parte se manda a disco y se llama al siguiente programa.

El listado de este programa se encuentra en el apéndice B-1.

### D.2.3. TERCERA PARTE : PROGRAMA QUE RESUELVE EL FLASH (ver apéndice B-2)

Este programa lee las informaciones enviadas a disco por las dos partes anteriores y en seguida comienza el proceso iterativo. Una vez resuelto el problema se da la opción para realizar otro cálculo para el mismo sistema (mismos componentes e igual composición de la corriente alimentada proporcionada en la segunda parte).

El listado se muestra en el apéndice B-2.

## E. CALCULO DE PROPIEDADES

En el capítulo anterior se presentaron las expresiones obtenidas para el cálculo de las propiedades termodinámicas utilizadas en esta tesis. En esta sección se explica como se llevan a cabo dichos cálculos, que son comunes a todos los problemas de ELV considerados.

En la subrutina denotada por la línea 7000 del programa del apéndice A-2 y llamada «Subrutina de las propiedades termodinámicas» están codificadas las expresiones para el cálculo de propiedades. En esta subrutina si la variable LV tiene el valor de 1 entonces lo que se está calculando son las propiedades del líquido (LV = 2 para el vapor). La variable EI indica el tipo de resolución elegido para resolver la ecuación cúbica (2-13) para el factor de compresibilidad, EI=1 significa resolución analítica y EI=2 resolución numérica, que corresponden a las subrutinas 8000 y 3500 respectivamente. Aquí se hace uso también de la subrutina 10000 que es donde tienen lugar los cálculos de los parámetros de mezcla para la ecuación de estado seleccionada con anterioridad, E0 denota a la ecuación de estado y tiene valores desde 1 hasta 7. (Ver ejemplo)

Entonces en forma de algoritmo el cálculo de propiedades termodinámicas se lleva a cabo de la siguiente manera :

- 1.- Indicar el estado físico de la mezcla.
- 2.- Trasladarse a la subrutina 7000.
  - 2.1.- Calcular parámetros de la mezcla.
  - 2.2.- Resolver la ecuación cúbica (2-13) para Z.
    - 2.2.1.- Resolución analítica ( punto E.1 )
    - 2.2.2.- Resolución numérica ( punto E.2 )
  - 2.3.- Hacer uso de las sentencias correspondientes a las expresiones obtenidas para las propiedades indicadas anteriormente.
- 3.- Almacenar la información obtenida.

La subrutina 6000 de este mismo apéndice contiene las sentencias para el cálculo de las propiedades termodinámicas tanto para el líquido como para el vapor. En la tabla siguiente se muestran las variables correspondientes a las propiedades calculadas y que son almacenadas en esta subrutina :

PROPIEDAD	VARIABLES	
	LIQUIDO	VAPOR
Entalpia	HL	HV
Entropia	SL	SV
Coefficiente de fugacidad de i	FL(I)	FV(I)

Entonces cuando se requieren las propiedades del líquido y vapor se tiene que hacer uso de la subrutina 6000 y cuando se desea sólo las propiedades de una fase mediante la subrutina 7000 (previamente indicar la fase considerada con la variable LV).

### E.1. RESOLUCION ANALITICA DE UNA ECUACION CUBICA

La forma general de una ecuación cúbica es

$$Z^3 + p Z^2 + q Z + r = 0$$

sustituyendo  $Z = X - p/3$  esta ecuación se reduce a la forma más simple

$$X^3 + a X + b = 0$$

donde

$$a = (3q - p^2)/3 \quad y \quad b = (2p^3 - 9pq + 27r)/27$$

sea :  $X = u + v$  ; entonces

$$(u + v)^3 + a (u + v) + b = 0$$

y desarrollando términos la ec. se convierte en

$$u^3 + v^3 + (3uv + a)(u + v) + b = 0$$

La ec. anterior queda satisfecha para los valores que cumplen las condiciones

$$u^3 + v^3 + b = 0 \quad y \quad 3uv + a = 0 \quad ; \quad \text{o sea :}$$

$$u^3 + v^3 = -b$$

$$u v = -a/3$$

Luego  $u^3 v^3$  son las raíces de la ec. cuadrática

$$t^2 - b t - a^3 / 27 = 0$$

denotadas por A y B tenemos :

$$A = -b/2 + \left[ b^2/4 + a^3/27 \right]^{1/2}$$

$$B = -b/2 - \left[ b^2/4 + a^3/27 \right]^{1/2}$$

ahora  $u^3 = A$  y  $v^3 = B$

Como  $uv = -a/3$ , las raíces cúbicas deben ser tomadas a pares de manera que el producto de cada par sea racional. Por tanto, si  $u$  y  $v$  son los valores de cualquier par de raíces cúbicas que satisfacen esta condición, los demás únicos pares admisibles serán  $wu$ ,  $w^2v$  y  $w^2u$ ,  $wv$ , en donde,  $w$  y  $w^2$  son las raíces imaginarias de la unidad. En resumen las raíces cúbicas de la ec. reducida son :

$$X_1 = \sqrt[3]{A} + \sqrt[3]{B}$$

$$X_2 = w \cdot \sqrt[3]{A} + w^2 \cdot \sqrt[3]{B}$$

$$X_3 = w^2 \cdot \sqrt[3]{A} + w \cdot \sqrt[3]{B}$$

$$w = (-1 + i\sqrt{3}) / 2$$

Las ecuaciones anteriores son conocidas como las fórmulas de Cardano.

Cuando  $4a^3 + 27b^2 > 0$  existe una raíz real y dos raíces imaginarias conjugadas.

Cuando  $4a^3 + 27b^2 = 0$  hay tres raíces reales, dos de ellas iguales (las de menor valor).

Cuando  $4a^3 + 27b^2 < 0$  existen tres raíces reales diferentes. Este es el caso llamado irreducible de las fórmulas de Cardano, porque el cálculo de las tres raíces reales a que se reduce la expresión compleja es preciso hacerlo trigonométricamente. Las raíces están dadas por

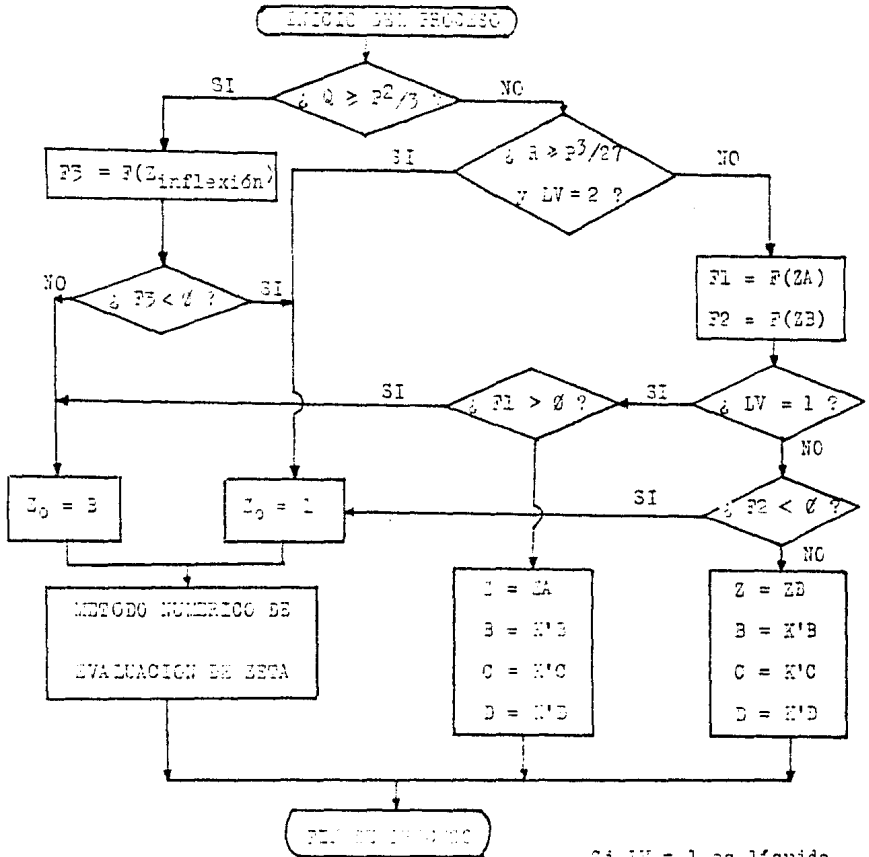
$$X_k = \pm 2 \sqrt{-a/3} \cos \left\{ \frac{\theta}{3} + \frac{2\pi k}{3} \right\}, \quad k = 0, 1, 2.$$

donde  $\theta = \cos^{-1} \left[ (-27b^2/4a^3) \right]^{1/2}$

el signo superior (+) se aplica si  $b < 0$ , el inferior (-) si  $b > 0$ .

Por último  $Z$  se obtiene de  $Z = X - p/3$ .

Para el cálculo del factor de compresibilidad la raíz de mayor valor se le asigna a la fase vapor y la más pequeña al líquido, mientras que la raíz intermedia carece de significado físico.



Si LV = 1 es líquido  
 Si LV = 2 es vapor  
 K' es un factor correctivo

$$F(Z) = Z^3 - PZ^2 + QZ - R \quad \begin{cases} P = 1 - C \\ Q = (A - B - C - B^2 - 3C - 3D) \\ R = AB - DB - 3E^2 \end{cases}$$

En el punto de inflexión  $F''(Z) = 0$ ;  $Z_{\text{inflexión}} = P/3$

$$F'(Z) = 0 = 3Z^2 - 2PZ + Q$$

resolviendo para Z

$$\begin{cases} ZA = (P - \sqrt{P^2 - 3Q})/3 \\ ZB = (P + \sqrt{P^2 - 3Q})/3 \end{cases}$$

## F. EJEMPLOS

### F.1. PUNTOS DE BURBUJA Y ROCÍO

Se desea calcular la presión de burbuja a  $90^{\circ}\text{C}$  y la presión de rocío a  $140^{\circ}\text{C}$  utilizando la ecuación de estado de Patel-Teja para una mezcla que contiene 20% de benceno, 30% de ciclohexano, 20% de metilciclohexano y 30% de n-hexano.

Las unidades seleccionadas para la presión y entalpía son mm Hg y joules/gmol respectivamente.

Para la mezcla no se disponen de parámetros de interacción binarios.

El estado de referencia para el cálculo de entalpía y entropías se fijó en 2 atm y  $300^{\circ}\text{K}$  para la presión y temperatura respectivamente.

A continuación se presenta el listado de datos y resultados que se obtienen al usar el programa desarrollado para resolver este tipo de problemas.

NOTA : Cada vez que se requiere de un dato o respuesta por parte del usuario, aparece en la pantalla de video un signo de interrogación (?) .

CALCULO DE PUNTOS DE BURSUA Y ROCI  
 UTILIZANDO UNA DE LAS SIGUIENTES  
 EDUCACIONES DE ESTADO:

- 1 ...REDLICH-AWONG
- 2 ...SONVE ORIGINAL
- 3 ...SONVE-ORAWOSKI-DALBERT
- 4 ...PENQ-ROBINSON
- 5 ...SCHMITE-WENZEL
- 6 ...HARMENC-HARF
- 7 ...PATEL-TEL-

SELECCIONE LA EDUCACION DE ESTADO QUE DESEA USAR (DE ACUERDO CON SU NUMERO)

ELECCION=77

ENTRADA DE DATOS

DE CUANTOS COMPONENTES ESTA CONSTITUIDA LA MEZCLA ?

N=74

TODOS LOS COMPONENTES DE LA MEZCLA ESTAN INCLUIDOS EN EL RANGO DE DATOS ?

RESPUESTA (SI/NO) R=PEI

PROPORCIONE EL NO. QUE IDENTIFICA AL COMPONENTE ! EN EL RANGO DE DATOS

NC=7242

DATOS LEIDOS PARA EL COMPONENTE 1:

NC=242

FORMULA=CDMS

NOMBRE=BEWLEND

TC=562.1

PC=40.3

IC = .271

M = .212

QACP = -8.101

QBCP = .1133

QCCP = -7.206E+05

QDCP = 1.793E+08

DF = 19.82

DG = 36.99



PARA CONTINUAR PRESIONAR CUALQUIER TECLA PROPORCIONE EL NO. QUE IDENTIFICA AL COMPONENTE 2 EN EL BANDO DE DATOS

NO#249

DATOS LEIDOS PARA EL COMPONENTE 2:

NO#249  
 FLUMINANTOBR12  
 NOMEN+METILINDOLIVERANO  
 T#2500,4  
 PO#40,3  
 CO = 1,870  
 M = 1,213  
 CACP = -13,007  
 CQCP = 1,146  
 CUPP = 1,1037E-05  
 CUPP = 1,1516E-09  
 CP = 1,20,43  
 CQ = 0,59

PARA CONTINUAR PRESIONAR CUALQUIER TECLA PROPORCIONE EL NO. QUE IDENTIFICA AL COMPONENTE 3 EN EL BANDO DE DATOS

NO#256

DATOS LEIDOS PARA EL COMPONENTE 3:

NO#256  
 FLUMINANTOBR14  
 NOMEN+METILINDOLIVERANO  
 T#2500,4  
 CO#20,3  
 CO = 1,817  
 M = 1,208  
 CACP = -14,739  
 CQCP = 1,1870  
 CUPP = 1,1068E-04  
 CUPP = 1,1037E-08  
 CP = 1,20,49  
 CQ = 0,571

PARA CONTINUAR PRESIONAR CUALQUIER TECLA PROPORCIONE EL NO. QUE IDENTIFICA AL COMPONENTE 4 EN EL BANDO DE DATOS

NO#270

DATOS LEIDOS PARA EL COMPONENTE 4:

NO#270  
 FLUMINANTOBR14  
 NOMEN+HEXANO  
 T#2500,4  
 PO#29,3  
 CO = 1,26  
 M = 1,294  
 CACP = -11,054  
 CQCP = 1,129  
 CUPP = -7,449E-08  
 CUPP = 1,1031E-08  
 CP = 1,19,76  
 CQ = 1,06

PARA CONTINUAR PRESIONAR CUALQUIER TECLA

ESTADO DE REFERENCIA PARA EL CALCULO DE ENTALPIAS Y ENTROPIAS :

(1) LAS DE FORMACION ESTANDAR

(2) ESTABLECIDO POR EL USUARIO

ELECCION : 2

TEMPERATURA : 70 °K=27300

PRESSION : 10<sup>5</sup> ATM=1013

DESEA ALIMENTAR PARAMETROS DE INTERACCION BINARIOS DE LA MEZCLA ?

RESUNDA RESPUESTA=NO

A CONTINUACION VD. ESCOGERA LAS UNIDADES PARA LA PRESION, TEMPERATURA Y ENTALPIA.

EN LAS UNIDADES ESCUJIDAS, SE ALIMENTARAN LOS DATOS PEDIDOS POSTERIORMENTE

PARA CONTINUAR PRECIONAR CUALQUIER TECLA

ELECCION DE UNIDADES

VARIABLE : PRESION

OPCION	UNIDADES DISPONIBLES	ABREVIATURA
A	ATMOSFERAS	ATM
B	BARES	BAR
C	DINAS/CM <sup>2</sup>	D/CM <sup>2</sup>
D	NEWTON/M <sup>2</sup>	N/M <sup>2</sup>
E	KGRAMOS/CM <sup>2</sup>	K/CM <sup>2</sup>
F	KILOPONDIOS/CM <sup>2</sup>	KP/CM <sup>2</sup>
G	MILITIMBALES	MTPA
H	MM DE MERCURIO	MM HG
I	CM DE AGUA	CM H <sub>2</sub> O
J	PULGADA DE AGUA	IN H <sub>2</sub> O
K	METOPONDIOS	MPON
L	MILIGRAMOS/CM <sup>2</sup>	MG/CM <sup>2</sup>

TECLEE LETRA DE OPCION : H

ELECCION DE UNIDADES

VARIABLE : TEMPERATURA

OPCION	UNIDADES DISPONIBLES	ABREVIATURA
A	HELVIN	°K
B	CENTIGRADOS	°C

TECLEE LETRA DE OPCION : B

## ELECCION DE UNIDADES

VARIABLE : ENTALPIA

OPCION	UNIDADES DISPONIBLES	ABREVIATURA
<A>	..... CALORIAS/GMOL	..... CAL/GMOL
<B>	..... JOULES/GMOL	..... J/GMOL

TECLEE LETRA DE OPCION :>

SISTEMA DE UNIDADES SELECCIONADO PARA LA ENTRADA/SALIDA DE DATOS/ RESULTADOS

PRESION EN : MM HG

TEMPERATURA EN : °C

ENTALPIA EN : J/GMOL

ENTROPIA EN : J/GMOL°C

FLUJO EN : GMOL/HR

CARGA TERMICA EN : J/HR  
ESTA DE ACUERDO ? (SI/NO)PSI

PROCESANDO INFORMACION

QUE ES LO QUE DESEA CALCULAR ?

- <1> PRESION DE BURBUJA
- <2> PRESION DE ROCIO
- <3> TEMPERATURA DE BURBUJA
- <4> TEMPERATURA DE ROCIO

ELECCION #1

QUE TIPO DE SOLUCION QUIERE PARA EL CALCULO DEL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD

- <1> ANALITICA
- <2> NUMERICA

ELECCION #2

A QUE TEMPERATURA (°C) QUIERE LA PRESION DE BURBUJA ?

T =290

## PROGRAMA LA COMPOSICION DE LA FASE LIQUIDA EN FRACCION MOL

\* TEMPERATURA  
 \* COEFICIENTE DE  
 \* COMPRESIBILIDAD DE LA VAPOR  
 \* INFERIORMENTE

PROCESO ITERATIVO PARA ENCONTRAR LA PRESION DE BURBUJA

ESTIMACION INICIALES :

ITERO P=1040.16574

ITER1  
 P=1040.16574 SUMA= 1.00277363  
 ZL=5.7716274E-03 ZV=1.45970192

ITER2  
 P=1071.17961 SUMA= 1.000000196  
 ZL=5.4710666E-03 ZV=1.453492815  
 << RESULTADOS >>

PRESION DE BURBUJA=1071.17961 MM HG  
 TEMPERATURA= 10

< COMPOSICIONES >  
 (FRACCION MOL)

COMPONENTE	LIQUIDO	VAPOR
BENZENO	.10	.105709
CICLOHEXANO	.10	.271847
METILCICLOHEXANO	.10	.106691
NAFTAHO	.10	.407638

TOTAL 1 1

PROPIEDADES LIQUIDO VAPOR

ENTALPIA : -21259.1157 7981.8971  
 (KJ/MOL)  
 ENTALPIA : -4113819672 3611244957  
 (J/GMOLCO)  
 ZETA : 5.491E-03 1.952482815

DESEA HACER OTRO CALCULO ? (S=SI/N=NO) RESPUESTA=QUE ES LO QUE DESEA CALCULAR ?

- (1) PRESION DE BURBUJA  
 (2) PRESION DE ROCIO  
 (3) TEMPERATURA DE BURBUJA  
 (4) TEMPERATURA DE ROCIO

ELECCION =2

QUE TIPO DE SOLUCION QUIERE PARA EL CALCULO DEL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD ZETA ?

(1) ANALITICA (2) NUMERICA

ELECCION =1

QUE TEMPERATURA (C) QUIERE LA PRESION DE ROCIO ?

T =? 140

PROPORCIONE LA COMPOSICION DE LA FASE VAPOUR EN FRACCION MOL

Y(BENCENO)=9.2  
 Y(TOLUENO)=9.3  
 Y(METILOLOXENO)=9.2  
 Y(N-HEXANO)=9.3

PROCESO ITERATIVO PARA ENCONTRAR LA PRESION DE BUBU

ESTIMACIONES INICIALES :

T=140 P=1097.17702

ITER  
 P=1011.1766 BUBU= 1.97476672  
 ZL=0.171114178 ZV=0.94944831

ITER  
 P=1021.50151 BUBU= 1.11644498  
 ZL=0.177111091 ZV=0.94878569

ITER  
 P=1029.99702 BUBU= 1.00000000  
 ZL=0.177794087 ZV=0.97043111

<< R E S U L T A D O S >>

PRESION DE BUBU=1019.98789 MM HG  
 TEMPERATURA=140 °C

< COMPOSICIONES >  
 FRACCION MOL

COMPONENTE	LIQUIDO	VAPOUR
BENCENO	0.11477	0.1
TOLUENO	0.29609	0.3
METILOLOXENO	0.30605	0.2
N-HEXANO	0.28476	0.4
TOTAL	1	1

PROPIEDADES	LIQUIDO	VAPOUR
ENTALPIA :	-11412.7024	15011.9570
UJ/MOL		
ENTALPIA :	-15136.0746	48124.0190
UJ/MOL G		
ENTALPIA :	0.0000	0.00000000
UJ/MOL G		

LEER A QUER OTRO CALCULO ?

(S=SI/N=NO)

RESPUESTA=NO

<< PARA EL CALCULO DE PROPIEDADES TERMODINAMICAS SE UTILIZO LA ECUACION DE ESTADO DE PATEL-TEJA >>

<< PROGRAMA TERMINADO >>

F.2.- VAPORIZACIONES SUBITAS O FLASH

Se desea calcular dos flashes para una mezcla A constituida por 10 componentes. Uno de ellos es del tipo V/F constante cuyas especificaciones son  $V/F = 0.3$  y  $T = 245^\circ K$ . El otro es isobárico a la misma temperatura y presión igual a 30 bar. La composición de la mezcla A es : 2.09 % de ácido sulfúrico, 2.8 % de dióxido de carbono, 59.68 % de metano, 18.39 % de etano, 10.25 % de propano, 1.14 % de isobutano, 2.96 % de n-butano, 0.61 % de 2-metil butano, 0.79 % de n-pentano y 1.29 % de n-hexano. Se dispone de la siguiente matriz de parámetros de interacción binarios para la mezcla

1	0.000	0.105	0.096	0.093	0.090	0.064	0.060	0.073	0.069	0.075
2	0.105	0.000	0.083	0.120	0.145	0.149	0.144	0.149	0.141	0.116
3	0.096	0.083	0.000	-0.007	0.008	0.027	0.027	0.013	0.012	0.035
4	0.093	0.120	-0.007	0.000	0.001	0.008	0.005	0.005	0.003	-0.045
5	0.090	0.145	0.008	0.001	0.000	-0.003	0.013	0.006	0.021	0.005
6	0.064	0.149	0.027	0.008	-0.003	0.000	0.000	0.010	0.009	0.010
7	0.060	0.144	0.027	0.005	0.013	0.000	0.000	0.040	0.037	-0.003
8	0.073	0.149	0.013	0.005	0.006	0.010	0.040	0.000	0.009	0.010
9	0.069	0.141	0.012	0.003	0.021	0.009	0.037	0.009	0.000	0.004
10	0.075	0.116	0.035	-0.045	0.005	0.010	-0.003	0.010	0.004	0.000
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10

A continuación se presenta el listado de datos y resultados para estos problemas cuando es utilizada la ecuación de estado de Soave original (se suprimió la primera parte correspondiente a la elección de la ecuación de estado y al empleo del banco de datos)

< > LAS DE FORMACION ESTAN EN

< > ESTABLECIDO POR EL USUARIO

ELECCION #01

DESE: ALIMENTAR PARAMETROS DE INTERACCION BINARIOS DE LA MEZCLA

< > SI/NO > RESPUESTA#01

PROPORCIONE LOS PARAMETROS DE INTERACCION BINARIOS KIJ(S):

K10-1,00#0,00  
 K10-2,00#0,00  
 K10-1,10#0,00  
 K10-1,20#0,00  
 K10-1,30#0,00  
 K10-1,40#0,00  
 K10-1,50#0,00  
 K10-1,60#0,00  
 K10-1,70#0,00  
 K10-1,80#0,00  
 K10-1,90#0,00  
 K10-2,10#0,00  
 K10-2,20#0,00  
 K10-2,30#0,00  
 K10-2,40#0,00  
 K10-2,50#0,00  
 K10-2,60#0,00  
 K10-2,70#0,00  
 K10-2,80#0,00  
 K10-2,90#0,00  
 K10-3,00#0,00  
 K10-3,10#0,00  
 K10-3,20#0,00  
 K10-3,30#0,00  
 K10-3,40#0,00  
 K10-3,50#0,00  
 K10-3,60#0,00  
 K10-3,70#0,00  
 K10-3,80#0,00  
 K10-3,90#0,00  
 K10-4,00#0,00  
 K10-4,10#0,00  
 K10-4,20#0,00  
 K10-4,30#0,00  
 K10-4,40#0,00  
 K10-4,50#0,00  
 K10-4,60#0,00  
 K10-4,70#0,00  
 K10-4,80#0,00  
 K10-4,90#0,00  
 K10-5,00#0,00  
 K10-5,10#0,00  
 K10-5,20#0,00  
 K10-5,30#0,00  
 K10-5,40#0,00  
 K10-5,50#0,00  
 K10-5,60#0,00  
 K10-5,70#0,00  
 K10-5,80#0,00  
 K10-5,90#0,00  
 K10-6,00#0,00  
 K10-6,10#0,00  
 K10-6,20#0,00  
 K10-6,30#0,00  
 K10-6,40#0,00  
 K10-6,50#0,00  
 K10-6,60#0,00  
 K10-6,70#0,00  
 K10-6,80#0,00  
 K10-6,90#0,00  
 K10-7,00#0,00  
 K10-7,10#0,00  
 K10-7,20#0,00  
 K10-7,30#0,00  
 K10-7,40#0,00  
 K10-7,50#0,00  
 K10-7,60#0,00  
 K10-7,70#0,00  
 K10-7,80#0,00  
 K10-7,90#0,00  
 K10-8,00#0,00  
 K10-8,10#0,00  
 K10-8,20#0,00  
 K10-8,30#0,00  
 K10-8,40#0,00  
 K10-8,50#0,00  
 K10-8,60#0,00  
 K10-8,70#0,00  
 K10-8,80#0,00  
 K10-8,90#0,00  
 K10-9,00#0,00  
 K10-9,10#0,00  
 K10-9,20#0,00  
 K10-9,30#0,00  
 K10-9,40#0,00  
 K10-9,50#0,00  
 K10-9,60#0,00  
 K10-9,70#0,00  
 K10-9,80#0,00  
 K10-9,90#0,00  
 K11-0,10#0,00  
 K11-0,20#0,00  
 K11-0,30#0,00  
 K11-0,40#0,00  
 K11-0,50#0,00  
 K11-0,60#0,00  
 K11-0,70#0,00  
 K11-0,80#0,00  
 K11-0,90#0,00  
 K11-1,00#0,00  
 K11-1,10#0,00  
 K11-1,20#0,00  
 K11-1,30#0,00  
 K11-1,40#0,00  
 K11-1,50#0,00  
 K11-1,60#0,00  
 K11-1,70#0,00  
 K11-1,80#0,00  
 K11-1,90#0,00  
 K11-2,00#0,00  
 K11-2,10#0,00  
 K11-2,20#0,00  
 K11-2,30#0,00  
 K11-2,40#0,00  
 K11-2,50#0,00  
 K11-2,60#0,00  
 K11-2,70#0,00  
 K11-2,80#0,00  
 K11-2,90#0,00  
 K11-3,00#0,00  
 K11-3,10#0,00  
 K11-3,20#0,00  
 K11-3,30#0,00  
 K11-3,40#0,00  
 K11-3,50#0,00  
 K11-3,60#0,00  
 K11-3,70#0,00  
 K11-3,80#0,00  
 K11-3,90#0,00  
 K11-4,00#0,00  
 K11-4,10#0,00  
 K11-4,20#0,00  
 K11-4,30#0,00  
 K11-4,40#0,00  
 K11-4,50#0,00  
 K11-4,60#0,00  
 K11-4,70#0,00  
 K11-4,80#0,00  
 K11-4,90#0,00  
 K11-5,00#0,00  
 K11-5,10#0,00  
 K11-5,20#0,00  
 K11-5,30#0,00  
 K11-5,40#0,00  
 K11-5,50#0,00  
 K11-5,60#0,00  
 K11-5,70#0,00  
 K11-5,80#0,00  
 K11-5,90#0,00  
 K11-6,00#0,00  
 K11-6,10#0,00  
 K11-6,20#0,00  
 K11-6,30#0,00  
 K11-6,40#0,00  
 K11-6,50#0,00  
 K11-6,60#0,00  
 K11-6,70#0,00  
 K11-6,80#0,00  
 K11-6,90#0,00  
 K11-7,00#0,00  
 K11-7,10#0,00  
 K11-7,20#0,00  
 K11-7,30#0,00  
 K11-7,40#0,00  
 K11-7,50#0,00  
 K11-7,60#0,00  
 K11-7,70#0,00  
 K11-7,80#0,00  
 K11-7,90#0,00  
 K11-8,00#0,00  
 K11-8,10#0,00  
 K11-8,20#0,00  
 K11-8,30#0,00  
 K11-8,40#0,00  
 K11-8,50#0,00  
 K11-8,60#0,00  
 K11-8,70#0,00  
 K11-8,80#0,00  
 K11-8,90#0,00  
 K11-9,00#0,00  
 K11-9,10#0,00  
 K11-9,20#0,00  
 K11-9,30#0,00  
 K11-9,40#0,00  
 K11-9,50#0,00  
 K11-9,60#0,00  
 K11-9,70#0,00  
 K11-9,80#0,00  
 K11-9,90#0,00

SISTEMA DE UNIDADES SELECCIONADO PARA LA ENTRADA/SALIDA DE DATOS, RESULTADOS

PRESION EN : BAR

TEMPERATURA EN : °K

ENTALPIA EN : MJ/KMOL

ENTROPIA EN : J/KMOL.K

FLUJO EN : KMOL/HR

CARGA TERMICA EN : MJ/HR

ESTA DE ACUERDO ? (SI/NO/CSI)

PROCESANDO INFORMACION

QUE TIPO DE FLASH DESEA CALCULAR ?

TIPO :	DATOS	INCOGNITAS
(1) ISOTERMICO	P,T,Z	(W/F),X,Y
(2) ADIABATICO	P,HF,Z	(W/F),T,X,Y
(3) ISCENTROPICO	P,SF,Z	(W/F),T,X,Y
(4) (W/F) CTE.	P,(W/F),Z	T,X,Y
(5) ISOCERICO	T,P,Z	(W/F),X,Y
(6) ADIABATICO	T,HF,Z	(W/F),P,X,Y
(7) ISCENTROPICO	T,SF,Z	(W/F),P,X,Y
(8) (W/F) CTE.	T,(W/F),Z	P,X,Y

TIPO DE SOLUCION

QUE TIPO DE SOLUCION QUIERE PARA EL CALCULO DEL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD ZETA ?

(<)> ANALITICO- (<C>) NUMERICO

ELUSION =?1

PROPORCIONE LO SIGUIENTE :

T (°K)=1245

(W/F)=1

COMPOSICION DE LA CORRIENTE ALIMENTADA :

Z(ACIDO SULFURICO)=1.0239

Z(DIOXIDO DE CARBONO)=2.0280

Z(METANO)=0.9248

Z(ETANO)=0.1829

Z(PROPANO)=2.1625

Z(ISOBTANO)=2.0114

Z(N-BUTANO)=2.0296

Z(2-METIL BUTANO)=2.0061

Z(N-PENTANO)=2.0079

Z(N-HEXANO)=2.0129



ESTIMACIONES INICIALES :

T=245 P=94,1897388

IT=1  
 P=4,1597368 SUMA= 1,937153428  
 ZL=4,38111633 ZV=,886983387

IT=2  
 P=79,9207089 SUMA= 1,00522714  
 ZL=,276811453 ZV=,573234962

IT=3  
 P=75,3503999 SUMA= 1,00014122  
 ZL=,275139167 ZV=,577427275

IT=4  
 P=75,4203295 SUMA= 1,00006051  
 ZL=,275139938 ZV=,577426339

IT=5  
 P=75,4403896 SUMA= 1,0000157  
 ZL=,275139601 ZV=,577426206

IT=6  
 P=75,4435547 SUMA= 1,000004,5  
 ZL=,275139548 ZV=,577426195  
 RESIDUAL=0,5 :

PRESION DE EQUILIBIO=75,4435547 BAR  
 ENTALPIA LIQ.=108143,126 J/GMOL  
 ENTROPIA LIQ.=197,264341 J/GMOL/K

PROCESO ITERATIVO PARA ENCONTRAR LA PRESION DE ROCIO PARA T=245 °K

ESTIMACIONES INICIALES :

T=245 P=,397176706

IT=1  
 P=,397176706 SUMA= 1,04797492  
 ZL=,3607202E-01 ZV=,92114208

IT=2  
 P=,71974156 SUMA= 1,0021548  
 ZL=,4,86286E-01 ZV=,99781457

IT=3  
 P=,66591717 SUMA= 1,00014971  
 ZL=,4,29114711E-01 ZV=,994147737

IT=4  
 P=,662569015 SUMA= 1,00005237  
 ZL=,4,27014402E-01 ZV=,994176758

IT=5  
 P=,662569494 SUMA= 1,00000129  
 ZL=,4,27014566E-01 ZV=,994177093  
 RESIDUAL=0,0 :

PRESION DE ROCIO=,662570494 BAR  
 ENTALPIA VAPOR=14076,8175 J/GMOL  
 ENTROPIA VAPOR=129,478766 J/GMOL/K

## LA ALIMENTACION ES UNA MEZCLA LIQUIDO-VAPOR

ESTIMACIONES :

V.F. = 3

T=245 °K

P=88.0107023 BAR

&lt;&lt; COMPOSICION ESTIMADA &gt;&gt;

COMPONENTE	LIQUIDO	VAPOR
ACIDO SULFURICO	0.01000	0.01000
DIOXIDO DE CARBONO	0.01000	0.01000
METANO	0.01000	0.01000
ETANO	0.01000	0.01000
PROPANO	0.01000	0.01000
ISOBUTANO	0.01000	0.01000
N-BUTANO	0.01000	0.01000
ISOPENTANO	0.01000	0.01000
N-PENTANO	0.01000	0.01000
N-HEXANO	0.01000	0.01000

PROCESO ITERATIVO PARA RESOLVER EL FLUJO

IT=0  
 ZL=4.2e+05 (L=0)      ZV=6.02701950  
 T=245      P=88.0107023  
 Q=0  
 P=1.013203900  
 P=1.013203900      (V/F)=3

IT=1  
 ZL=4.2e+05 (L=0)      ZV=6.05571120  
 T=245      P=87.9287701  
 Q=0  
 P=1.013203900  
 P=1.013203900      (V/F)=3

IT=2  
 ZL=4.2e+05 (L=0)      ZV=6.07415009  
 T=245      P=87.8241649  
 Q=0  
 P=1.013203900  
 P=1.013203900      (V/F)=3

IT=3  
 ZL=4.2e+05 (L=0)      ZV=6.08942084  
 T=245      P=87.7505210  
 Q=0  
 P=1.013203900  
 P=1.013203900      (V/F)=3

IT=3  
 IL=4.2e99750e-03      ZV=.646991334  
 T=245      P=0.2465497  
 Q=0  
 F=9.504239E-04  
 FG=9.504239E-04      (W/F)=.3

IT=4  
 IL=4.2e99750e-03      ZV=.645446983  
 T=245      P=0.4502693  
 Q=0  
 F=1.2e29017E-03  
 FG=1.2e29017E-03      (W/F)=.3

IT=4  
 IL=4.2e99750e-03      ZV=.64737616  
 T=245      P=0.1446584  
 Q=0  
 F=2.72e1907E-03  
 FG=2.72e1907E-03      (W/F)=.3

IT=5  
 IL=4.2e99750e-03      ZV=.6570645  
 T=245      P=0.7169247  
 Q=0  
 F=3.1213e411E-04  
 FG=3.1213e411E-04      (W/F)=.3

IT=6  
 IL=4.2e99750e-03      ZV=.64495644  
 T=245      P=0.7e96e28  
 Q=0  
 F=1.72e1316E-04  
 FG=1.72e1316E-04      (W/F)=.3

IT=7  
 IL=4.2e99750e-03      ZV=.644956502  
 T=245      P=0.727346  
 Q=0  
 F=3.477e2534E-05  
 FG=3.477e2534E-05      (W/F)=.3

IT=8  
 IL=4.2e99750e-03      ZV=.644965733  
 T=245      P=0.719012  
 Q=0  
 F=7.4054891E-06  
 FG=7.4054891E-06      (W/F)=.3

## &lt;&lt; RESULTADOS &gt;&gt;

TEMPERATURA=245 °K

PRESION=0.719612 BAR

W/F=1.3    FF=5    NO.IT=5

COMPONENTE	CONDICIONES	
	LIMITES	ANOR
ACIDO BENZOICO	1.0000	1.0000
OXIDANO DE CARBONO	1.0000	1.0000
ETANO	1.0000	1.0000
ETANO	1.0000	1.0000
PROPANO	1.0000	1.0000
ISOBUTANO	1.0000	1.0000
N-BUTANO	1.0000	1.0000
ISOPENTANO	1.0000	1.0000
N-PENTANO	1.0000	1.0000
HEXANO	1.0000	1.0000
TOTAL	1	1

PROPIEDADES :    LÍQUIDO    APAR

ENTALPIA :    -11156.157    -10845.4572

ENTALPIA

ENTALPIA :    -11156.157    -10845.4572

ENTALPIA

ENTALPIA :    -11156.157    -10845.4572

PROPIEDADES DE LA ALIQUOTA :

ENTALPIA :    -11156.157    -10845.4572

ENTALPIA :    -11156.157    -10845.4572

DESEAN HACER OTRO CALCULO ? (S/N)

RESPUESTA=

INDICIO DE OTRO FLUJO

TIPO :

<5> ISOCORICO

<6> ADIABATICO

<7> ISOCALORICO

<8> W/F / CONSTANTE

RELACIONE EL TIPO DESEADO TIPO=75

PREPARACIONE LA NUEVA :

P (W/F, P10)

LA ALIMENTACION ES UNA MEZCLA LIQUIDO-VAPOR

ESTIMACIONES :

W/F = 0.774391

T=245 °K

P=200 BAR

<< COMPOSICION ESTIMADA >>

COMPONENTE	LIQUIDO	VAPOR
ACIDO SULFURICO	0.016986	0.021415
DIOXIDO DE CARBONO	0.685E-08	0.030261
METANO	0.000000	0.057132
ETANO	0.057900	0.166676
PROPANO	0.275027	0.054026
ISOBUTANO	0.061860	0.176E-08
N-BUTANO	0.197400	0.011527
1-METIL-2-BUTANO	0.029210	0.1269E-08
N-PENTANO	0.019940	0.0307E-08
N-HEXANO	0.020737	0.075E-04

## PROCESO ITERATIVO PARA RESOLVER EL PLASH

IT41  
 CL44,1241010E+00      IVA,70060077  
 T424E      P410  
 Q41  
 P41,115      114  
 P41,12010059      W/F4,1,607714891

IT42  
 CL44,1241010E+00      IVA,70060175  
 T424E      P410  
 Q42  
 P41,12010007  
 P41,12010007      W/F4,1,724000000

IT43  
 CL44,1241010E+00      IVA,700772007  
 T434E      P410  
 Q43  
 P41,12010001  
 P41,12010011      W/F4,1,600044011

IT44  
 CL44,1241010E+00      IVA,700701401  
 T444E      P410  
 Q44  
 P41,12010001  
 P41,12010001      W/F4,1,600070014

IT45  
 CL44,1241010E+00      IVA,700701100  
 T454E      P410  
 Q45  
 P41,12010001  
 P41,12010001      W/F4,1,600070011

IT46  
 CL44,1241010E+00      IVA,700701100  
 T464E      P410  
 Q46  
 P41,12010001  
 P41,12010001      W/F4,1,600070011

IT47  
 CL44,1241010E+00      IVA,700701100  
 T474E      P410  
 Q47  
 P41,12010001  
 P41,12010001      W/F4,1,600070011

## &lt;&lt; RESULTADOS &gt;&gt;

TEMPERATURA=245 °K

PRESION=50 BAR

(V.F.)=070496421 PF=5 NO.IT=6

COMPONENTE	< COMPOSICIONES >	
	LIQUIDO	VAPOR
AGUA SULFATORICO	0.00064	0.00000
DIOXIDO DE CARBONO	0.00000	0.029948
METANO	0.014439	0.782141
ETANO	0.00041	0.07291
PROPANO	0.00000	0.000710
ISOBUTANO	0.00000	1.472E-03
N-BUTANO	0.00000	2.743E-03
ISOPENTANO	0.00000	2.13E-04
N-HEXANO	0.00000	2.07E-04
TOTAL	1	1

PROPIEDADES :	LIQUIDO	VAPOR
ENTALPIA :	-122154.2	-39136.8568
( J/KG MOL)		
ENTROPIA :	-138.46477	-128.544067
( J/KG MOL K)		
ZETA :	4.267956E-03	0.029992894

PROPIEDADES DE LA ALIMENTACION :

ENTALPIA =-99458.6774 J/KG MOL

ENTROPIA =-130.750722 J/KG MOL K

DESEA HACER OTRO CALCULO ? (S=SÍ/N=NO)

RESPUESTA=NO

&lt;&lt; PARA LOS CALCULOS DE LAS PROPIEDADES TERMODINAMICAS SE UTILIZO LA ECUACION DE ESTADO DE S-AVE ORIGINAL &gt;&gt;

&lt;&lt; PROGRAMA TERMINADO &gt;&gt;

## C A P I T U L O I V

## CONSTRUCCION DE LA CAMPANA DE LA ZONA DE DOS FASES

A. GENERALIDADES

La representación del comportamiento de mezclas multicomponentes de composición fija por medio de diagramas termodinámicos son indispensables en el análisis y diseño de procesos de separación y purificación. Un diagrama termodinámico es aquel en el que datos de temperatura, presión, volumen, entalpía y entropía se muestran en una sola gráfica (en ocasiones, no se incluyen datos de todas estas variables). Los diagramas de uso más frecuente son :

- P en función de H (comúnmente  $\ln P$  vs. H)
- T en función de S
- P en función de T
- H en función de S (diagrama de Mollier)

Es posible construir otras gráficas, pero son de uso menos frecuente. Las figuras (4-a), (4-b) y (4-c) muestran las formas generales de tres tipos de diagramas mencionados. En el diagrama PT de la fig. (4-a) se pueden distinguir los siguientes elementos : la curva llamada envolvente de fases o campana, que resulta de unir las curvas de puntos de burbuja y rocío que exhibe la mezcla, se unen en el punto denominado crítico. La envolvente de fases divide al diagrama en tres regiones, la primera, llamada región de líquidos, está situada fuera de la envolvente de fases en la parte superior izquierda; la segunda, llamada región de gases, se encuentra fuera de la envolvente de fases en la parte inferior derecha; la última, encerrada por la envolvente de fases, se conoce como zona de dos fases, en esta zona se encuentran todas las combinaciones de temperatura y presión en que la mezcla puede permanecer en dos fases en equilibrio, existiendo dentro de ella las llamadas curvas de calidad o



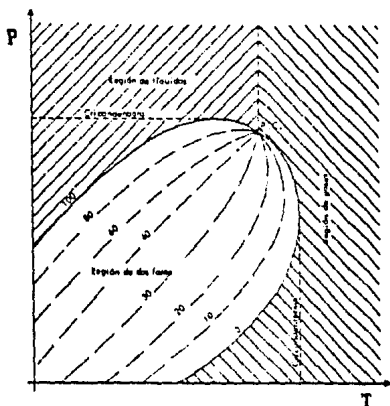


Fig. (4-a).- Diagrama Presión-Temperatura

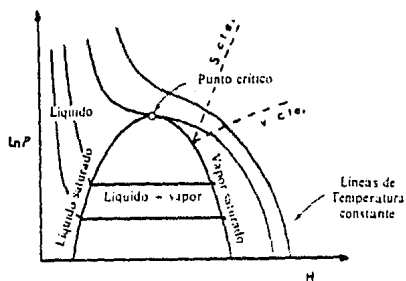


Fig. (4-b).- Diagrama Presión-Entalpía

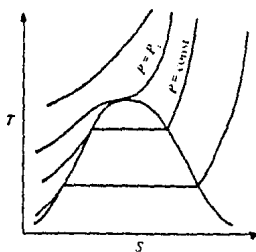


Fig. (4-c).- Diagrama Temperatura-Entropía.

Diagramas termodinámicos para una mezcla de composición constante.

de vaporización constante, indican el porcentaje total de mezcla que se encuentra en estado líquido. Todas estas curvas inciden en el punto crítico. Se distinguen, además, en el mismo diagrama, la cricondentérma y a la cricondenbára, que son la temperatura y presión máximas, respectivamente, a las cuales la mezcla puede permanecer en dos fases en equilibrio.

El cálculo de los puntos necesarios para construir este tipo de diagramas es el objetivo de este capítulo; a partir de los resultados obtenidos es posible construir otros tipos de diagramas como se dijo con anterioridad. En realidad el programa desarrollado para tal fin es un uso o aplicación de los problemas de ELV resueltos en el capítulo anterior.

El programa construye en primer lugar la curva de rocío, luego la de burbuja y a continuación las de vaporización constante. Para la construcción de cada una de las curvas se comienza con un valor inicial de presión, previamente asignado, y se calcula la temperatura correspondiente. Después se incrementa la presión y se calcula nuevamente la temperatura correspondiente. En este momento se dispone de dos puntos en la curva que se desea trazar. El programa debe decidir que cálculo conviene hacer a continuación, generando un punto adicional en el diagrama PT. Todos los puntos siguientes se generan de igual forma, basándose en la información de los dos últimos puntos generados.

El fundamento para la construcción del diagrama PT se refiere a lo que es más conveniente calcular, es decir, el programa decide cuando es más factible calcular la presión o la temperatura para las curvas de rocío, burbuja o vaporización constante. La conveniencia de qué cálculo se debe efectuar se determina por el grado de inclinación que presentan las curvas. Por medio de pendientes se establece el grado de inclinación de las curvas. Si la pendiente de la curva en el diagrama PT es grande conviene calcular la temperatura para un valor especificado de la presión. En caso de que la pendiente sea pequeña se invierte el cálculo, siendo

la presión la incógnita.

### B. ALGORITMO

Entonces la secuencia de cálculo (ejemplificada para la curva de rocío) es :

- 1.- Especificar los incrementos de presión y temperatura, DP y DT respectivamente.
- 2.- Especificar la presión inicial, PA.
- 3.- Calcular la temperatura de rocío a la presión inicial PA, se obtienen TA y las KA<sub>1</sub>'s.
- 4.- Incrementar la presión,  $P = PA + DP$
- 5.- Calcular la temperatura de rocío a la presión P, obteniéndose T y las K<sub>1</sub>'s.
- 6.- Calcular  $DPT = (P - PA) / (T - TA)$ 
  - 6.1.- Si  $|DPT| > DP / DT$  se cambia P y la temperatura será la incógnita.
  - 6.2.- Si  $|DPT| \leq DP / DT$  se cambia T y la presión será la incógnita.
- 7.- Supongase que se cumple el punto (6.1), entonces el nuevo valor de la presión se obtiene adicionando DELP al último valor de P, este incremento en la presión se calcula mediante :
 

Si  $P \geq PA$  ;  $DELP = DP$   
 Si  $P < PA$  ;  $DELP = -DP$

La estimación inicial de las incógnitas ( en este caso T y K<sub>1</sub> ) se obtienen por extrapolación lineal de los valores obtenidos en los dos últimos puntos. Se conserva la información del último punto y se procede a calcular el nuevo punto de rocío, o sea :

$DELTA = DELP / ( P - PA )$  siempre (+)  
 $DX = ( K_1 - KA_1 ) \cdot DELTA$   
 $KA_1 = X_1$   
 $X_1 = X_1 + DX$

$$\text{DELT} = (T - T_A) \cdot \text{DELTA} ; T_A = T ; T = T + \text{DELT}$$

$$P_A = P ; P = P + \text{DELP}$$

Regresar al punto (5).

8.- En el caso de que tenga que cambiarse T, su nuevo valor se obtiene por :

$$\text{Si } T > T_A ; \text{ DELT} = DT$$

$$\text{Si } T < T_A ; \text{ DELT} = -DT$$

La estimación inicial de las incógnitas ( en este caso P y  $X_1$  ) se obtienen por extrapolación lineal de los valores obtenidos en los dos últimos puntos. Se conserva la información del último punto y se procede a calcular el nuevo punto de rocío, o sea :

$$\text{DELTA} = \text{DELT} / ( T - T_A ) \text{ siempre } (+)$$

$$DX = ( X_1 - X_{A1} ) \cdot \text{DELTA}$$

$$X_{A1} = X_1$$

$$X_1 = X_1 + DX$$

$$\text{DELP} = (P - P_A) \cdot \text{DELTA} ; P_A = P ; P = P + \text{DELP}$$

$$T_A = T ; T = T + \text{DELT}$$

Cálculo de la presión de rocío a la temperatura T, se obtienen P y nuevas  $X_1$ 's

Regresar al punto (6).

9.- El proceso termina cuando la diferencia de los factores de compresibilidad de las fases líquida y vapor, ZV y ZL respectivamente, es menor que 0.1, es decir

$$( ZV - ZL ) < 0.1 \quad (4-1)$$

Cuando se cumple con la relación (4-1) empiezan los cálculos para la curva de burbuja y posteriormente las de vaporización constante ( para  $V/F = 0.2, 0.4, 0.6$  y  $0.8$  ).

El diagrama de bloques del algoritmo propuesto se muestra en la figura (4-d).

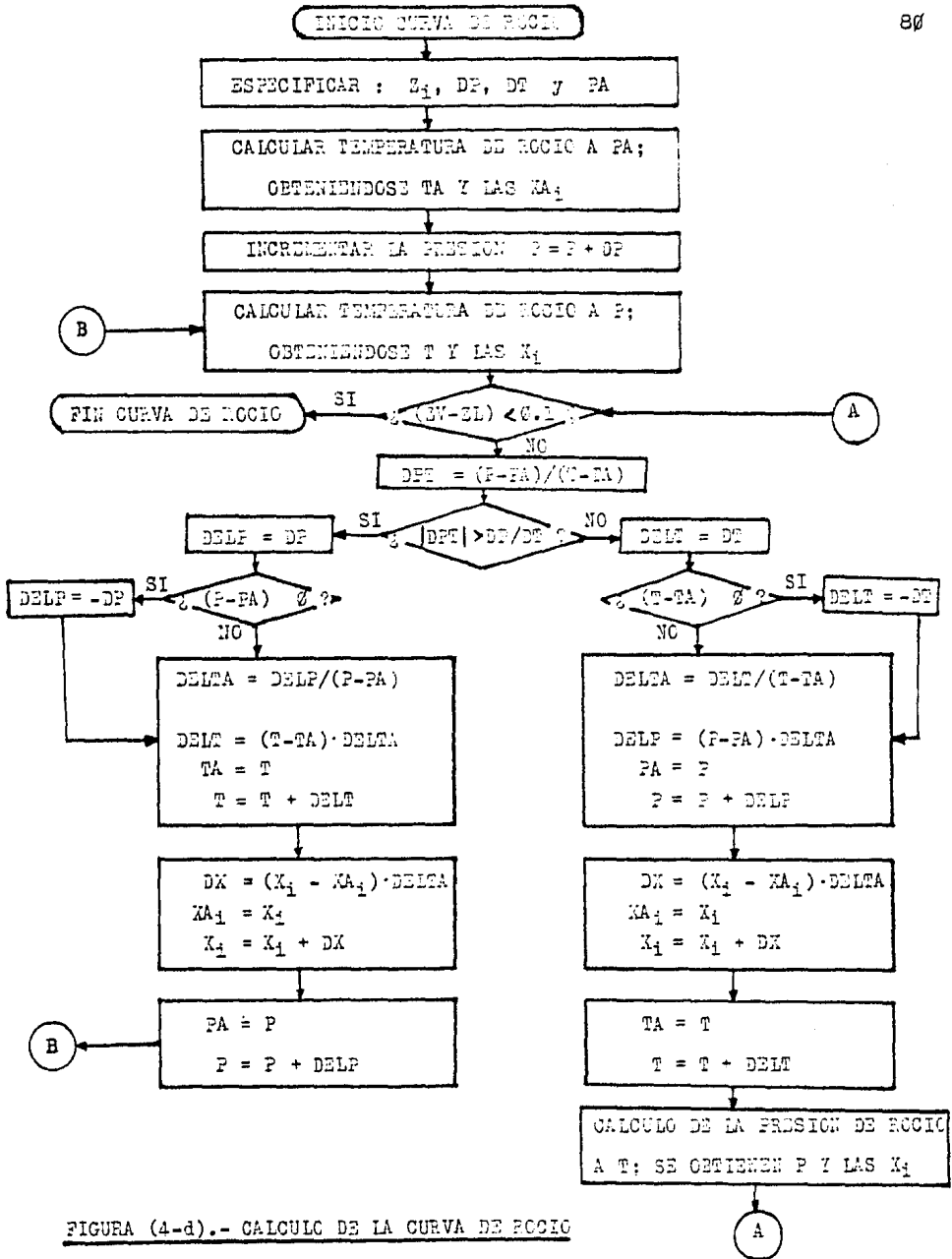


FIGURA (4-d).- CALCULO DE LA CURVA DE ROCIO

### C. DESCRIPCIÓN DEL PROGRAMA

El programa que calcula los puntos para la construcción de la zona de dos fases está contenido en el disco No. 3. (ver apéndice C-1)

En dos partes se desarrolla este programa; la primera, es idéntica a la parte 1 de los puntos de burbuja y rocío del capítulo anterior, la segunda es una combinación de la parte 2 de los cálculos de los puntos de burbuja y rocío y de la parte 3 de los cálculos de un flash. Aquí la información requerida es : (parte No. 2 )

- Composición de la mezcla
- Incremento de presión
- Incremento de temperatura

- La presión inicial.- A partir de esta presión comienza a construirse la campana de la zona de dos fases, tomando en cuenta la información anterior. El programa entonces empieza a calcular la curva de rocío, incrementando la presión o la temperatura según convenga (y por lo tanto calculando la presión o temperatura de rocío). Se considera que la curva de rocío está terminada cuando la diferencia entre los factores de compresibilidad de las fases vapor y líquida es menor que una tolerancia preestablecida, ec. (4-1). De igual manera se procede con la curva de burbuja y las de  $(V/F)$  constantes. Dado que la estructura de este programa contiene las partes correspondientes a los cálculos de los puntos de burbuja y rocío y los del flash del capítulo anterior se consideró conveniente suprimir la visualización de los procesos iterativos que tienen lugar en estos cálculos, es decir, en este programa sólo se imprimen resultados.

El programa calcula las curvas  $(V/F) = 0.2, 0.4, 0.6$  y  $0.8$  .

El listado de este programa se encuentra en el apéndice C-1.

D. EJEMPLO

Se desea construir el diagrama Presión-Temperatura (P-T) para una mezcla que tiene el siguiente composición porcentual : 68 de  $\text{CH}_4$ , 2% de  $\text{C}_2\text{H}_6$ , 1% de  $\text{C}_3\text{H}_8$ , 1 de  $\text{C}_4\text{H}_{10}$  y 1 de  $\text{C}_5\text{H}_{12}$ .

La ecuación de estado a emplear es la de Peng-Robinson.

El sistema de unidades seleccionado es : Presión en atmósferas, Temperatura en  $^{\circ}\text{K}$  y entalpía en cal/gmol.

No se alimentaron parámetros de interacción binarios para la mezcla.

Los incrementos de temperatura y presión requeridos se han fijado en 2.5  $^{\circ}\text{K}$  y 5 atm respectivamente. La presión inicial a la cual se empezará a construir el diagrama es de 5 atm.

A continuación se muestra la forma en que se obtienen los resultados y posteriormente el diagrama obtenido.

NOTA : Por limitaciones de espacio no se incluyen los datos obtenidos para la mezcla considerada ( ya que se utilizó un formato diferente al mostrado a continuación ).

SISTEMA DE UNIDADES SELECCIONADO PARA LA ENTRADA/SALIDA DE DATOS/ RESULTADOS

PRESION EN : ATM

TEMPERATURA EN : °K

ENTALPIA EN : CAL/GMOL

ENTROPIA EN : CAL/GMOL°K

FLUJO EN : GMOL/HR

CARGA TERMICA EN : CAL/HR

ESTA DE ACUERDO ? (SI/NO) ?SI

PROCESANDO INFORMACION

QUE TIPO DE SOLUCION INTERA PARA EL CALCULO DEL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD ZETA ?

<1> ANALITICA <2> NUMERICA

ELECCION =?1

PROPORCIONE LO SIGUIENTE :

LA COMPOSICION DE LA MEZCLA :

Z(CO4)=0.65

Z(CO2)=0.30

Z(CO3)=0.05

Z(CO4)=0.01

Z(CO5)=0.01

INCREMENTO DE PRESION (ATM) :

DP =?5

INCREMENTO DE TEMPERATURA (°K) :

DT=?2.5

CUAL ES LA PRESION INICIAL ?

PO (ATM)=?5

<< CURVA DE ROCIO >>



## &lt;&lt; CURVA DE ROCIO &gt;&gt;

\*\*\*\*\*  
 TEMPERATURA=100.00 K  
 PRESION=1.0 ATM

(M.F.=1) NO. IT=0  
 < CONDICIONES >  
 (FRACCION MOL)

FORMULA	LIQUIDO	VAPOR	Nº IT=0
OH4	1.00000	0.00	10.00000
O2H6	0.00000	0.00	0.00000
COH6	0.00000	0.00	0.00000
COH12	0.00000	0.00	0.00000

TOTAL 1 1

PROPIEDADES : LIQUIDO VAPOR

ENTALPIA : -10016.1076 -10000.0000  
 (KCAL/GMOL)

ENTROPIA : -110.00000 -10.00000  
 (KCAL/GMOL K)

BETA : 0.00000000 0.00000000

\*\*\*\*\*  
 TEMPERATURA=100.75 K  
 PRESION=1.0 ATM

(M.F.=1) NO. IT=0  
 < CONDICIONES >  
 (FRACCION MOL)

FORMULA	LIQUIDO	VAPOR	Nº IT=0
OH4	1.00000	0.00	10.00000
O2H6	0.00000	0.00	0.00000
COH6	0.00000	0.00	0.00000
COH12	0.00000	0.00	0.00000

TOTAL 1 1

PROPIEDADES : LIQUIDO VAPOR

ENTALPIA : -97700.1737 -19799.0736  
 (KCAL/GMOL)

ENTROPIA : -114.210570 -00.000000  
 (KCAL/GMOL K)

BETA : 0.00000000 0.00000000

\*\*\*\*\*

TEMPERATURA=74.74 °K  
 PRESION=97.3681000 ATM  
 VAPOR= NO. 17=10

< COMPOSICIONES >  
 (FRACCION MOL)

FORMULA	LITROS	VAPOR	NO. 17
DM4	1.00000	1.00	1.000000
DM6	1.00000	1.00	1.000000
DM8	1.00000	1.00	1.000000
DM12	1.00000	1.00	1.000000

TOTAL 1 1

PROPIEDADES : LITROS VAPOR

ENTALPIA : -14116.4600 -14075.3124  
 (KCAL/MOL)

ENTROPIA : -61.16607011 -61.5470014  
 (KCAL/MOL K)

BETA : 1.940000000 1.84777110

<< LITRA DE BOMBIA >>

\*\*\*\*\*

TEMPERATURA=141.36 °K  
 PRESION=97.3681000 ATM  
 VAPOR= NO. 17=10

< COMPOSICIONES >  
 (FRACCION MOL)

FORMULA	LITROS	VAPOR	NO. 17
DM4	1.00	1.00	1.000000
DM6	1.00	1.00	1.000000
DM8	1.00	1.00	1.000000
DM12	1.00	1.00	1.000000

TOTAL 1 1

PROPIEDADES : LITROS VAPOR

ENTALPIA : -12516.7200 -12414.1100  
 (KCAL/MOL)

ENTROPIA : -61.4776184 -59.2101007  
 (KCAL/MOL K)

BETA : 1.920000000 1.900000000

#####

TEMPERATURE=298.15 K

PRESSURE=101325 Pa

FORMULA C10H16

< COMPOSITIONS >

#####

FORMULA	LIQUID	SOLID	LIQUID
CH4	1.00	1.00000	1.00000
C2H6	2.00	1.00000	1.00000
C3H8	1.00	1.00000	1.00000
C4H10	1.00	1.00000	1.00000

TOTAL 1 1

FORMULAEES : C10H16 1.0000

ENTHALPY : -21366.7268 -20481.0469

HEATCAPAC

ENTROPY : -11.417204 -11.1587000

HEATENTHALPY

ZETA : 1.01948704 1.00000000

<< DATA WRT = 12 >>

#####

TEMPERATURE=298.15 K

PRESSURE=101325 Pa

FORMULA C10H16

< COMPOSITIONS >

#####

FORMULA	LIQUID	SOLID	LIQUID
CH4	1.0000	1.00000	1.00000
C2H6	1.0000	1.00000	1.00000
C3H8	1.0000	1.00000	1.00000
C4H10	1.0000	1.00000	1.00000
C5H12	1.0000	1.00000	1.00000

TOTAL 1 1

FORMULAEES : C10H16 1.0000

ENTHALPY : -34104.1671 -31111.1616

HEATCAPAC

ENTROPY : -10.9482541 -10.912210

HEATENTHALPY

ZETA : 1.00762874 1.00000000

FORMULAEES ZETA ALL DIVISION :

ENTHALPY =-34104.1671 Pa=101325

ENTROPY =-10.97762614 Pa=101325

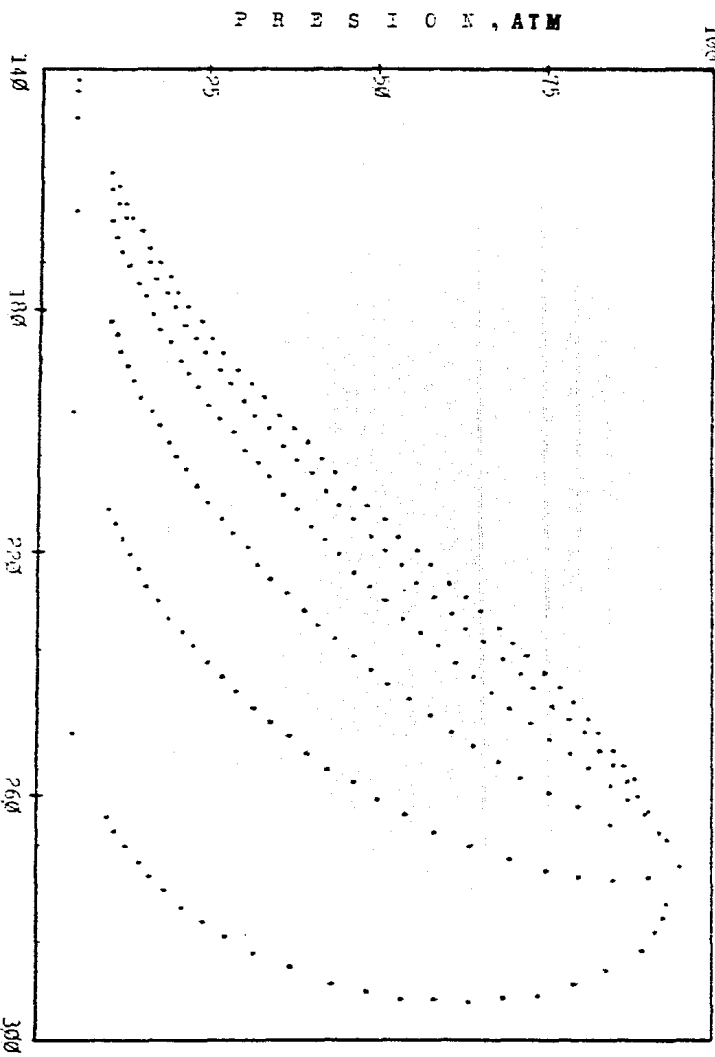


Diagrama P-T para la mezcla : G3H4, G4H6, G5H8, G6H10, G7H12, 1% de G4H10 y 1% de G5H12.

Los resultados fueron obtenidos utilizando la ecuación de estado de Peng-Robinson.

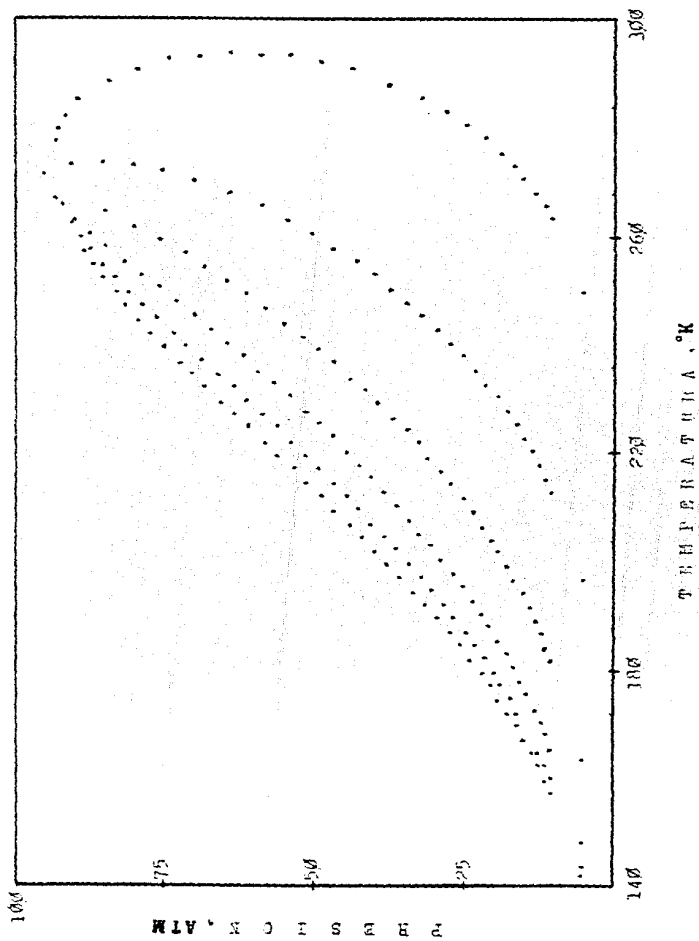


Diagrama P-T para la mezcla : 60% de  $CH_4$ , 20% de  $C_2H_6$ , 10% de  $C_3H_8$ , 10% de  $C_4H_{10}$  y 1% de  $C_5H_{12}$ .

Los resultados fueron obtenidos utilizando la ecuación de estado de Peng-Robinson.

SIMULACION DE UNA COLUMNA DE PLATOS PARA LA DESTILACION  
MULTICOMPONENTE

A. CONCEPTOS

A.1. MODELO

Para comprender el funcionamiento o accionar de un sistema y su proceso, es necesario establecer una serie de premisas y condiciones que se suponen describen en su totalidad o en casi su totalidad el comportamiento del sistema, y además se cumplen; dicho de otra forma hay que hacer fácil de visualizar aquello que es complejo por naturaleza. A esta serie de premisas se les da el nombre de MODELO. Un modelo puede ser simple o bien muy complejo, dependiendo de :

- a) Las características del sistema que se trata.
- b) Del detalle de análisis al que se quiera llegar.

Los modelos y en particular los modelos matemáticos, pueden adoptar alguna de las siguientes formas :

- Gráficas
- Tablas
- Ecuaciones algebraicas
- Ecuaciones diferenciales
- Ecuaciones en el dominio de las transformadas de Laplace

En ocasiones por necesidad y en otras por comodidad el modelo puede estar formado por conjuntos de ecuaciones mencionadas anteriormente.

Es frecuente clasificar a los modelos como estáticos o como dinámicos, dependiendo si se trata de explicar con ellos el comportamiento en estado estacionario o permanente del sistema o se trate de describir

cambios que se puedan efectuar durante la operación.

### A.2. SIMULACION

La reproducción de un fenómeno físico y/o químico mediante un modelo físico o matemático se le da el nombre de SIMULACION.

A los ingenieros químicos con frecuencia se les encomienda el estudio inicial de las posibilidades de un proceso que se sugiere, o el análisis de un proceso ya existente, con el fin de encontrar las mejoras que se puedan introducir. En cualquiera de esos casos, resulta conveniente simular la operación en estado estacionario del proceso real mediante un modelo matemático, de forma que se puedan explorar distintas condiciones de operación y establecer sobre la economía del proceso.

La utilidad de la simulación de procesos químicos ha sido ampliamente reconocida por la industria y como consecuencia de esto, muchas compañías de productos químicos, derivados del petróleo, etc., han desarrollado diversos sistemas de simulación. Los sistemas de simulación se basan, principalmente, sobre la idea del desarrollo de representaciones matemáticas para las unidades individuales del proceso. Uniendo entre sí las unidades con procesos y corrientes de información, se puede estudiar el proceso real en una computadora sin necesidad de construir o manipular la planta.

### A.3. CASCADA

Una etapa ideal se define como un equipo o sección de equipo cuyas corrientes de salida están en equilibrio físico. Los sistemas formados por varias etapas reciben el nombre de CASCADA.

Con el fin de ilustrar el comportamiento de una cascada de etapas ideales, se describe a continuación un tipo de cascada en contracorriente para una columna de destilación de mezclas multicomponentes.

## B. DESCRIPCION DEL SISTEMA HIPOTETICO

La figura (5-a) es la representación esquemática del sistema considerado para la simulación. El sistema está constituido por  $(NE + 2)$  etapas (platos) en equilibrio, donde  $NE$  es el número de platos entre el condensador (plato 0) y el reboilador (plato  $NE + 1$ ), en todo el sistema no ocurren reacciones químicas ni tampoco hay acumulación de materia, es decir, opera a régimen estacionario. En cada una de las etapas (excepto para el condensador y reboilador) se supone que existe una corriente de alimentación  $F_j$ , una corriente lateral de descarga de flujo líquido  $U_j$ , una corriente lateral de descarga de flujo vapor  $G_j$  y un cambiador de calor  $Q_j$ . El subíndice  $j$  denota el número de la etapa, número que se estableció siguiendo el sentido de flujo de la corriente líquida. Entonces se tiene que  $1 \leq j \leq NE$  para las variables antes mencionadas; La representación esquemática general para la  $j$ -ésima etapa en equilibrio se muestra en la figura (5-b).

## C. FORMULACION DEL MODELO MATEMATICO. ECUACIONES FUNDAMENTALES

El modelo matemático del sistema está constituido por ecuaciones algebraicas que se obtienen de los balances de materia y energía y de las relaciones de equilibrio.

Tomando como referencia las figuras (5-a) y (5-b) las ecuaciones fundamentales son :

- Balance de materia para cada componente (  $N$  ecuaciones para cada etapa,  $N$  es el número de componentes )

$$L_{j-1} X_{i,j-1} + V_{j+1} Y_{i,j+1} + F_j Z_{i,j} - (L_j + U_j) X_{i,j} - (V_j + G_j) Y_{i,j} = 0$$

$$\text{para } 1 \leq i \leq N \quad (5-1)$$

$$1 \leq j \leq NE$$



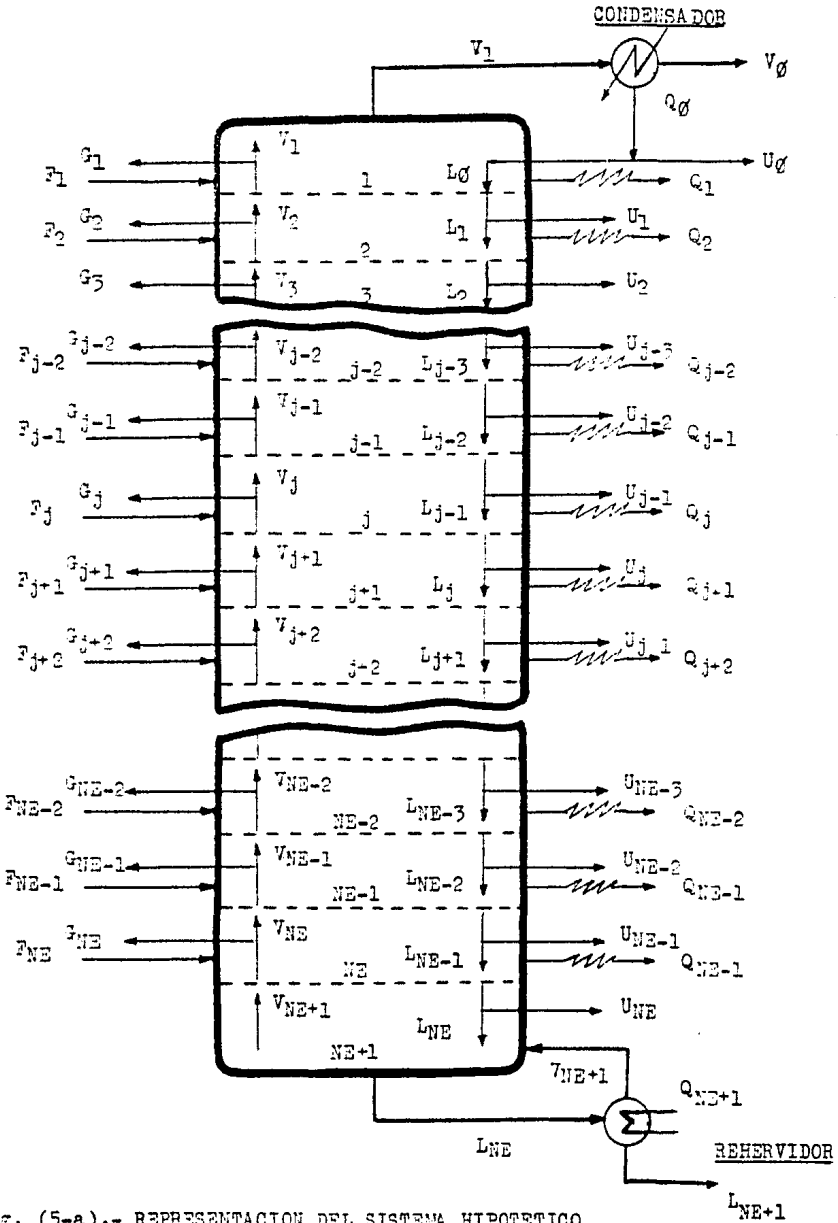


Fig. (5-a).- REPRESENTACION DEL SISTEMA HIPOTETICO

- Relaciones de equilibrio físico para cada componente ( N ecuaciones por cada etapa )

$$Y_{i,j} = K_{i,j} X_{i,j} = \emptyset \quad (5-2)$$

para  $1 \leq i \leq N$

$\emptyset \leq j \leq NE + 1$

- Suma de las fracciones mol ( dos por cada etapa )

$$(SX)_i = \sum_{i=1}^N X_{i,j} - 1 = \emptyset \quad (5-3)$$

$$(SY)_i = \sum_{i=1}^N Y_{i,j} - 1 = \emptyset \quad (5-1)$$

para ambas  $\emptyset \leq j \leq NE + 1$

- Balance de energía ( una por cada etapa )

$$L_{j-1}HL_{j-1} + V_{j+1}HV_{j+1} + F_jHF_j - (L_j + U_j)HL_j - (V_j + G_j)HV_j - Q_j = \emptyset \quad (5-5)$$

para  $1 \leq j \leq NE$

- Balances de materia y energía auxiliares :

- Balance de materia por etapa ( NE ecuaciones )

$$L_j = F_j + V_{j+1} + L_{j-1} - (V_j + G_j) - U_j \quad (5-6)$$

para  $1 \leq j \leq NE$

- Balance de materia en el condensador y rehervidor :

condensador :  $V_1 = V_0 + U_0 + L_0 \quad (5-7)$

rehervidor :  $L_{NE+1} = \sum_{j=1}^{NE} (F_j - U_j - G_j) - (V_0 + U_0) \quad (5-8)$

- Balance de energía en el condensador y rehervidor :

condensador :  $(L_0 + U_0)HL_0 + V_0HV_0 - V_1HV_1 - Q_0 = \emptyset \quad (5-9)$

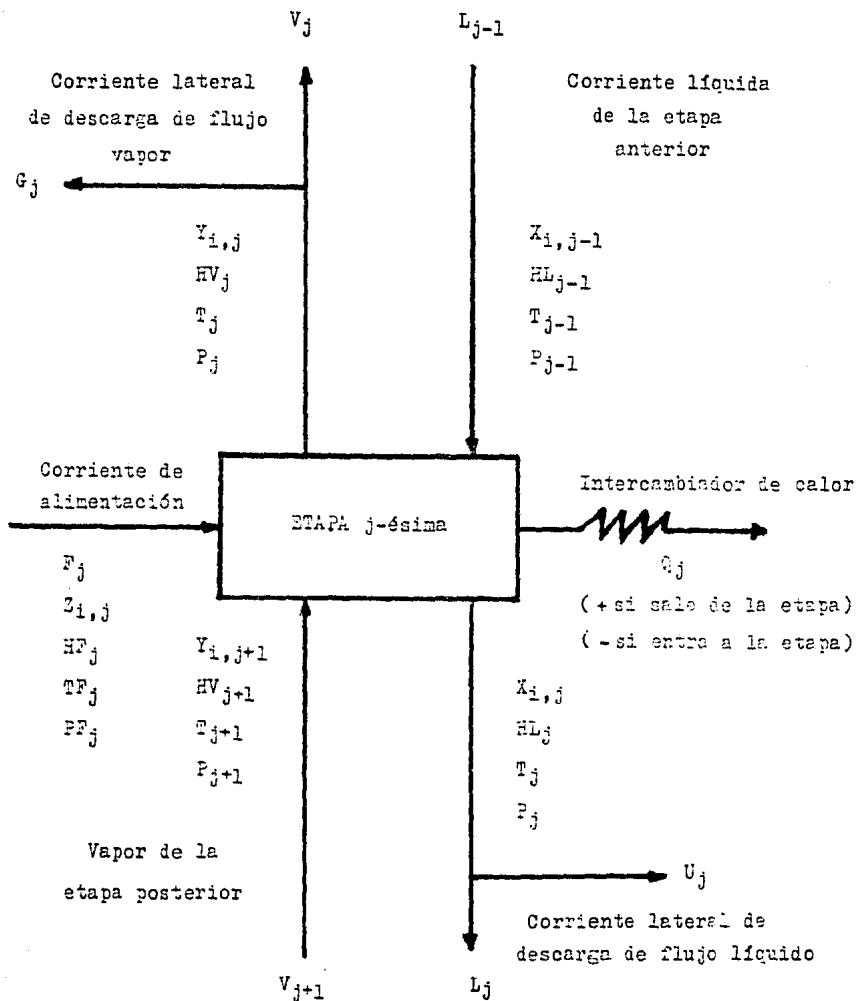


FIGURA (5-b).- REPRESENTACION ESQUEMATICA GENERALIZADA PARA LA  
 $j$ -ésima ETAPA EN EQUILIBRIO FISICO.

$$\text{rehervidor : } V_{NE+1}HV_{NE+1} + L_{NE+1}HL_{NE+1} - L_{NE}HL_{NE} - Q_{NE+1} = 0 \quad (5-10)$$

En general las propiedades físicas son consideradas de igual manera que en los capítulos anteriores, esto es

$$K_{i,j} = K_{i,j} \{ X_{i,j}, Y_{i,j}, T_j, P_j \}$$

$$HL_j = HL_j \{ X_{i,j}, T_j, P_j \}$$

$$HV_j = HV_j \{ Y_{i,j}, T_j, P_j \}$$

Si estas relaciones no son consideradas como ecuaciones y las tres propiedades no son tomadas como variables, cada etapa en equilibrio se define únicamente por  $(2N + 3)$  ecuaciones  $[(5-1) \text{ a } (5-5)]$ . El número total de ecuaciones para la cascada en contracorriente es  $[(NE + 2)(2N + 3)]$ . El número total de variables son  $[(NE + 2)(3N + 10) + 1]$  por lo que se deben especificar  $[(NE + 2)(N + 7) + 1]$  variables para que el sistema este bien determinado. La situación del número de ecuaciones, variables y grados de libertad se muestran en la tabla (5-A).

Una manipulación algebraica de las ecuaciones anteriormente formuladas nos conduce a unas matrices tridiagonal y bidiagonal para los balances de materia y energía respectivamente. A continuación se indica el procedimiento.

#### - Balance de materia

De la ecuación (5-2) se obtiene

$$Y_{i,j} = K_{i,j} X_{i,j} \quad (5-11)$$

si se sustituye la ecuación (5-11) en la ecuación (5-1) para eliminar las  $Y_{i,j}$ 's y el balance de materia por componente se reduce a un conjunto de ecuaciones lineales de la siguiente forma :

$$A_j X_{i,j-1} + B_{i,j} X_{i,j} + C_{i,j} X_{i,j+1} = D_{i,j} \quad (5-12)$$

Tabla (5-A).- NUMERO DE ECUACIONES, VARIABLES Y ESPECIFICACIONES.

A.- NUMERO DE ECUACIONES.

- POR ETAPA :		
Balace de materia		N
Relaciones de equilibrio		N
Balace de energía		1
Suma fracciones mol		2
		<hr/>
		2N + 3

El número total de ecuaciones para el sistema es :  $(NE + 2)(2N + 3)$

B.- NUMERO DE VARIABLES.

- El número total de variables para el sistema está dado por :

$$\sum_{j=1}^{NE+1} (NV_j - NR_j) + N_r$$

donde NV es el número de variables; NE es el número de restricciones y  $N_r$  es igual al número de variables que se repiten en el sistema.

A continuación se indica como se obtienen :

- NV POR ETAPA :		
Corriente de alimentación, $F_j$		N + 2
Corriente lateral de descarga líquida, $U_j$		N + 2
Corriente lateral de descarga vapor, $G_j$		N + 2
Corriente líquida, $L_j$		N + 2
Corriente vapor, $V_j$		N + 2
Corriente líquida de la etapa anterior, $L_{j-1}$		N + 2
Corriente vapor de la etapa posterior, $V_{j+1}$		N + 2
Cambiodor de color, $Q_j$		1
		<hr/>
		7N + 15

- NR POR ETAPA :

Inherentes :

T y P igual entre $L_j$ y $V_j$		2
Corrientes $V_j$ y $G_j$		N + 1
Corrientes $L_j$ y $U_j$ (igual composición, T y P)		N + 1
Balace de materia		N
Balace de energía		1
Distribución de fases		N
		<hr/>
		4N + 5

Tabla (5-A).- NUMERO DE ECUACIONES, VARIABLES Y ESPECIFICACIONES.

( CONTINUACION )

-  $N_T = 1$  ( elemento plato que se repite )

Entonces el número total de variables para el sistema es :

$$(NE + 2) \cdot \left[ (7N + 15) - (4N + 3) \right] + 1 = (NE + 2)(3N + 12) + 1$$

D.- GRADOS DE LIBERTAD O ESPECIFICACIONES.

Grados de libertad = No. de variables - No. de ecuaciones

$$\begin{aligned} & (NE + 2)(3N + 12) + 1 \\ - & (NE + 2)(4N + 3) \\ \hline \end{aligned}$$

Especificaciones :  $(NE + 2)(N + 7) + 1$

NOTA : A continuación se justifica el número de variables para una corriente y para 2 corrientes que tienen la misma composición, presión y temperatura :

Una corriente	Variable	Dos corrientes
N - 1 . . . . .	Composición . . . . .	N - 1
1 . . . . .	Presión . . . . .	1
1 . . . . .	Temperatura . . . . .	1
1 . . . . .	Flujo	
<hr/>		<hr/>
N + 2 . . . . .	TOTAL . . . . .	N + 1









Los valores de  $X_{i,j}$ , pueden entonces obtenerse mediante

$$X_{i,NE+1} = q_{i,NE+1} \quad (5-34)$$

$$X_{i,j-1} = q_{i,j-1} - P_{i,j-1} X_{i,j} \quad 1 \leq j \leq NE+1 \quad (5-35)$$

Una resolución de la matriz tridiagonal es necesario por cada componente. Este método es rápido, fácil de programar y no requiere mucha memoria de la computadora. Wang y Henke (39) afirman que este método de resolución de las ec. (5-12) no da lugar a problemas causados por errores de truncación en las computadoras, por ejemplo, - por sustracción de dos cantidades aproximadamente iguales.

- Matriz bidiagonal

Resolver la matriz bidiagonal es más fácil si se conoce el flujo de la corriente vapor de la etapa 1 [  $V_1$  se calcula con la ec. (5-7) ] por sustitución avanzando a través de la matriz hacia delante, o sea :

$$V_{j+1} = \frac{c_{i,j} - a_{i,j} V_j}{b_{i,j}} \quad 1 \leq j \leq NE \quad (5-36)$$

Una resolución de esta matriz es requerida por iteración.

- Método punto de burbuja para destilación

Se le conoce con este nombre porque se supone que el líquido en cada una de las etapas se encuentra en su punto de burbuja.

Cuando se formuló es sistema hipotético considerado para la simulación se dijo que tenían que especificarse [  $(NE+2)(N+7)+1$  ] variables para que el sistema estuviera bien determinado, pues bien, las especificaciones propuestas en esta tesis son :

- 1.- Todas las  $F_j$ ,  $Z_{i,j}$ , condiciones de las alimentaciones ( $TF_j$ ,  $PF_j$ ),  $P_j$ ,  $G_j$ ,  $U_j$ , todos los  $Q_j$  excepto  $Q_0$  y  $Q_{NE+1}$

- 2.- Número de platos entre condensador y rehervidor : NE
- 3.- Relación de reflujo : R (en sustitución de  $Q_D$ )
- 4.- Flujo obtenido como destilado : D (en sustitución de  $Q_{NE-1}$ )

Y las variables desconocidas (incógnitas) son :

- Todas las  $X_{i,j}$ ,  $Y_{i,j}$ ,  $T_j$ ,  $V_j$  y  $L_j$ .

Entonces el algoritmo general seleccionado se muestra a continuación.

- 1.- Alimentar la presión de operación de la columna. (todas las  $P_j$  y  $PP_j$  son iguales a la presión de operación)
- 2.- Suposición inicial del perfil de temperaturas  $T_j$  en la columna.
- 3.- Alimentar relación de reflujo de operación.
- 4.- Alimentar flujo obtenido como destilado.
- 5.- Alimentar el número de etapas de alimentación.
  - 5.1.- Especificar para cada corriente alimentada :
    - Ubicación (número de la etapa)
    - Flujo ( $F_j$ )
    - Composición ( $Z_{i,j}$ )
    - Temperatura ( $TF_j$ )
- 6.- Alimentar el número de etapas con corrientes laterales líquidas descargadas.
  - 6.1.- Especificar para cada corriente :
    - Ubicación (valor de  $j$ ,  $1 \leq j \leq NE$ )
    - Flujo ( $U_j$ )
- 7.- Alimentar el número de etapas con corrientes laterales de vapor descargadas.
  - 7.1.- Especificar para cada corriente :
    - Ubicación
    - Flujo ( $G_j$ )
- 8.- Alimentar el número de etapas en donde se intercambia calor (sin

considerar condensador y rehervidor).

3.1.- Especificar para cada etapa :

- Ubicación

- Cantidad de calor eliminado o suministrado ( $Q_j$ )

9.- Seleccionar el tipo de condensador (total o parcial).

9.1.- Si es total :  $V_{\emptyset} = \emptyset$  ;  $U_{\emptyset} = D$

9.2.- Si es parcial :  $U_{\emptyset} = \emptyset$  ;  $V_{\emptyset} = D$

10.- Suposición de los flujos de vapor y de las  $X_{1,j}$ 's iniciales.

11.- Cálculo de los flujos de la fase líquida.

11.1.-  $L_{\emptyset} = R \cdot D$

11.2.-  $L_j$  con la ec. (5-6) para  $1 \leq j \leq NE$

11.3.-  $L_{NE+1}$  con la ec. (5-8)

12.- Generar los coeficientes de la matriz tridiagonal.

12.1.- Para cada componente resolver la matriz

13.- Con las  $X_{1,j}$ 's obtenidas en el punto anterior encontrar las nuevas temperaturas  $T_j$ 's, considerando que cada etapa de la columna se encuentra en su punto de burbuja.

14.- Resolver la matriz tridiagonal para los nuevos flujos de la fase vapor.

14.1.-  $V_{\emptyset} = D - U_{\emptyset}$

14.2.-  $V_1$  con la ec. (5-7)

14.3.-  $V_{j+1}$  con la ec. (5-56) para  $1 \leq j \leq NE$

15.- Calcular los nuevos flujos de la fase líquida [ punto (11) ].

16.- Repetir los pasos (12) al (15) hasta que se satisfaga el siguiente criterio de convergencia :

$$\sum_{j=\emptyset}^{NE+1} \Delta T_j^2 \cong \sum_{j=\emptyset}^{NE+1} \left[ (T_j)_{IT} - (T_j)_{IT-1} \right]^2 \leq \epsilon_T \cong 0.01(NE+2)$$

(5-37)

donde  $\epsilon_T$  es una tolerancia preestablecida con respecto al error que hay con la variable temperatura; IT es el número de iteración.

NOTA : El cálculo de propiedades físicas están implícitas en algunos de los puntos anteriores, por ejemplo :

- Las  $HF_j$  y fracciones evaporadas (si las condiciones de entrada son las de una mezcla líquido-vapor) de las corrientes alimentadas en el punto (5).
- Las  $HL_j$ ,  $HV_j$  y  $K_{i,j}$  en el punto (13).

Los resultados obtenidos son :

- a) Composición del líquido que sale de cada etapa,  $X_{i,j}$ 's.
- b) Composición del vapor que sale de cada etapa,  $Y_{i,j}$ 's.
- c) Flujos de vapor y líquido que salen de cada etapa,  $L_j$ 's y  $V_j$ 's.
- d) Carga térmica en el condensador y reanervidor,  $Q_C$  y  $Q_{RE+1}$ .
- e) Perfil de temperaturas en la columna,  $T_j$ 's.
- f) Fracción evaporada en el reanervidor,  $V_{NE+1} / L_{NE}$ .

#### E. DESCRIPCIÓN DEL PROGRAMA

El programa que realiza la simulación de la columna de platos para la destilación multicomponente se encuentra en el disco No. 4.

Para la simulación se requirió de dos partes, la primera, como era de suponerse es idéntica a las partes 1 anteriores (capítulo III y IV) y la segunda es una modificación a la tesis presentada por Emilio Arturo Zumaya Pérez en 1984 cuyo título es " Formulación de un modelo matemático generalizado y construcción de un simulador para sistemas de destilación por etapas de mezclas multicomponentes ".

Las modificaciones corresponden a la parte del programa que realiza la simulación y éstas son básicamente :

- 1.- El cálculo de propiedades termodinámicas se realiza mediante una ecuación de estado.
- 2.- La forma de hacer las estimaciones iniciales para :
  - 2.1.- Perfil de temperaturas (temperaturas fondo y domo de la columna). Aquí si el usuario lo desea hace las estimaciones.

2.2.- Las  $K_{i,j}$ 's (calculadas idealmente)

2.3.- Flujos de las corrientes líquida y vapor (considerados constantes)

3.- Especificaciones. En este programa se pide la cantidad de destilado (D) y la relación de reflujo como líquido saturado ( $L_0 / D$ ). Esto originó que se tuviera que resolver de otro modo la matriz bidiagonal para el balance de energía [ ec. (5-22) ].

4.- Criterio de convergencia.

5.- Sistema de unidades.

La descripción del programa es en esencia el algoritmo propuesto en la sección anterior. El diagrama de bloques se presenta en la fig. (5-c).

El listado del programa que realiza la simulación se muestra en el apéndice D-1.

#### F. EJEMPLO

Se desea resolver con la ecuación de estado de Schmidt-Wenzel una torre de destilación con las siguientes especificaciones :

Una corriente de alimentación de una mezcla con la siguiente composición en fracción mol : 0.3 de propano, 0.5 de n-butano y 0.4 de n-pentano. La temperatura de alimentación se efectúa a 150 °F. Flujo de 500 lbmol.

La torre de destilación tiene 5 platos. En el plato número 3 tiene lugar la corriente alimentada.

La torre no tiene corrientes laterales de descarga de líquido ni de vapor.

En ninguno de los 5 platos se lleva a cabo una transferencia de calor.

El tipo de condensador de la torre es parcial.

Se desea obtener 100 lbmol/hr de flujo destilado con un reflujo de operación de 2.

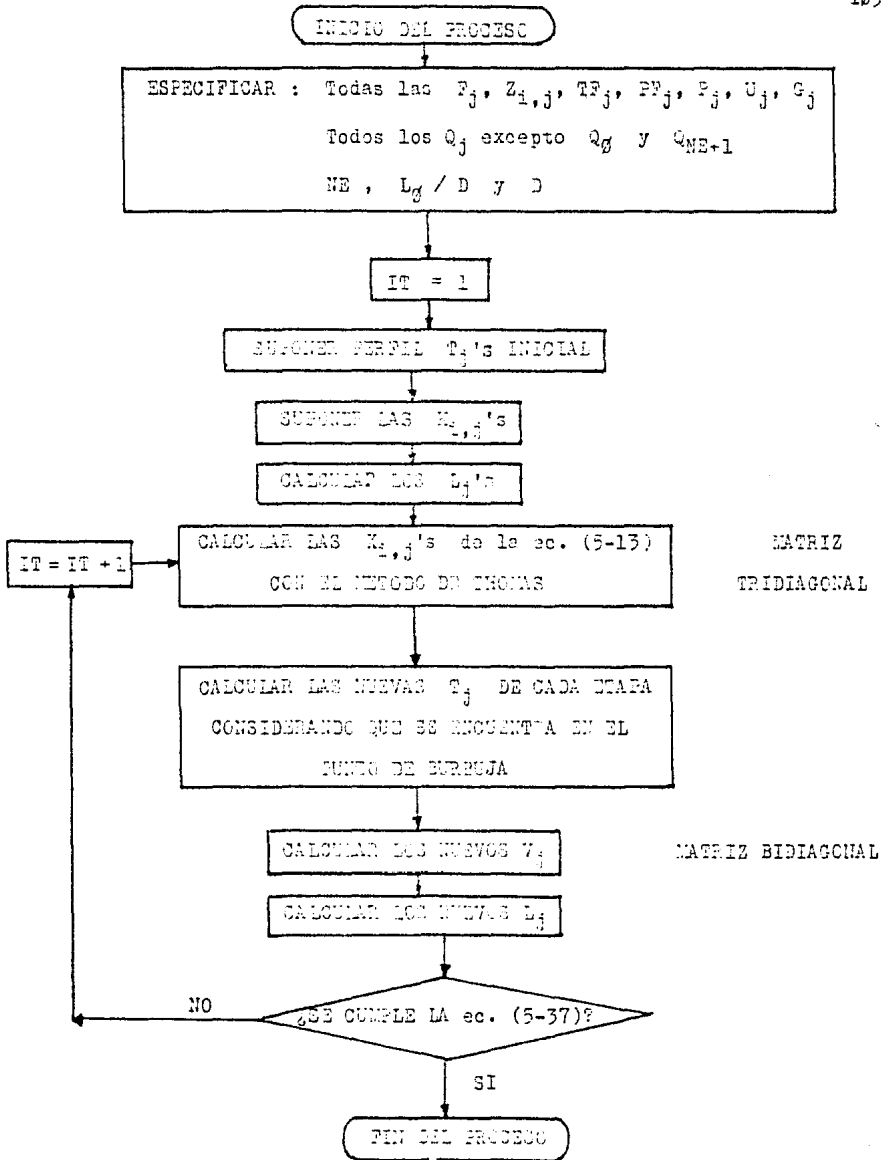
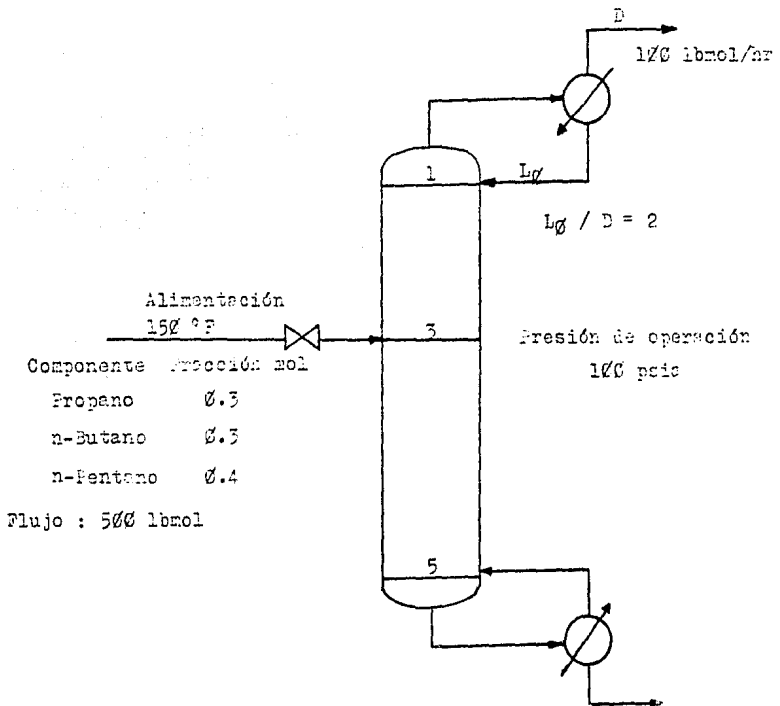


Fig. (5-c).- METODO PUNTO DE BURBUJA PARA DESTILACION

La presión de operación de la torre es de 100 psia.

En una torre similar las temperatura del fondo y domo son 180 °F y 80 °F respectivamente, este último nos permitirá hacer las estimaciones iniciales para el perfil de temperaturas.

La siguiente figura resume las especificaciones indicadas :



A continuación se presenta el listado de datos y resultados para este problema.



PRESION DE OPERACION (PSIA) = 100

DIERE ESTIMAR TEMPERATURAS EN EL BOMB + FONDO DE LA COLUMNA ?

(SI/NO)                      RESPUESTA=NO

TEMP. EN EL BOMB ( °F ) = 100

TEMP. EN EL FONDO ( °F ) = 100

NUMERO DE ETAPAS DE DESTILACION = 5

FLUJO DESTILADO ( LBMOL/H ) = 0.000

REFLUXO DE OPERACION ( LBMOL/H ) = 0

NUMERO DE ETAPAS DE ALIMENTACION = 1  
 CARACTERISTICAS DE LA ALIMENTACION :

ALIMENTACION EN LA ETAPA NUMERADA :

FLUJO ALIMENTICO ( LBMOL/H ) = 500

PROPORCIONE LA COMPOSICION :                      (FRACCION MOL)

(C) PROPANO = 0.00

(M) METANO = 0.00

(A) ACETANO = 0.00

¡ CALCULANDO TEMPERATURAS DE BOMB + SURCADA PARA ESTA ALIMENTACION !

TEMP. DE ASOCIACION ( °F ) =

TEMP. DE BUBLEO = 100.0 °F

TEMP. DE ALIMENTACION ( °F ) = 100

¡ CALCULANDO LA FRACCION EVAPORADA DE LA ALIMENTACION !

MEZCLA LIQUIDA VAPOR FRACCION EVAPORADA = 0.000

PARA CONTINUAR PRESIONE CUALQUIER TECLA

NUMERO DE CORRIENTES LIQUIDAS LATERALES (DESCRIBIDAS EN)

NUMERO DE CORRIENTES VAPOR LATERALES (DESCRIBIDAS EN)

CALOR SUMINISTRADO :

¿ SIN CONDENSAR CONDENSADOR REFRIGERADOR, EN CUALQUIER ETAPA SE SUMINISTRA CALOR ? 0

SELECCIONE OPCION :

1.- CONDENSADOR TOTAL

2.- CONDENSADOR PARCIAL

TECLEE NUMERO DE OPCION 1

-----  
 MEDIDA DE DATOS  
 -----

1

-----  
 SUPUESTOS FLUJO VAPOR Y TEMPERATURAS  
 -----

2

-----  
 RESOLUCION MATRIZ TRIANGULAR A B  
 -----

3

-----  
 RESOLUCION TEMP. Y FLUJO VAPOR  
 -----

4

-----  
 EST= CONVERGEN  
 -----

151

5

-----  
 FIN DE PROCESO  
 -----

CARACTERISTICAS GENERALES DE LA TURBA :  
 NUMERO DE ETAPAS:

NUMERO COMPONENTES EXTERNOS DESARROLLADOS:  
 LUBRICACION VAPOR

NUMERO DE COMPONENTES A DESARROLLAR

NUMERO ETAPAS EXISTE DE ROTACION INTERNA

PRESION DE OPERACION EN POA

ESPECIFICACIONES DE LA ALIMENTACION

PLATO No: 1 MOTOR LINEAL VAPOR

TEMPERATURA 150	FLUJO 500	FRACCION VAPOR RESOLUCION
--------------------	--------------	------------------------------

COMPONENTE	RESOLUCION
PROXANO	13
N-BUTANO	13
N-PENTANO	14

ESPECIFICACIONES DE LA TORRE  
TERMINA LA SIMULACION.

## PLATO NO.1

COMPONENTE	COMPOSICION	
	LICUADO	VAPOR
PROPANO	.42051	.412711
N-BUTANO	.403474	.401937
N-PENTANO	.176026	.185352

## PLATO NO.2

COMPONENTE	COMPOSICION	
	LICUADO	VAPOR
PROPANO	.421561	.421774
N-BUTANO	.414401	.412667
N-PENTANO	.164037	.165559

## PLATO NO.3

COMPONENTE	COMPOSICION	
	LICUADO	VAPOR
PROPANO	.418511	.421291
N-BUTANO	.401346	.401117
N-PENTANO	.180143	.177592

## PLATO NO.4

COMPONENTE	COMPOSICION	
	LICUADO	VAPOR
PROPANO	.419411	.421211
N-BUTANO	.394878	.391671
N-PENTANO	.185711	.187118

## PLATO NO.5

COMPONENTE	COMPOSICION	
	LICUADO	VAPOR
PROPANO	.418574	.421111
N-BUTANO	.401591	.401511
N-PENTANO	.180835	.180811

## FLUJOS Y TEMPERATURAS EN CADA PLATO

PLATO	TEMP.	FLUJO LIC.	FLUJO VAPOR
1	71.6	101	316
2	122.42	199.87	282
3	142.54	438.01	261.87
4	142.54	438.24	36.06
5	142.15	438.34	36.24

## CARACTERISTICAS DEL CONDENSADOR

TIPO CONDENSADOR P-014C

TEMPERATURA DE VAPOR  
DESA. DEL DESTILADO :

PROPANO	1335823
N-BUTANO	1133463
N-PENTANO	5.0148E+0

FLUJO DE LIQ. COND./HR

DESA. DEL LIQUIDO RECONDENSADO

PROPANO	1331023
N-BUTANO	1333444
N-PENTANO	1335431

REFUGIO AL VAPOR

CARCA TERMICA: 1612430.3 BTU/HR

## CARACTERISTICAS DEL RESENVIO

FRACCION EVAPORADA: 0.65001441

TEMPERATURA: 114.97 °F

DESA. DEL PRODUCTO DE CALA:

PROPANO	1131141
N-BUTANO	1133211
N-PENTANO	1134331

FLUJO DE LIQUIDO: 4470 LB/HR

DESA. DEL VAPOR DEL LIQUIDO

PROPANO	1133333
N-BUTANO	1133433
N-PENTANO	1133533

FLUJO DE VAPOR: 1333333 LB/HR

CARCA TERMICA: 333333.33 BTU/HR

PARA EL CALCULO DE PROPIEDADES TERMO-DINAMICAS SE UTILIO LA ECUACION DE ESTADO DE SOGINO-KAWAZU

FIN DEL PROGRAMA

## CAPITULO VI

## BANCO DE DATOS

En el capítulo III en la descripción de los programas (parte 1) se mencionó que por cada componente se requiere de la siguiente información :

- Constantes críticas y factor acéntrico de Pitzer
- Constantes de la ecuación del calor específico como gas ideal en función de la temperatura
- Entalpía y energía libre de Gibbs de formación estándar

A medida que el número de componentes crece ( más de 2 por ejemplo ) el introducir la información anterior, desde el teclado, se hace tedioso y además aumenta la probabilidad de cometer errores. Para reducir al mínimo los errores en la entrada de datos fué creado un archivo de acceso-aleatorio llamado Banco de Datos. El archivo está estructurado en secciones llamadas registros. Cada registro tiene la misma cantidad de información. A los registros se les identifica por un número que indica su posición absoluta en el archivo. Esta característica de los archivos de acceso-aleatorio permitió utilizar a los registros para almacenar la siguiente información : NC, fórmula, nombre, Tc, Pc, Zc, Ec,  $\omega$ , CACP, CBCEP, CCCP, CDCP, DE y DG

donde NC = número del componente

Tc = temperatura crítica, °K

Pc = presión crítica, atm.

Zc = factor de compresibilidad crítico

$\omega$  = factor acéntrico de Pitzer

CACP, CBCEP, }  
 CCCP y CDCP } constantes de la ecuación del calor específico como gas ideal en función de la temperatura. La forma de la ecuación es :

$$C_p^0 = CACP + CBCP \cdot T + C CCP \cdot T^2 + CD CP \cdot T^3$$

con  $C_p^0$  en calorías/gmol y T en °K

BF = Entalpía de formación estándar a 298 °K, Kcal/gmol

DG = Energía de Gibbs de formación estándar a 298 °K para el gas ideal a 1 atm, Kcal/gmol

Entonces para identificar a un componente en el banco de datos es necesario saber el número del registro en donde se almacenó la información, esto es, en el registro 1 se encuentra la información del componente 1, el siguiente registro es el número 2 (componente 2), y así sucesivamente. Los datos del Banco de Datos fueron tomados del libro de Reid-Sherwood-Fraunnitz (31).

Para algunos componentes no se encuentra la información requerida completa, en estos casos ( para fines de identificación ) se asignó el número 10000 cuando  $T_c$ ,  $T_b$ , CACP, CB CP, C CCP, CD CP, BF o DG no se reportó y el número -1 para  $\rho_c$  y  $\mu$ . En el apéndice E-1 está el listado del programa que permite modificar o completar la información faltante o bien añadir más componentes.

A continuación se presenta en forma tabular la información que se almacenó en el archivo.

NC	FORMULA	Tc	Pc	Zc	w	NOMBRE
1	AR	154.8	48.1	.291	-4E-03	ARGEN
2	BCL3	452	36.2	-1	.15	TRICLORURO DE BORO
3	BFO	264.8	49.2	-1	.42	TRIFLUORURO DE BORO
4	BR2	584	102	.27	.132	BROMO
5	NOCL	440	90	.35	.316	CLORURO DE NITRÓGENO
6	CL2	417	76	.275	.073	CLORO
7	PCL3	563	10000	-1	-1	TRICLORURO DE FOSFORO
8	SICL4	507	37	.29	.204	TETRACLORURO DE SILICIO
9	DE	38.	16.4	.314	-.13	DEUTERIO
10	DI0	644	213.8	.225	-1	OXIDO DE DEUTERIO
11	F2	144.3	51.5	.268	.048	FLUOR
12	NF3	234	44.7	-1	.132	TRIFLUORURO DE NITRÓGENO
13	SIF4	259	36.7	-1	-1	TETRAFLUORURO DE SILICIO
14	SFO	318.7	37.1	.281	.286	HEXAFLUORURO DE AZUFRE
15	HCF	363.2	54.4	.283	.003	ACIDO FLUORHIDRICO
16	HCL	324.6	32	.249	.12	ACIDO CLORHIDRICO
17	HF	461	64	.12	.372	ACIDO FLUORHIDRICO
18	HI	424	32	.309	.05	ACIDO YODHIDRICO
19	H2	33.1	12.8	.308	-.22	HIDROGENO
20	H2O	647.6	217.6	.229	.344	AGUA
21	H2S	373.2	33.2	.284	.1	ACIDO SULFIDRICO
22	NH3	405.4	111.3	.242	.25	AMONIACO
23	N2H4	65.6	145	.26	.326	HIDRAZINA
24	HE(4)	5.19	2.24	.301	-.387	HELIO-4
25	I2	919	115	.265	.229	YODO
26	IF	209.4	54.3	.235	-2E-03	YODURO
27	NO	186	64	.25	.007	OXIDO NITRICO
28	NO2	421.4	100	.45	.36	DIOXIDO DE NITRÓGENO
29	NO	126.2	33.5	.28	.04	NITRÓGENO
30	NO2	307.6	71.5	.274	.16	OXIDO NITRICO
31	NE	44.4	27.2	.311	0	NEON
32	O2	154.6	49.8	.283	.021	OXIGENO
33	S02	430.3	77.8	.266	.251	DIOXIDO DE AZUFRE
34	OS	26.1	55	.228	.215	OSONIO
35	S03	491	31	.26	.41	TRIOXIDO DE AZUFRE
36	AE	259.7	57.6	.286	2E-03	AMONIO
37	CBF3	340.2	39.2	.28	-1	TRIFLUOROBOROMETANO
38	CLCF3	102	36.7	.282	.18	CLOROTRIFLUOROMETANO
39	CLCLF2	165	43.7	.28	.176	DICLORODIFLUOROMETANO
40	CCCL2O	455	56	.28	.204	FOSFONO
41	CCCLF	471.2	45.5	.279	.168	TRICLOROFLUOROMETANO
42	CCCL4	536.4	45	.272	.194	TETRACLORURO DE CARBONO
43	CF4	227.6	36.9	.277	.191	TETRAFLUORURO DE CARBONO
44	CO	132.9	34.5	.295	.049	MONOXIDO DE CARBONO
45	CS6	375	56	.26	.059	CARBONIL SULFURO
46	CO2	304.2	72.6	.274	.225	DIOXIDO DE CARBONO
47	CS2	552	78	.293	.115	DISULFURO DE CARBONO
48	CHCLF2	369.2	49.1	.267	.215	CLORODIFLUOROMETANO
49	CHCLF3	451.6	51	.272	.202	DICLOROTRIFLUOROMETANO
50	CHCL3	536.4	54	.293	.216	CLOROFORMO

NC	CACP	CBCP	CCCP	CDCP	DF	DG
1	4.9e9	-7.87E+06	1.234E+08	0	0	0
2	10000	10000	10000	10000	10000	10000
3	10000	10000	10000	10000	10000	10000
4	6.107	2.638E+03	-2.34eE+06	1.033E+09	0	0
5	6.144	1.019e6	-7.977E+06	2.424E+09	12.57	1e
6	6.432	3.362E+03	-9.211E+06	3.674E+09	0	0
7	10000	10000	10000	10000	10000	10000
8	10000	10000	10000	10000	10000	10000
9	7.125	-1.53eE+03	2.774E+06	-3.50000091E+10	0	0
10	10000	10000	10000	10000	-59.57	-56.33
11	5.545	5.734E+03	-5.267E+06	2.672E+09	0	0
12	10000	10000	10000	10000	-29.73	-36.33
13	10000	10000	10000	10000	10000	10000
14	10000	10000	10000	10000	-291.3	-267
15	7.12	-2.22E+06	4.714E+06	-1.47E+09	-2.66	-12.72
16	7.235	-1.71E+03	2.972E+06	-9.31E+10	-32.06	-22.77
17	6.771	1.377E+04	-4.354E+07	5.74E+10	-14.6	-65.3
18	7.142	-1.41E+03	7.17E+06	-1.232E+09	6.3	3.35
19	1.133	2.012E+01	-3.273E+06	1.332E+05	0	0
20	7.701	4.518E+04	1.021E+06	-1.57E+10	-37.3	-34.64
21	7.227	3.421E+04	5.839E+06	-1.51E+09	-4.12	-7.7
22	6.524	3.112E+03	4.771E+06	-2.33E+09	-11.92	-3.36
23	2.333	1.942E5	-3.753E+05	-1.17E+08	22.75	37.39
24	10000	10000	10000	10000	0	0
25	3.531	1.333E+03	-1.66E+06	3.77E+10	0	0
26	10000	10000	10000	10000	0	0
27	7.007	-2.14E+04	3.001E+06	-1E+09	21.5	20.72
28	5.133	1.111	-4.37E+06	E+11	3.99	12.42
29	7.44	-1.11E+01	2.42E+06	-1.77E+09	0	0
30	3.134	1.017e9	-1.66E+05	1.371E+09	13.47	14.77
31	10000	10000	10000	10000	0	0
32	6.713	-1.77E+07	4.17E+06	-2.574E+09	0	0
33	5.67	1.1e	-1.13E+05	1.17E+07	-70.95	-71.74
34	4.97700001	1.01713	-1.49191E+05	-2E+9	34.1	35.91
35	10000	10000	10000	10000	-34.47	-33.52
36	10000	10000	10000	10000	0	0
37	10000	10000	10000	10000	-135.1	-146.3
38	5.19700001	1.045e5	-3.76E+05	1.001E+01	-100	-136.3
39	7.547	1.0457	-1.362E+05	1.007E+01	-113	-132.7
40	6.709	1.033	-3.231E+05	1.211E+03	-32.3	-49.42
41	3.789	1.0390	-1.330E+05	1.01E+01	-100	-136.34
42	6.725	1.0493	-1.421E+05	2.123E+03	-34	-13.92
43	3.339	1.0433	-3.662E+05	1.071E+03	-32.3	-312.34
44	7.373	-3.07E+03	6.662E+06	-3.011E+09	-36.42	-32.31
45	3.329	1.01907	-1.673E+05	5.36E+01	-31.06	-17.17
46	1.723	1.01754	-1.333E+05	4.077E+01	-14.05	-14.26
47	6.555	1.0197	-1.331E+05	3.034E+01	37.91	15.99
48	4.132	1.036e5	-2.774E+05	7.133E+09	-119.9	-112.47
49	5.652	1.03777	-2.866E+05	7.778E+09	-71.4	-94.1
50	5.733	1.04522	-4.377E+05	1.37E+08	-24.2	-16.33



NC	FORMULA	Tc	Pc	Zc	m	NOMBRE
51	HON	456,9	53,2	,197	,407	ACIDO CIANHIDRICO
52	CH2C6H2	368	71	-1	-1	DIBROMOMETANO
53	CH2CCL2	510	ov	,277	,193	DICLOROMETANO
54	CH2O	468	65	-1	,153	FORMALDEHIDO
55	CH2OO	560	10000	-1	-1	ACIDO FORMICO
56	CH2OR	164	65	-1	,273	BROMURO DE METILO
57	CH2OL	415,9	65,9	,263	,156	CLORURO DE METILO
58	CH2OF	417,9	58	,275	,19	FLUORURO DE METILO
59	CH2O2	368	65	,265	,172	ACIDO DE METILO
60	CH2NO2	368	62,0	,224	,346	NITROMETANO
61	CH4	470,9	45,4	,266	3E-10	METANO
62	CH4S	512,6	79,9	,224	,359	METANOL
63	CH4S	47,6	71,4	,266	,153	METIL MERCAPTANO
64	CH5N	436	73,6	,275	,275	METIL AMINA
65	CH6N2	567	79,0	,462	-1	METIL HIDRAZINA
66	CH2C6H5	368,8	31,2	,271	,233	DICLOROPENTACLORETANO
67	CH2CCL2F4	416,9	32,6	,279	-1	1,1-DICLORO-1,1,2,2-TETRA...
68	CH2CCL2F4	416,9	32,2	,275	,235	1,2-DICLORO-1,1,2,2-TETRA...
69	CH2CCL2F6	467,1	30,7	,256	,232	1,2-D-TRICLORO-1,1,2,2-TETRA...
70	CH2CCL4	629	44	,25	-1	TETRACLOROMETILENO
71	CH2CCL4F2	591	10000	-1	-1	1,1,2,2-TETRACLORO-1,1...
72	CH2F4	366,4	26,9	,271	,226	PERFLUOROMETANO
73	CH2F6	328,8	10000	-1	-1	PERFLUOROMETANO
74	CH2I2	436	69	-1	,24	DIYODURO
75	CH2OCL2	371	48,9	,263	,210	TRICLOROMETILENO
76	CH2F2O2	471,0	62,2	-1	-1	HO, TRIFLUOROMETILO
77	CH2S	368,9	66,6	,271	,134	ACETILENO
78	CH2F2	362,6	46	,273	-1	1,1-DIFLUOROMETILENO
79	CH2F2	362	64	,3	,207	ETERO
80	CH2OOL	429,7	63,3	,265	,122	CLORURO DE METILO
81	CH2OOL	417,2	46,7	,279	-1	1-CLORO-1,1-DIFLUOROMETANO
82	CH2OOL	310	38	,28	,344	CLORURO DE ACETILO
83	CH2OOL	368	42	,24	,22	1,1-DICLOROMETANO
84	CH2OF	277,3	51,7	,277	-1	FLUORURO DE METILO
85	CH2OFO	318,2	37,1	,269	,237	1,1,1-TRIFLUOROMETANO
86	CH2ON	348	47,7	,184	,121	ACETONTRILO
87	CH2ONO	491	35	-1	,278	METIL ISOCIANATO
88	CH4	212,4	49,7	,276	,365	ETILENO
89	CH2OCL2	368	50	,25	,219	1,1-DICLOROMETANO
90	CH2OCL2	361	33	,25	,236	1,2-DICLOROMETANO
91	CH2HF2	366,6	44,4	,253	,236	1,1-DIFLUOROMETANO
92	CH4O	161	35	,22	,363	ACETILENO
93	CH4O	467	71	,253	,2	ACIDO DE ETILENO
94	CH4O2	374,4	57,1	,2	,454	ACIDO ACETICO
95	CH4O2	437,2	59,2	,255	,252	METIL FORMATO
96	CH2OR	503,8	61,5	,32	,354	CLORURO DE ETILO
97	CH2OL	460,4	52	,274	,179	CLORURO DE ETILO
98	CH2OF	378,3	47,6	,272	,208	FLUORURO DE ETILO
99	CH2ON	10000	10000	-1	-1	ETILEN AMINA
100	CH6	305,4	46,2	,265	,398	ETANO

NC	CACP	CBCP	CCCP	CDCP	DF	DG
51	5.222	.01446	-1.163E-05	4.336E-09	31.2	26.71
52	10000	10000	10000	10000	-1	-1.34
53	3.094	.00877	-2.11E-05	1.065E-06	-22.6	-16.46
54	5.637	7.54E-03	7.13E-06	-5.494E-09	-17.7	-15.27
55	2.796	.00246	-2.009E-05	4.317E-09	-30.41	-21.37
56	3.446	.00666	-1.20E-05	2.339E-09	-1	-6.73
57	6.314	.02421	-1.263E-06	6.713E-10	-20.60	-11.16
58	3.362	.02053	-4.746E-06	-4.74E-10	-55.9	-50.11
59	2.531	.00119	-2.457E-05	3.125E-10	3.34	3.74
60	1.773	.04724	-2.563E-06	4.73E-09	-17.66	-11.66
61	4.593	.01245	2.86E-06	-2.170E-05	-17.89	-12.15
62	5.052	.01934	6.179E-06	-6.311E-09	-41.31	-15.14
63	3.161	.00479	-2.341E-05	4.95E-09	-5.45	-21.27
64	2.741	.01409	-1.274E-05	1.135E-09	-5.3	7.1
65	10000	10000	10000	10000	30.4	42.51
66	6.648	.0034	-6.704E-05	1.944E-08	10000	10000
67	9.662	.0733	-6.572E-05	1.631E-06	10000	10000
68	7.262	.08216	-7.647E-05	2.032E-06	-214.6	10000
69	14.003	.01663	-5.76E-05	1.649E-09	-173.1	10000
70	16.98	.00337	-3.473E-05	2.032E-08	-2.9	3.8
71	10000	10000	10000	10000	10000	10000
72	6.729	.05439	-4.063E-05	1.619E-08	-157.4	-119.07
73	6.405	.00259	-6.883E-05	1.943E-06	-321	-100.52
74	6.533	.0221	-1.946E-05	7.045E-09	73.24	71.93
75	7.267	.00422	-5.324E-05	1.956E-06	-11.4	4.75
76	10000	10000	10000	10000	10000	10000
77	6.466	.0131	-1.196E-05	3.670E-09	54.19	50
78	7.34	.00339	-3.014E-05	1.677E-08	-32.6	-76.24
79	1.525	.00913	-2.56E-05	6.445E-09	-14.6	-14.41
80	1.421	.04323	-3.667E-05	1.14E-06	3.4	12.31
81	4.017	.00315	-4.753E-05	1.267E-06	10000	10000
82	5.976	.04636	-2.354E-05	5.36E-09	-56.3	-49.29
83	1.51	.00194	-7.063E-05	2.339E-08	-30.1	-18.51
84	10000	10000	10000	10000	10000	10000
85	1.372	.07561	-6.263E-05	2.01E-06	-176.2	-162.63
86	4.392	.02537	-1.073E-05	7.63E-10	21	15.24
87	3.542	.02433	-1.39E-06	-4.03E-09	-21.5	10000
88	1.707	.0074	-1.994E-05	4.192E-09	12.5	16.26
89	2.979	.06439	-4.396E-05	1.503E-08	-31.05	-17.47
90	1.693	.03513	-3.435E-05	3.694E-09	-31	-17.68
91	2.072	.05722	-3.43E-05	3.107E-09	-113	-104.26
92	1.843	.04353	-2.404E-05	5.635E-09	-39.76	-31.16
93	-1.796	.05361	-3.601E-05	6.19E-08	-12.56	-3.13
94	1.156	.06637	-4.137E-05	1.132E-08	-103.93	-96.93
95	.342	.06449	-4.656E-05	1.362E-08	-63.6	-71.93
96	1.59	.05603	-3.517E-05	9.066E-09	-15.3	-6.29
97	-1.132	.06225	-4.394E-05	1.325E-08	-26.7	-14.34
98	1.033	.05207	-2.734E-05	5.7570001E-09	-62.5	-50.63
99	-4.961	.07219	-4.927E-05	1.349E-08	25.5	42.54
100	1.292	.04254	-1.657E-05	2.031E-09	-20.24	-7.37

NC	FORMULA	Tc	Pc	Zc	w	NOMBRE
101	C2H6	400	58	.267	.192	DIMETIL ETER
102	C2H6O	510.2	63	.248	.633	ETANOL
103	C2H6O2	645	70	.27	-1	ETILEN GLICOL
104	C2H6S	499	54.2	.274	.19	ETILEN MERCAPTANO
105	C2H6S	503	54.0	.260	.19	DIMETIL SULFURO
106	C2H7N	450	55.5	.264	.234	ETILEN AMINA
107	C2H7N	457.0	52.4	.272	.256	DIMETIL AMINA
108	C2H7NO	614	44	.17	-1	MONOMETANILAMINA
109	C2H8N2	593	02	.20	.51	ETILENDIAMINA
110	C3H6N	530	45	.21	.35	ACETILNITRIL
111	C3H8	393	54	.271	.313	PROPANO
112	C3H8	402.4	55.5	.270	.218	NETIL ACETILENO
113	C3H8O	500	51	-1	.33	ACOLETINA
114	C3H8O2	615	50	.23	.50	ACIDO ACRILICO
115	C3H8O2	475	57	.31	.55	FORMATO DE VINILO
116	C3H5CL	514	47	.20	.13	ALILCLORURO
117	C3H5CL3	651	39	.25	.31	1-2-3-TRICLOROPROPANO
118	C3H5N	504.4	41.3	.205	.318	PROPIONITRIL
119	C3H6	397.8	54.2	.262	.264	CICLOPROPANO
120	C3H6	305	45.0	.275	.146	PROPILENO
121	C3H6CL2	577	44	.21	.24	1-2-DICLOROPROPANO
122	C3H6O	508.1	40.4	.232	.309	ACETONA
123	C3H6O	545	50.4	.250	.63	ALCOHOL ALILICO
124	C3H6O	470	47	.20	.313	PROPIONOLONA
125	C3H6O	482.2	48.0	.228	.269	ACIDO DE PROPYLENO
126	C3H6O	430	47	.27	.34	VINIL METIL ETER
127	C3H6O2	612	53	.242	.530	ACIDO PROPIONICO
128	C3H6O2	508.4	40.8	.257	.283	FORMATO DE ETILO
129	C3H6O2	506.8	40.3	.254	.324	ACETATO DE METILO
130	C3H7CL	503	45.2	.278	.23	PROFIL CLORURO
131	C3H7CL	485	40.0	.269	.232	ISOPROFIL CLORURO
132	C3H8	309.8	41.9	.281	.152	PROPANO
133	C3H8O	530.7	51	.253	.024	1-PROPANOL
134	C3H8O	533.3	47	.248	-1	ALCOHOL ISOPROPTILICO
135	C3H8O	437.8	43.4	.267	.230	NETIL ETIL ETER
136	C3H8O2	477	10000	-1	-1	NETILAL
137	C3H5O2	025	00	.26	-1	1-1-PROPANODIOL
138	C3H5O2	058	59	.20	-1	1-1-PROPANODIOL
139	C3H5O3	720	00	.28	-1	GLICEROL
140	C3H8S	533	42	-1	-1	NETIL ETIL SULFURO
141	C3H9N	497	40.8	.267	.229	N-PROFIL AMINA
142	C3H9N	470	50	.29	.297	ISOPROFIL AMINA
143	C3H9N	433.2	40.2	.267	.195	TRIMETIL AMINA
144	C4H2O3	10000	10000	-1	-1	ANIDRIDO MALEICO
145	C4H4	455	49	.20	.092	VINIL ACETILENO
146	C4H8O	490.2	34.3	.294	.204	FURAN
147	C4H8S	579.4	36.2	.259	.2	TIOFENO
148	C4H8N	585	39	.22	.39	ALIL CIANIDA
149	C4H8N	040	10000	-1	-1	PIRROLE
150	C4H6	103.7	40.5	.27	.05	1-BUTENO

NC	CACP	CBCP	CCCP	CDCP	DF	DG
101	4.0e4	.04277	-1.27E-05	-4.51E-10	-43.75	-25.59
102	2.153	.05113	-2.104E-05	3.23E-10	-55.12	-40.22
103	3.52e	.05931	-3.57eE-05	7.19E-09	-30.05	-72.77
104	3.5e4	.05615	-3.21E-05	7.55200001E-09	-11.01	-1.12
105	5.365	.04475	-1.042E-05	3.75E-10	-3.57	1.00
106	.332	.0e372	-3.70E-05	9.09E-09	-11	3.91
107	-7.041	.0e-13	-3.17E-05	3.33E-05	-4.5	16.25
108	2.224	.07133	-4.24E-05	1.11E-03	-43.13	10000
109	3.147	.05749	-1.73E-05	-7.43E-09	10000	10000
110	2.354	.05273	-3.70E-05	1.03E-05	44.2	40.03
111	2.3e6	.04723	-2.31E-05	3.04E-09	45.92	45.37
112	3.313	.04453	-1.30E-05	7.71E-05	41.32	40.47
113	2.339	.05329	-1.33E-05	4.55200001E-09	-16.94	-15.57
114	4.1e	.07321	-3.31E-05	1.00E-05	-30.36	-35.37
115	5.643	.04392	-1.50E-05	-5.33E-03	10000	10000
116	.034	.07277	-3.44E-05	1.74E-03	-15	10.42
117	5.421	.03351	-3.35E-05	1.33E-03	-44.4	-23.37
118	3.379	.03333	-1.32E-05	4.0e-0E-09	12.1	22.93
119	-3.417	.05173	-3.33E-05	3.13E-03	12.74	3.95
120	.33e	.05302	-1.77E-05	3.23E-09	1.33	14.39
121	2.47e	.0372	-3.21E-05	1.34E-03	-39.3	-13.36
122	1.335	.03224	-2.71E-05	4.16E-09	-32	-16.33
123	-1.204	.07515	-1.33E-05	1.27E-03	-31.33	-17.33
124	2.3	.03244	-1.13E-05	3.07E-05	-45.7	-31.13
125	-2.1e	.07777	-4.73E-05	1.13E-03	-21.17	-30.16
126	3.733	.03592	-2.31E-05	3.33E-09	11.33	10000
127	1.034	.03311	-3.34E-05	2.33E-03	-103.73	-33.27
128	3.333	.03333	-3.33E-05	-1.13E-03	-33.73	10000
129	-1.739	.03333	-3.33E-05	1.13E-03	-31.1	-12.11
131	.44	.0333	-3.33E-05	1.4E-03	-35	-14.94
132	-1.009	.07315	-3.73E-05	7.37E-09	-24.32	-3.01
133	.33	.07342	-4.13E-05	1.32E-03	-31.33	-13.37
134	7.745	.04732	1.33E-05	-3.13E-05	-35.11	-41.44
135	4.439	.04424	-2.44E-05	3.13E-09	-31.79	33.12
136	10000	1.333	1.333	1.333	10000	10000
137	1.331	.0333	-7.13E-05	3.13E-03	-131.33	10000
138	1.975	.05779	-3.13E-05	1.33E-03	-37.71	10000
139	3.012	.0333	-7.54E-05	3.24E-03	-133.3	10000
140	4.031	.03334	-2.33E-05	3.77E-09	-14.25	2.73
141	1.542	.03333	-4.25E-05	3.53E-09	-17.3	3.51
142	-1.733	.03793	-3.74E-05	1.13E-03	-30.32	10000
143	-1.1e	.03433	-3.23E-05	1.13E-03	-3.7	33.04
144	-3.123	.03333	-3.21E-05	1.13E-03	10000	10000
145	1.314	.03733	-3.42E-05	1.73E-03	72.3	73.13
146	-3.436	.0332	-3.23E-05	1.33E-03	-3.29	.21
147	-7.31	.037	-9.03E-05	2.13E-03	37.00	30.3
148	3.133	.03342	-2.33E-05	2.13E-09	10000	10000
149	10000	10000	10000	10000	25.33	10000
150	2.977	.03333	-3.13E-05	3.24E-09	39.43	43.3

NC	FORMULA	Tc	Pc	Zc	w	NOMBRE
151	C4H6	436.0	30.2	.277	.124	2-BUTENO
152	C4H6	443.7	44.4	.267	.255	1-2-CUTAGIENO
153	C4H6	425	42.7	.27	.195	1-3-BUTADIENO
154	C4H6O2	525	43	.26	.34	VINIL ACETATO
155	C4H6O3	539	46.2	.267	-1	AMMIRIDIO ACETICO
156	C4H6O4	528	39.3	-1	-1	3-METIL OXALATO
157	C4H6O4	10000	10000	-1	-1	ACIDO SUCCINICO
158	C4H7N	582.2	37.4	.223	.371	BUTANTRILLO
159	C4H7O2	536	42	.25	.35	METIL ACRILATO
160	C4H8	417.0	39.7	.277	.187	1-BUTENO
161	C4H8	435.0	41.5	.272	.202	CIS-2-BUTENO
162	C4H8	426.0	40.5	.274	.214	TRANS-2-BUTENO
163	C4H8	459.9	49.2	.274	.209	CICLOBUTANO
164	C4H8	417.9	39.5	.275	.19	ISOBUTILENO
165	C4H8O	524	46	.26	.252	N-BUTIRALDEHIDO
166	C4H8O	513	41	.27	.35	ISOBUTIRALDEHIDO
167	C4H8O	535.0	41	.249	.329	METIL ETIL CETANO
168	C4H8O	540.2	51.2	.259	-1	TETRAHIDROPIRANO
169	C4H8O	475	43.2	.27	-1	VINIL ETIL ETER
170	C4H8O2	628	52	.295	.67	ACIDO N-BUTIRICO
171	C4H8O2	567	51.4	.254	.283	1-4-BISANO
172	C4H8O2	520.2	37.3	.272	.263	ETIL ACETATO
173	C4H8O2	609	46	.25	.61	ACIDO ISOBUTIRICO
174	C4H8O2	536.0	39.5	.256	.352	METIL PROPIONATO
175	C4H8O2	538	40.1	.259	.315	N-PROFIL FORMATO
176	C4H9OL	542	36.4	.255	.213	1-CLOROBUTANO
177	C4H9OL	526.0	39	.26	.3	2-CLOROBUTANO
178	C4H9OL	507	39	.26	.19	TER-BUTIL CLORURO
179	C4H9N	563.0	55.4	.296	-1	PIRROLIDINA
180	C4H9NO	618	54	.27	.37	PIRROLINA
181	C4H9O	425.2	37.5	.274	.193	N-BUTANO
182	C4H9O	408.1	36	.263	.176	ISOBUTANO
183	C4H9O	522.9	43.0	.258	.59	N-BUTANOL
184	C4H9O	536	41.4	.252	.576	2-BUTANOL
185	C4H9O	547.7	42.4	.257	.588	ISOBUTANOL
186	C4H9O	506.2	39.2	.259	.618	TERT-BUTANOL
187	C4H9O	466.7	35.9	.262	.261	ETIL ETER
188	C4H10O2	566	38.2	.235	.371	1-2-DIMETOXETANO
189	C4H10O3	631	46	.26	-1	DIETILEN GLICOL
190	C4H10S	357	35.1	.272	.3	DIETIL SULFURO
191	C4H10S2	642	10000	-1	-1	DIETIL DISULFURO
192	C4H11N	524	41	.27	.396	N-ETIL ANINA
193	C4H11N	516	42	.28	-1	ISOBUTIL ANINA
194	C4H11N	496.0	36.0	.27	.299	DIETIL ANINA
195	C5H5N	529	36.0	.277	.24	PIRIDINA
196	C5H6	506	10000	-1	-1	CICLOPENTANO
197	C5H6	506	49.2	.269	.173	1-2-PENTADIENO
198	C5H6	196	39.4	.266	.175	1-TRANS-3-PENTADIENO
199	C5H6	478	37.4	.263	.164	1-4-PENTADIENO
200	C5H6	493.4	46	.275	.164	1-PENTENO

NC	CACP	CBCP	CCCP	CDCP	DF	DG
151	3.604	.07535	-2.557E-05	4.168E-05	34.47	44.35
152	2.675	.06305	-3.597E-05	7.073E-05	24.77	34.42
153	-1.406	.06165	-5.559E-05	1.301E-05	36.31	24.92
154	3.621	.06676	-2.163E-05	-3.763E-05	-73.5	10.00
155	-5.924	.1215	-8.551E-05	2.349E-05	-137.6	-11.71
156	10.000	10.000	10.000	10.000	10.000	10.000
157	3.6	.0112	-7.502E-05	1.672E-05	11.77	10.00
158	3.633	.07657	-3.912E-05	7.122E-05	3.19	25.77
159	3.622	.06675	-2.193E-05	-3.766E-05	10.00	10.000
160	-1.715	.03456	-4.754E-05	1.066E-05	-1.33	17.14
161	1.105	.07054	-2.431E-05	-1.478E-05	-1.61	15.75
162	4.373	.06123	-1.675E-05	-1.147E-05	22.67	11.33
163	-12.000	.12	-3.492E-05	2.851E-05	6.27	33.97
164	3.334	.06693	-2.607E-05	2.177E-05	-1.24	11.38
165	3.111	.06257	-4.112E-05	6.332E-05	-2	11.46
166	1.843	.03015	-4.912E-05	1.912E-05	-21.36	12
167	2.614	.06301	-4.302E-05	7.022E-05	136.77	14.41
168	-4.563	.1233	-4.362E-05	3.932E-05	-24.02	11.66
169	4.127	.07729	-3.514E-05	3.113E-05	10.13	10.000
170	2.604	.07351	-3.374E-05	1.321E-05	-111.73	10.00
171	-12.776	.143	-7.702E-05	2.072E-05	-73.5	11.21
172	1.722	.07725	-4.932E-05	6.332E-05	-133.33	-11.33
173	2.344	.1115	-3.364E-05E-05	3.362E-05	-112.21	11.71
174	4.346	.07433	-2.234E-05	-4.133E-05	100.0	11.11
175	10.000	10.000	10.000	10.000	10.000	10.000
176	-1.624	.1074	-7.114E-05	1.732E-05	-25.2	11.37
177	-1.36	.1061	-7.112E-05	1.732E-05	-23.6	11.71
178	-1.939	.1111	-6.332E-05	1.332E-05	-28.3	-11.31
179	-12.000	.1270	-7.732E-05	1.732E-05	11.1	11.11
180	-10.228	.1427	-6.662E-05	1.662E-05	100.0	10.00
181	2.266	.07113	-2.647E-05	-6.74E-05	-36.15	11.1
182	-1.332	.0733	-4.402E-05	1.402E-05	-32.13	-4.25
183	.75	.07764	-3.354E-05	1.112E-05	-25.13	-16.34
184	1.374	.1014	-5.561E-05	1.14E-05	-27.74	-11.36
185	-1.841	.1112	-6.362E-05	1.722E-05	-27.57	-11.37
186	-11.011	.1713	-1.652E-04	6.972E-05	-74.67	-11.41
187	5.117	.06922	-2.472E-05	-2.26E-05	-36.23	-11.21
188	7.699	.0352	-3.112E-05	2.662E-05	10.00	10.00
189	17.45	.03336	-3.362E-05	4.41E-05	-106.3	10.00
190	3.247	.09457	-4.251E-05	1.127E-05	-19.95	4.23
191	6.424	.1099	-6.472E-05	1.426E-05	-17.34	5.12
192	1.213	.1039	-5.749E-05	1.213E-05	-22	11.76
193	2.267	.1056	-5.335E-05	3.5710000E-05	10.000	10.00
194	1.137	.1056	-5.214E-05	3.725E-05	-17.3	17.23
195	9.504	.1177	-5.492E-05	2.399E-05	33.5	45.46
196	-9.915	.1136	-6.16E-05	1.294E-05	7.37	26.48
197	2.168	.09267	-5.446E-05	1.253E-05	34.3	50.26
198	7.33	.06714	-1.003E-05	-5.617E-06	13.3	35.07
199	1.671	.09436	-5.67E-05	1.337E-05	25.2	46.69
200	4.315	.06336	-4.57E-05	7.737E-05	34.5	56.25

NC	FORMULA	Tc	Pc	Zc	m	NOMBRE
201	C5H6	484	38	.264	.164	2-METIL-1-3-BUTADIENO
202	C5H8	496	40,0	.266	.16	3-METIL-1-3-BUTADIENO
203	C5H10	508	50	.268	.35	CICLOPENTANO
204	C5H8O2	352	37	.261	.4	ETIL ACRILATO
205	C5H10	511,0	44,5	.270	.192	CICLOPENTANO
206	C5H10	464,7	40	.31	.245	1-PENTENO
207	C5H10	476	36	.26	.24	CIS-2-PENTENO
208	C5H10	478	36,1	.26	.237	TRANS-2-PENTENO
209	C5H10	465	34	.262	.232	2-METIL-1-3-PUTENO
210	C5H10	476	34	.26	.235	2-METIL-2-BUTENO
211	C5H10	480	34,7	.282	.209	3-METIL-1-BUTENO
212	C5H10O	554	35	.26	.4	VALERALDEHIDO
213	C5H10O	564	38,4	.25	.348	METIL N-PROPIL CETONA
214	C5H10O	701,4	38	.259	.349	METIL ISOPROPIL CETONA
215	C5H10O	561	36,9	.267	.347	DIETIL CETONA
216	C5H10O2	651	38	.24	.616	ACIDO N-VALERICO
217	C5H10O2	551	38,3	.276	.39	ISOBUTIL FORMATO
218	C5H10O2	549,4	32,9	.252	.392	N-PROPIL ACRILATO
219	C5H10O2	545	33,2	.256	.396	ETIL ACRILATO
220	C5H10O2	554,4	34,3	.257	.382	METIL ACRILATO
221	C5H10O2	540,6	33,9	.259	.367	METIL ISOBUTIRATO
222	C5H10N	541	47	.26	.25	PYRROLINA
223	C5H12	464,0	33,3	.267	.251	N-PENTANO
224	C5H12	466,4	33,4	.271	.227	2-METIL BUTANO
225	C5H12	468,6	31,6	.267	.197	2-2-DIMETIL PROPANO
226	C5H12O	536	36	.26	.58	1-PENTANOL
227	C5H12O	571	36	.26	.7	2-METIL-1-BUTANOL
228	C5H12O	579,5	36	.26	.58	3-METIL-1-BUTANOL
229	C5H12O	545	36	.26	.5	2-METIL-2-BUTANOL
230	C5H12O	545	39	.26	-1	2-2-DIMETIL-1-PROPANOL
231	C5H12O	505,5	32,1	-1	.331	ETIL PROPIL ETER
232	C6F6	516,7	32,6	-1	.4	PERFLUOROBENCENO
233	C6F12	457,2	24	-1	-1	PERFLUOROCICLOHEXANO
234	C6F14	451,7	18,6	.224	.73	PERFLUORO N-HEXANO
235	C6H4CL2	677,5	40,5	.255	.272	6-TOLUENO
236	C6H4CL2	654	38	.24	.26	N-TOLUENO
237	C6H4CL2	665	39	.26	.27	P-TOLUENO
238	C6H5Br	679	44,6	.263	.249	BROMOBENCENO
239	C6H5Cl	632,4	44,6	.265	.245	CLOROBENCENO
240	C6H5F	566,1	44,9	.265	.245	FLUOROBENCENO
241	C6H5I	721	44,6	.265	.246	IODOBENCENO
242	C6H6	562,1	46,3	.271	.212	BENCENO
243	C6H6S	614,2	60,5	.24	.44	FENOL
244	C6H7N	699	52,4	.247	.382	ANILINA
245	C6H7N	646	44	.26	.27	4-ETIL PIRIDINA
246	C6H10	557	34	.26	.16	1-HEXADIENO
247	C6H10	569,4	42,9	.27	.21	CICLOHEXANO
248	C6H10O	629	36	.23	.443	CICLOHEXANONA
249	C6H12	586,4	46,2	.273	.213	CICLOHEXANO
250	C6H12	532,7	37,4	.273	.239	METILCICLOPENTANO

NC	CACP	CBCP	CCCP	CDCP	DF	DG
201	-3.315	.1095	-7.571E-05	2.364E-06	16.1	34.56
202	3.536	.16593	-4.717E-05	1.613E-06	31	47.47
203	-1.707	.1246	-7.462E-05	1.793E-06	-166.04	169.06
204	4.015	.16113	-3.33E-05	-1.367E-07	10000	10000
205	-12.903	.11296	-7.337E-05	1.544E-06	-164.46	164.46
206	-1.002	.11034	-5.534E-05	1.110E-06	-5	16.91
207	-3.414	.16774	-3.066E-05	1.603E-06	-6.71	17.17
208	.435	.16736	-3.161E-05	1.652E-06	-7.33	16.71
209	2.325	.16547	-4.344E-05	7.413E-07E-07	-3.66	16.66
210	2.317	.16381	-2.367E-05	-1.367E-04	-164.17	14.26
211	3.171	.1627	-4.734E-05	3.57000001E-09	-6.92	17.37
212	3.431	.1604	-3.033E-05	7.353E-06	-14.4E	-10.36
213	.274	.1147	-6.731E-05	1.371E-06	-64.32	-71.16
214	-1.696	.1141	-7.007E-05	1.573E-06	10000	10000
215	7.166	.16404	-4.354E-05	3.11500001E-04	-61.32	-32.36
216	3.176	.1202	-7.001E-05	1.501E-06	-117.12	-33.37
217	4.741	.16364	-6.431E-05	-1.766E-06	10000	10000
218	3.633	.1675	-4.327E-05	-1.447E-06	-111.31	16.36
219	4.742	.16626	-7.443E-05	-1.766E-06	-111.1	-71.11
220	10000	10000	10000	10000	10000	10000
221	10000	10000	10000	10000	10000	10000
222	-11.675	.1302	-6.132E-05	1.533E-06	-11.71	10.00
223	-1.676	.1114	-6.136E-05	1.533E-06	-35	-2
224	-2.275	.1121	-6.514E-05	1.367E-06	-36.92	-11.34
225	-3.763	.1126	-7.337E-05	1.322E-06	-34.37	-6.34
226	.734	.1125	-6.334E-05	1.322E-06	-71.4	-71.4
227	-3.263	.1126	-6.117E-05	1.063E-06	-73.5	-11.56
228	-2.275	.1137	-6.132E-05	1.066E-06	-72.2	10000
229	-2.337	.1145	-7.334E-04	1.394E-06	-76.3	-11.3
230	2.330	.1109	-7.347E-05	1.711E-06	-76	-9.36
231	10000	10000	10000	10000	10000	10000
232	3.666	.1138	-7.136E-04	3.477E-01	-223.64	-11.11
233	10000	10000	10000	10000	10000	10000
234	10000	10.00	10000	10000	10000	10000
235	-3.416	.1125	-1.073E-04	3.314E-06	7.16	11.76
236	-3.246	.1111	-1.073E-04	3.430E-06	6.32	13.73
237	-3.135	.1122	-1.039E-04	3.456E-06	5.5	15.44
238	-3.03	.1123	-9.746E-05	2.374E-06	23.1	33.11
239	-3.014	.1143	-1.002E-04	3.4407E-06	12.07	20.7
240	-7.21	.1134	-1.039E-04	3.237E-06	-27.36	-16.5
241	-6.792	.1124	-1.077E-04	3.447E-06	38.35	44.23
242	-3.131	.1113	-7.236E-05	1.743E-06	19.32	30.33
243	-3.551	.1142	-1.153E-04	3.647E-06	-23.03	-7.56
244	-7.677	.1123	-1.266E-04	3.701E-06	20.76	31.34
245	-4.163	.1136	-6.633E-05	1.302E-06	24.43	10000
246	10000	10000	10000	10000	20	10000
247	-16.397	.1132	-1.210E-04	3.927E-06	-11.26	23.54
248	-9.03	.1123	-4.663E-05	-3.664E-07	-55	-21.67
249	-13.627	.116	-6.027E-05	3.156E-09	-21.43	7.59
250	-11.763	.1124	-3.693E-05	1.914E-06	-25.5	8.55



NC	FORMULA	Tc	Pc	Zc	m	NOMBRE
191	C6H12	514	31.3	.26	.283	1-HEXENO
192	C6H12	513	32.4	.27	.286	CIS-2-HEXENO
193	C6H12	516	32.3	.27	.284	TRANS-2-HEXENO
194	C6H12	517	32.4	.27	.285	CIS-3-HEXENO
195	C6H12	519.9	32.1	.26	.287	TRANS-3-HEXENO
196	C6H12	518	32.1	.27	.289	2-METIL-2-PENTENO
197	C6H12	513	32.4	.27	.269	3-METIL-CIS-3-PENTENO
198	C6H12	521	32.5	.27	.297	3-METIL-TRANS-3-PENTENO
199	C6H12	470	30	.27	.29	4-METIL-CIS-3-PENTENO
200	C6H12	473	30	.27	.29	4-METIL-TRANS-3-PENTENO
201	C6H12	501	32	.26	.281	2-3-DIMETIL-1-BUTENO
202	C6H12	524	32.2	.27	.289	2-3-DIMETIL-2-BUTENO
203	C6H12	490	32.1	.27	.121	3-3-DIMETIL-1-BUTENO
204	C6H12O	525	37	.24	.35	CICLOHEXANO
205	C6H12O	571	32.3	.26	.4	METIL ISOBUTIL OXETO
206	C6H12O2	579	31	.26	.417	N-BUTIL ACETATO
207	C6H12O2	561	30	.27	.475	ISOBUTIL ACETATO
208	C6H12O2	560	31	.26	.47	ETIL BUTIRATO
209	C6H12O2	553	30	.27	.427	ETIL ISOBUTIRATO
210	C6H12O2	573	10000	-1	-1	N-PROPILO PROPIONATO
211	C6H14	507.4	31.3	.26	.276	N-HEXANO
212	C6H14	497.3	29.7	.267	.274	2-METIL PENTANO
213	C6H14	504.4	30.3	.273	.275	3-METIL PENTANO
214	C6H14	435.7	30.4	.272	.281	1-2-DIMETIL BUTANO
215	C6H14	495.9	30.9	.27	.287	1-3-DIMETIL BUTANO
216	C6H14O	510	30	.26	.36	1-HEXANOL
217	C6H14O	531	30	.27	.4	ETIL BUTIL ETER
218	C6H14O	560	33.4	.267	.34	31-16-PROPIL ETER
219	C6H15N	550	31	.26	.453	3-PROPILAMINA
220	C6H15N	535	30	.27	.329	TRIMETILAMINA
221	C7H14	436.3	30	-1	.462	PERFLUOROMETILCICLOHEXANO
222	C7H16	474.8	16	.273	.36	PERFLUORO-N-HEPTANO
223	C7H16N	554.4	41.6	-1	.36	BENZONITRIL
224	C7H16O	475	46	-1	.32	BENZILALDEHIDO
225	C7H16O2	752	45	.25	.62	ACIDO BENZOICO
226	C7H16	511.7	40.6	.264	.287	TOLUENO
227	C7H16O	471	41.2	-1	-1	METIL FENIL ETER
228	C7H16O	467	46	.26	.71	ACIDULO BENZILICO
229	C7H16O	477.6	41.4	.24	.443	3-CRESOL
230	C7H16O	705.3	45	.241	.494	N-CRESOL
231	C7H16O	704.6	50.3	-1	.515	P-CRESOL
232	C7H17N	553.4	10000	-1	-1	2-3-DIMETILPIRIDINA
233	C7H17N	541.2	10000	-1	-1	2-5-DIMETILPIRIDINA
234	C7H17N	533.3	10000	-1	-1	3-4-DIMETILPIRIDINA
235	C7H17N	567.2	10000	-1	-1	3-5-DIMETILPIRIDINA
236	C7H17N	701	51.93	-1	-1	METILPIPERIDINA
237	C7H17N	494	37	.26	.403	O-TOLUIDINA
238	C7H17N	702	41	.24	.466	N-TOLUIDINA
239	C7H17N	667	10000	-1	-1	P-TOLUIDINA
240	C7H14	539	36.7	.3	.336	CICLOHEPTANO

NC	CACP	CBCP	CCCP	CDCP	DF	DG
251	-4.417	.1156	-5.413E-05	1.446E-08	-7.76	20.8
252	-2.343	.1216	-5.44E-05	1.456E-08	-12.51	18.22
253	-7.324	.1255	-1.042E-04	4.73E-08	-12.88	16.27
254	-5.19	.1268	-3.024E-05	1.731E-08	-11.38	19.54
255	-1.066	.1316	-7.84E-05	1.732E-08	-13.91	15.55
256	-3.823	.1354	-7.979E-05	1.492E-08	-14.23	17.02
257	-3.521	.1374	-7.971E-05	1.492E-08	-13.8	17.5
258	-3.521	.1394	-7.971E-05	1.492E-08	-14.02	17.04
259	-4	.1394	-7.971E-05	1.492E-08	-12.01	19.63
260	2.016	.1331	-7.112E-05	1.77E-08	-12.99	19.93
261	1.678	.1334	-5.322E-05	2.539E-08	-13.32	18.39
262	.843	.1158	-5.252E-05	7.236E-09	-14.15	15.13
263	-3.499	.131	-5.763E-05	1.244E-08	-16.31	23.46
264	-13.124	.1723	-9.78E-05	1.967E-08	-70.4	-23.13
265	.93	.1331	-7.112E-05	1.76E-08	-97.24	10000
266	3.253	.1311	-5.442E-05	1.631E-08	-113.26	10000
267	1.736	.1371	-5.152E-05	2.63E-09	-113.34	10000
268	3.137	.1177	-4.624E-05	3.4E-10	10000	10000
269	10000	10000	10000	10000	10000	10000
270	10000	10000	10000	10000	10000	10000
271	-1.024	.139	-7.447E-05	1.051E-08	-19.06	-7.06
272	-2.521	.1377	-5.536E-05	1.931E-08	-41.06	-1.2
273	-4.57	.1137	-5.354E-05	1.211E-08	-41.02	-3.1
274	-3.973	.1503	-5.014E-05	1.636E-08	-44.33	-2.0
275	-1.439	.1437	-5.553E-05	1.367E-08	-42.47	-4.5
276	1.149	.1497	-7.133E-05	1.226E-08	-73.4	-32.4
277	5.633	.1232	-5.035E-05	3.912E-09	10000	10000
278	1.732	.1377	-7.122E-05	1.431E-08	-76.1	-29.13
279	1.543	.1313	-5.093E-05	1.624E-08	10000	10000
280	-1.402	.1707	-1.134E-04	2.409E-08	-83.8	24.06
281	10000	10000	10000	10000	-93.21	10000
282	10000	10000	10000	10000	-93.21	-127.07
283	-5.221	.1369	-1.051E-04	3.222E-08	34.3	32.03
284	-2.9	.1165	-5.734E-05	1.214E-08	-3.15	5.35
285	-12.251	.1573	-1.012E-04	2.571E-08	-59.56	-19.24
286	-5.317	.1224	-5.013E-05	1.473E-08	-11.95	29.16
287	10000	10000	10000	10000	10000	10000
288	-1.767	.1309	-5.911E-05	1.333E-08	-22.47	10.00
289	-7.769	.1373	-1.442E-04	5.472E-08	-30.74	-5.56
290	-10.95	.1735	-1.44E-04	4.46E-08	-31.53	-7.37
291	-3.723	.1233	-1.037E-04	4.541E-08	-21.97	-7.33
292	10000	10000	10000	10000	16.31	10000
293	10000	10000	10000	10000	16.37	10000
294	10000	10000	10000	10000	16.73	10000
295	10000	10000	10000	10000	17.35	10000
296	10000	10000	10000	10000	23.4	47.61
297	10000	10000	10000	10000	10000	10000
298	-3.819	.1337	-7.244E-05	1.113E-08	10000	10000
299	10000	10000	10000	10000	10000	10000
300	-15.197	.1379	-1.004E-04	1.353E-08	-23.52	15.06

NC	FORMULA	Tc	Pc	Zc	m	NOMBRE
301	C7H14	547	34	.27	.273	1-1-DIMETILCICLOPENTANO
302	C7H14	564.8	34	.27	.269	CIS-1-2-DIMETILCICLOPENTANO
303	C7H14	553.2	34	.27	.269	TRANS-1-2-DIMETILCICLOPENTANO
304	C7H14	569.5	35.5	.269	.283	ETILCICLOPENTANO
305	C7H14	572.1	34.3	.269	.283	METILCICLOHEXANO
306	C7H14	537.2	28	.28	.358	1-HEPTANO
307	C7H14	533	26.0	.26	.192	2-3-3-TRIMETIL-1-BUTANO
308	C7H16	540.2	27	.263	.351	N-HEPTANO
309	C7H16	530.3	27	.261	.35	2-METILHEXANO
310	C7H16	535.2	27.6	.256	.324	3-METILHEXANO
311	C7H16	526.4	27.4	.267	.269	2-2-DIMETILPENTANO
312	C7H16	537.3	26.7	.250	.299	2-3-DIMETILPENTANO
313	C7H16	519.7	27	.265	.306	2-4-DIMETILPENTANO
314	C7H16	536.3	29.1	.274	.27	3-3-DIMETILPENTANO
315	C7H16	546.6	26.5	.267	.31	3-ETILPENTANO
316	C7H16	531.1	29.2	.267	.251	2-2-3-TRIMETILBUTANO
317	C7H16O	633	30	.25	.56	1-HEPTANOL
318	C8H10	810	47	.26	-1	ANILINDO FTALICO
319	C6H6	647	39.4	-1	.257	ESTIRENO
320	C8H10	701	38	.25	.42	METIL FENIL CETONA
321	C6H6O2	692	36	.25	.43	METIL BENZOATO
322	C8H10	630.2	36.8	.263	.314	O-AILENO
323	C8H10	617	35	.26	.331	H-AILENO
324	C8H10	616.2	34.7	.26	.324	F-AILENO
325	C8H10	617.1	35.6	.263	.301	ETILBENCENO
326	C8H10O	703	10000	-1	-1	O-ETILFENOL
327	C8H10O	716.4	10000	-1	-1	H-ETILFENOL
328	C8H10O	716.4	10000	-1	-1	F-ETILFENOL
329	C8H10O	647	33.6	-1	-1	FENETOL
330	C8H10O	722.6	10000	-1	-1	2-3-AILENOL
331	C8H10O	707.6	10000	-1	-1	2-4-AILENOL
332	C8H10O	723	10000	-1	-1	2-5-AILENOL
333	C8H10O	701	10000	-1	-1	2-6-AILENOL
334	C8H10O	729.8	10000	-1	-1	3-4-AILENOL
335	C8H10O	715.6	10000	-1	-1	3-5-AILENOL
336	C8H11N	637	35.8	-1	-1	N-N-DIMETILANILINA
337	C8H16	591	29.3	.25	.236	1-1-DIMETILCICLOHEXANO
338	C8H16	606	29.3	-1	.236	CIS-1-2-DIMETILCICLOHEXANO
339	C8H16	596	29.3	-1	.242	TRANS-1-2-DIMETILCICLOHEXANO
340	C8H16	591	29.3	-1	.224	CIS-1-3-DIMETILCICLOHEXANO
341	C8H16	586	29.3	-1	.189	TRANS-1-3-DIMETILCICLOHEXANO
342	C8H16	598	29.3	-1	.234	CIS-1-4-DIMETILCICLOHEXANO
343	C8H16	590	29.3	-1	.242	TRANS-1-4-DIMETILCICLOHEXANO
344	C8H16	609	29.9	.27	.243	ETILCICLOHEXANO
345	C8H16	579.5	29	-1	.252	1-1-2-TRIMETILCICLOPENTANO
346	C8H16	569.5	27.9	-1	.211	1-1-3-TRIMETILCICLOPENTANO
347	C8H16	579	26.7	-1	.277	CIS-CIS-TRANS-1-2-4-TRI...
348	C8H16	571	27.7	-1	.246	CIS-TRANS-CIS-1-2-4-TRI...
349	C8H16	592	29.5	-1	.25	1-METIL-1-ETILCICLOPENTANO
350	C8H16	603	29.0	.25	.335	N-PROPILCICLOPENTANO

NC	CACP	CBCP	CCCP	CDCP	DF	DG
301	-13.327	.1332	-1.075E-04	2.413E-03	-33.05	9.33
302	-13.329	.13319	-1.071E-04	2.422E-03	-33.76	10.93
303	-13.332	.13313	-1.07E-04	2.429E-03	-32.57	9.17
304	-13.331	.1333	-1.053E-04	2.373E-03	-33.37	10.65
305	-13.339	.13376	-1.045E-04	2.337E-03	-33.91	8.52
306	-7.739	.1354	-1.033E-03	1.817E-03	-14.39	22.9
307	10000	10000	10000	10000	-20.57	10000
308	-1.229	.1313	-8.73E-05	1.329E-03	-44.33	1.91
309	-7.433	.1264	-1.052E-04	4.533E-03	-46.59	.77
310	-1.633	.1333	-8.91E-03	1.371E-03	-45.96	1.1
311	-11.966	.1289	-1.51E-04	4.14E-03	-49.27	.62
312	-1.633	.1333	-8.719E-05	1.371E-03	-47.62	.16
313	-1.633	.1333	-8.919E-05	1.371E-03	-48.23	.74
314	-1.633	.1333	-8.919E-05	1.371E-03	-45.17	.63
315	-1.633	.1333	-8.919E-05	1.371E-03	-45.33	2.63
316	-5.43	.1376	-1.053E-04	2.4E-03	-48.95	1.92
317	1.172	.1319	-8.232E-03	1.444E-03	-79.3	-23.9
318	-1.364	.1362	-1.033E-04	2.411E-03	-36.3	10000
319	-5.749	.1471	-7.639E-05	2.373E-03	35.22	51.1
320	-7.335	.1331	-7.734E-05	1.332E-03	-20.76	.44
321	-3.366	.1314	-4.291E-05	1.357E-03	-6.463	10000
322	-3.736	.1324	-1.024E-05	1.353E-03	4.64	37.13
323	-3.766	.1303	-1.33E-05	2.322E-03	4.12	26.41
324	-3.132	.1443	-8.033E-05	1.629E-03	4.29	26.97
325	-13.294	.1329	-1.143E-04	2.139E-03	7.12	31.24
326	10000	10000	10000	10000	-34.32	10000
327	10000	10000	10000	10000	-35.91	10000
328	10000	10000	10000	10000	-34.33	10000
329	10000	10000	10000	10000	10000	10000
330	10000	10000	10000	10000	-37.33	10000
331	10000	10000	10000	10000	-36.33	10000
332	10000	10000	10000	10000	-35.33	10000
333	10000	10000	10000	10000	-36.33	10000
334	10000	10000	10000	10000	-37.33	10000
335	10000	10000	10000	10000	-36.37	10000
336	10000	10000	10000	10000	30.1	53.26
337	-17.222	.2149	-1.199E-04	1.431E-03	-43.26	5.42
338	-16.33	.2143	-1.227E-04	2.634E-03	-41.15	9.35
339	-16.336	.2179	-1.279E-04	2.321E-03	-43.02	8.24
340	-15.364	.2111	-1.173E-04	2.433E-03	-14.16	7.13
341	-15.323	.2103	-1.193E-04	2.532E-03	-42.3	6.66
342	-15.323	.2103	-1.193E-04	2.532E-03	-42.22	9.97
343	-15.336	.2131	-1.263E-04	2.733E-03	-44.12	7.55
344	-15.33	.2124	-1.22E-04	2.331E-03	-41.65	9.33
345	10000	10000	10000	10000	10000	10000
346	10000	10000	10000	10000	10000	10000
347	10000	10000	10000	10000	10000	10000
348	10000	10000	10000	10000	10000	10000
349	10000	10000	10000	10000	10000	10000
350	-13.369	.2013	-1.176E-04	2.669E-03	-35.39	12.57

NC	FORMULA	Tc	Pc	Zc	m	NOMBRE
351	C8H16	501	28,0	-1	,24	ISOPROPILCICLOPENTANO
352	C8H16	500,0	25,9	,20	,360	1-OCTENO
353	C8H16	500	27,0	-1	,35	TRANS-2-OCTENO
354	C8H16	503,8	24,5	,259	,374	N-OCTANO
355	C8H16	503,0	24,5	,20	,370	2-METILHEPTANO
356	C8H16	503,0	23,1	,252	,369	3-METILHEPTANO
357	C8H16	507,7	25,1	,259	,369	4-METILHEPTANO
358	C8H16	509,6	25	,254	,338	2-2-DIMETILHEXANO
359	C8H16	500,4	25,9	,202	,340	2-3-DIMETILHEXANO
360	C8H16	503,5	25,2	,202	,340	2-4-DIMETILHEXANO
361	C8H16	500	24,5	,202	,351	2-5-DIMETILHEXANO
362	C8H16	502	26,2	,253	,321	3-3-DIMETILHEXANO
363	C8H16	503,0	26,0	,205	,330	3-4-DIMETILHEXANO
364	C8H16	503,4	25,7	,252	,361	3-ETILHEXANO
365	C8H16	503,4	26,9	,257	,297	2-2-3-TRIMETILPENTANO
366	C8H16	543,9	25,3	,200	,303	2-2-4-TRIMETILPENTANO
367	C8H16	573,3	27,8	,209	,29	2-3-5-TRIMETILPENTANO
368	C8H16	500,3	26,9	,207	,317	2-3-4-TRIMETILPENTANO
369	C8H16	507	26,7	,254	,33	2-METIL-3-ETILPENTANO
370	C8H16	570,5	27,7	,207	,304	3-METIL-3-ETILPENTANO
371	C8H18O	600	34	,31	,33	1-OCTANOL
372	C8H18O	607	27	,20	,52	2-OCTANOL
373	C8H18O	613	27,2	,207	-1	2-ETILHEXANOL
374	C8H18O	600	35	,20	,5	OUTIL ETER
375	C8H18ON	600	26	,20	,59	DIBUTILAMINA
376	C8H18O	604	33,0	,25	-1	ALFA-METIL ESTIRENO
377	C8H18O2	607	32	,25	,48	ETIL BENZOATO
378	C8H12	638,3	31,0	,205	,344	N-PROPILBENCENO
379	C8H12	601	31,7	,20	,335	ISOPROPILBENCENO
380	C8H12	601	31	,20	,294	1-METIL-2-ETILBENCENO
381	C8H12	607	33	,20	,30	1-METIL-3-ETILBENCENO
382	C8H12	646	29	,20	,332	1-METIL-4-ETILBENCENO
383	C8H12	604,5	34,1	,27	,39	1-2-3-TRIMETILBENCENO
384	C8H12	609,1	31,9	,250	,39	1-2-4-TRIMETILBENCENO
385	C8H12	607,3	30,9	,20	,398	1-3-5-TRIMETILBENCENO
386	C8H18	609	27,7	-1	,256	N-PROPILOCICLOHEXANO
387	C8H18	640	28	-1	,237	ISOPROPILCICLOHEXANO
388	C8H18	602	33,1	,20	,43	1-NONENO
389	C8H20	604,0	22,3	,20	,444	N-DECANO
390	C8H20	608	24,0	-1	,332	2-2-3-TRIMETILHEXANO
391	C8H20	673,7	23,4	-1	,321	2-2-4-TRIMETILHEXANO
392	C8H20	608	23	,20	,357	2-2-5-TRIMETILHEXANO
393	C8H20	610	26,4	-1	,338	3-3-DIMETILPENTANO
394	C8H20	607,0	27	-1	,279	2-2-3-3-TETRAMETILPENTANO
395	C8H20	602,7	25,7	-1	,311	2-2-3-4-TETRAMETILPENTANO
396	C8H20	674,7	24,5	-1	,315	2-2-4-4-TETRAMETILPENTANO
397	C8H20	607,0	26,3	-1	,299	2-3-3-4-TETRAMETILPENTANO
398	C10H8	748,4	40	,207	,302	NAFTALENO
399	C10H12	719	34,7	-1	,330	1-2-3-4-TETRAHIDRONAF...
400	C10H14	600,5	23,5	,201	,392	N-BUTILBENCENO

NC	CACP	CBCP	CCCP	CDCP	DF	DG
351	10000	10000	10000	10000	10000	10000
352	-1.979	.1729	-9.641E-05	2.07E-08	-19.82	24.91
353	-0.062	.1799	-1.061E-04	2.50E-06	-22.59	23.15
354	-1.456	.1342	-1.002E-04	2.115E-05	-49.82	3.92
355	-21.435	.2967	-2.606E-04	1.103E-07	-51.5	3.05
356	-2.291	.1377	-1.051E-04	2.316E-08	-50.82	3.28
357	-2.201	.1377	-1.051E-04	2.316E-08	-50.69	4
358	-2.201	.1377	-1.051E-04	2.316E-08	-53.71	2.36
359	-2.201	.1377	-1.051E-04	2.316E-08	-51.18	4.23
360	-2.201	.1377	-1.051E-04	2.316E-08	-52.46	2.8
361	-2.201	.1377	-1.051E-04	2.316E-08	-53.21	2.5
362	-2.201	.1377	-1.051E-04	2.316E-08	-52.61	3.17
363	-2.201	.1377	-1.051E-04	2.316E-08	-50.91	4.14
364	-2.201	.1377	-1.051E-04	2.316E-08	-50.4	3.95
365	-2.201	.1377	-1.051E-04	2.316E-08	-52.61	4.06
366	-1.732	.1358	-1.024E-04	2.191E-08	-53.57	3.27
367	-2.201	.1377	-1.051E-04	2.316E-08	-51.78	4.52
368	-2.201	.1377	-1.051E-04	2.316E-08	-51.97	4.52
369	-2.201	.1377	-1.051E-04	2.316E-08	-50.48	5.08
370	-2.201	.1377	-1.051E-04	3.064E-08	-51.38	4.76
371	1.474	.1317	-9.069E-05	1.49E-06	-6	-26.7
372	0.131	.1328	-1.009E-04	2.165E-08	10000	10000
373	-3.581	.2067	-1.261E-04	3.062E-06	-57.31	10000
374	1.416	.1346	-9.753E-05	1.931E-06	-79.6	-21.10
375	2.332	.193	-1.049E-04	2.307E-06	10000	10000
376	-5.611	.1656	-1.082E-04	2.32E-08	10000	10000
377	4.937	.1645	-8.638E-05	1.209E-06	10000	10000
378	-7.473	.1738	-1.099E-04	2.561E-06	1.87	32.8
379	-9.467	.1373	-1.215E-04	3.064E-06	.94	32.74
380	-3.926	.1671	-9.341E-05	2.223E-08	.29	31.33
381	-6.926	.1742	-1.042E-04	2.363E-06	-4.6	30.22
382	-6.523	.1714	-1.009E-04	2.277E-08	-4.9	30.28
383	-1.658	.1510	-7.945E-05	1.579E-06	-2.29	29.77
384	-1.115	.149	-7.793E-05	1.523E-06	-3.33	27.95
385	-4.679	.1606	-8.819E-05	1.309E-06	-3.84	28.19
386	-14.932	.2362	-1.334E-04	3.084E-06	-46.2	11.31
387	10000	10000	10000	10000	10000	10000
388	-1.333	.194	-1.077E-04	2.313E-08	-24.74	26.93
389	.751	.1618	-4.606E-05	-7.121E-04	-54.74	5.93
390	-16.394	.2521	-1.713E-04	4.745E-06	-57.65	5.36
391	-14.465	.2353	-1.842E-04	5.225E-06	-58.15	5.38
392	-12.923	.2615	-1.35E-04	5.335E-08	-60.71	3.21
393	-16.067	.2607	-1.906E-04	5.508E-06	-55.44	8.38
394	-13.037	.2601	-1.303E-04	5.116E-08	-56.7	8.2
395	-13.057	.2601	-1.808E-04	5.116E-06	-56.64	7.8
396	-16.099	.279	-2.057E-04	6.147E-08	-57.83	8.13000001
397	-13.117	.2606	-1.816E-04	5.15400001E-08	-56.46	8.15
398	-16.433	.283	-1.554E-04	4.731E-06	36.08	33.44
399	10000	10000	10000	10000	0.0	39.9
400	-5.491	.1095	-1.05E-04	2.047E-06	-3.3	34.58

NC	FORMULA	Tc	Pc	Zc	m	NOMBRE
401	C10H14	650	31	.26	.376	ISOBUTILENECO
402	C10H14	664	29.1	-1	.274	SEC-BUTILENECO
403	C10H14	660	29.3	-1	.265	TERT-BUTILENECO
404	C10H14	670	26.0	-1	.277	1-METIL-2-ISOPROPILENECO
405	C10H14	666	29	-1	.279	1-METIL-3-ISOPROPILENECO
406	C10H14	653	27.9	-1	.371	1-METIL-4-ISOPROPILENECO
407	C10H14	657.9	27.7	.25	.403	1-4-DIETILENECO
408	C10H14	675	29	.25	.426	1-2-4-5-TETRAETILENECO
409	C10H18N	721	26	.25	-1	N-BUTILAMINA
410	C10H18	722.2	31	-1	.23	CIS-DECALIN
411	C10H18	690	31	-1	.27	TRANS-DECALIN
412	C10H18N	622	32.1	-1	-1	CAPROLAMTRILLO
413	C10H20	667	21.1	-1	.362	NOBUTILENECO
414	C10H20	659	30.8	-1	.319	1,3-DICICLOHEXANO
415	C10H20	661	26.4	-1	.264	SEC-BUTILCICLOHEXANO
416	C10H20	659	26.3	-1	.252	TERT-BUTILCICLOHEXANO
417	C10H20	615	21.6	.26	.491	1-DECENO
418	C10H22	617.6	20.8	.247	.49	N-DECANO
419	C10H22	607.6	20.9	-1	.383	3-3-5-TRIMETILHEPTANO
420	C10H22	623.1	24.8	-1	.36	2-2-3-3-TETRAMETILHEPTANO
421	C10H22	521.5	21.6	-1	.374	2-2-5-5-TETRAMETILHEPTANO
422	C10H22	700	22	.23	-1	1-DECANO
423	C11H16	772	35.2	.25	.334	1-METILINDALENO
424	C11H16	761	34.6	.26	.382	2-METILINDALENO
425	C11H14O2	723	36	.25	.58	ETIL BENZOATO
426	C11H22	660.1	31.1	-1	.476	N-METILCICLOPENTANO
427	C11H22	637	19.7	-1	.516	1-UNDICENO
428	C11H24	636.8	19.4	.24	.535	N-UNDECANO
429	C12H16	789	36	.255	.364	DIFENIL
430	C12H10O	766	31	-1	.44	DIFENIL ETER
431	C12H24	679	19.2	-1	.515	N-METILCICLOPENTANO
432	C12H24	657	18.3	-1	.358	1-DODECENO
433	C12H26	656.3	18	.24	.562	N-DODECANO
434	C12H26O	657	18	.24	.7	BIFENIL ETER
435	C12H26	679	19	.24	-1	DODECANOL
436	C12H27N	643	18	-1	-1	TRIBUTILAMINA
437	C12H22	767	29.4	-1	.471	DIFENILMETANO
438	C12H26	674	17.7	-1	.564	N-OUTILCICLOPENTANO
439	C12H26	674	16.8	-1	.596	1-TRIDECENO
440	C12H28	675.8	17	.24	.623	N-TRIDECANO
441	C14H10	863	10000	-1	-1	ANTRACENO
442	C14H10	878	10000	-1	-1	FENANTRENO
443	C14H22	710.5	16.3	-1	.61	N-NONILCICLOPENTANO
444	C14H28	639	15.4	-1	.644	1-TETRADECENO
445	C14H30	674	16	.23	.679	N-TETRADECANO
446	C15H30	723.8	15	-1	.654	N-DECILCICLOPENTANO
447	C15H30	704	14.4	-1	.682	1-PENTADECENO
448	C15H32	707	15	.23	.706	N-PENTADECANO
449	C16H22O4	10000	10000	-1	-1	DIETIL-0-FALATO
450	C16H32	750	13.4	-1	.583	N-SECILCICLOHEXANO

NC	CACP	CBCP	CCCP	CDGP	DF	DG
401	10000	10000	10000	10000	-5.15	10000
402	-15.56	.23e3	-1.723E-04	5.14E-08	-5.17	10000
403	-20.541	.26e2	-2.081E-04	6.751E-08	-5.41	10000
404	10000	10000	10000	10000	10000	10000
405	-11.046	.21e3	-1.446E-04	3.637E-08	-	10000
406	10000	10000	10000	10000	10000	10000
407	-6.367	.2071	-1.328E-04	3.37E-08	-5.31	21.35
408	3.946	.1557	-6.376E-05	7.7750001E-04	-1.141	25.33
409	-8.137	.2184	-1.333E-04	3.473E-08	10000	10000
410	-26.86	.2871	-1.573E-04	3.442E-08	-46.38	26.31
411	-21.322	.2495	-1.508E-04	2.148E-08	-43.57	17.51
412	10000	10000	10000	10000	10000	10000
413	-15.007	.2582	-1.506E-04	3.341E-08	-50.35	10.41
414	10000	10000	10000	10000	10000	10000
415	10000	10000	10000	10000	10000	10000
416	10000	10000	10000	10000	10000	10000
417	-1.114	.21e6	-1.203E-04	2.613E-08	-21.67	25.33
418	-1.39	.2275	-1.263E-04	2.701E-08	-59.67	7.94
419	-16.806	.2940	-2.063E-04	5.644E-08	-61.3	3.02
420	-14.052	.2911	-2.11E-04	6.174E-08	10000	10000
421	-14.39	.2970	-2.139E-04	6.253E-08	10000	10000
422	6.46	.2137	-9.365E-05	3.242E-08	-96	-14.41
423	-15.462	.2242	-1.656E-04	4.514E-08	27.93	56.36
424	-13.499	.2149	-1.545E-04	4.313E-08	27.75	51.36
425	-4.146	.2072	-1.701E-04	1.723E-08	10000	10000
426	-13.93	.2094	-1.561E-04	3.513E-08	-50.07	11.61
427	-1.334	.2395	-1.338E-04	2.903E-08	-34.6	31.74
428	-2.005	.2517	-1.385E-04	2.748E-08	-44.6	31.74
429	-23.184	.2641	-2.115E-04	6.061E-08	46.51	66.34
430	-14.535	.2217	-1.402E-04	3.245E-08	11.44	13.61
431	-14.198	.2322	-1.672E-04	3.513E-08	-55	20.77
432	-1.563	.2622	-1.47E-04	3.263E-08	-39.32	26.96
433	-2.238	.2744	-1.516E-04	3.245E-08	-69.52	11.76
434	6.01	.2664	-1.322E-04	4.007E-08	10000	10000
435	2.233	.2335	-1.275E-04	1.851E-08	-105.24	-20.21
436	1.909	.2361	-1.361E-04	3.46E-08	10000	10000
437	10000	10000	10000	10000	10000	10000
438	-14.319	.3145	-1.318E-04	4.63E-08	-59.92	21.72
439	-1.7	.2345	-1.594E-04	3.46E-08	-44.45	34.96
440	-2.499	.2974	-1.651E-04	3.531E-08	-74.45	13.35
441	-14.067	.2462	-1.375E-04	3.635E-08	53.7	10000
442	-14.037	.2462	-1.375E-04	3.635E-08	46.4	10000
443	-14.524	.3372	-1.946E-04	4.372E-08	-64.55	24.72
444	-1.933	.3071	-1.722E-04	3.743E-08	-49.36	36.91
445	-2.626	.3195	-1.773E-04	3.671E-08	-79.38	15.97
446	-14.79	.3601	-2.062E-04	4.573E-08	-69.78	26.73
447	-2.236	.3302	-1.659E-04	4.067E-08	-54.31	36.97
448	-2.346	.3342	-1.904E-04	4.166E-08	-84.31	17.96
449	.443	.2955	-1.461E-04	1.665E-08	10000	10000
450	-16.484	.3951	-2.239E-04	5.113E-08	10000	10000



NC	FORMULA	Tc	Pc	Zc	$\mu$	NOMBRE
451	C <sub>16</sub> H <sub>32</sub>	717	10.2	-1	.721	1-HEXADECENO
452	C <sub>16</sub> H <sub>34</sub>	717	14	-1	.742	1-HEXADECANO
453	C <sub>17</sub> H <sub>34</sub>	750	12.8	-1	.719	N-HEPTACILOPENTANO
454	C <sub>17</sub> H <sub>36</sub>	750	4	-1	-1	HEPTACENOLO
455	C <sub>17</sub> H <sub>36</sub>	755	13	.22	.777	N-HEPTACENO
456	C <sub>18</sub> H <sub>34</sub>	691	38.5	.455	-1	8-TERPENIL
457	C <sub>18</sub> H <sub>34</sub>	924.8	34.6	.358	-1	9-TERPENIL
458	C <sub>18</sub> H <sub>34</sub>	926	12.8	.336	-1	7-TERPENIL
459	C <sub>18</sub> H <sub>36</sub>	739	11.2	-1	.607	1-OCTACENO
460	C <sub>18</sub> H <sub>36</sub>	761	11.9	-1	.758	N-TRIDECILOPENTANO
461	C <sub>18</sub> H <sub>36</sub>	745	11.9	-1	.79	N-OCTACENO
462	C <sub>18</sub> H <sub>38</sub>	747	4	-1	-1	1-OCTACENOLO
463	C <sub>18</sub> H <sub>38</sub>	772	11.1	-1	.769	N-TRIDECILOPENTANO
464	C <sub>18</sub> H <sub>40</sub>	756	11	-1	.827	N-NOVACENO
465	C <sub>18</sub> H <sub>40</sub>	750	13.1	-1	.836	N-TRIDECILOPENTANO
466	C <sub>20</sub> H <sub>42</sub>	797	11	-1	.707	N-ICOCENO
467	C <sub>20</sub> H <sub>42</sub>	776	12	-1	-1	1-ICOCENOLO
468	C <sub>21</sub> H <sub>42</sub>	791	9.6	-1	.661	N-HEXADECILOPENTANO

NC	CACP	CBCP	CCCP	CDCP	DF	DG
451	-2.318	.3523	-1.762E-04	4.324E-08	-59.23	45.99
452	-3.109	.3652	-2.003E-04	4.413E-08	-59.23	26
453	-15.11	.4645	-2.333E-04	5.22E-08	-60.23	50.1
454	-1.361	.3343	-2.233E-04	4.331E-08	-106.47	-10.67
455	-5.336	.3679	-2.163E-04	4.71E-08	-94.15	22.01
456	10000	10000	10000	10000	10000	10000
457	10000	10000	10000	10000	10000	10000
458	10000	10000	10000	10000	10000	10000
459	-2.706	.3375	-2.237E-04	4.33E-08	-67.66	45.01
460	-13.336	.4276	-2.465E-04	5.513E-08	-61.55	32.74
461	-5.456	.4161	-2.271E-04	4.364E-08	-99.68	34.62
462	-2.079	.4174	-2.36E-04	5.153E-08	-135.39	-3.55
463	-15.536	.4561	-2.592E-04	5.794E-08	-66.48	34.77
464	-3.7	.4329	-2.424661E-04	5.26766661E-08	-104	36.66
465	-15.736	.473	-2.724E-04	6.33E-08	-14.41	36.78
466	-5.316	.4632	-2.667E-04	6.039E-08	-165.93	23.04
467	-3.905	.4657	-2.571E-04	6.00E-08	-145.25	-4.64
468	-15.727	.4364	-2.351E-04	6.373E-08	-99.33	36.79

1

## C A P I T U L O   V I I

## CONCLUSIONES Y RECCOMENDACIONES

Las ecuaciones de estado han sido de gran utilidad para la resolución de muchos problemas de ingeniería química y son un ingrediente indispensable en el cálculo de propiedades termodinámicas. Actualmente muchos ingenieros químicos que se enfrentan sobre todo con problemas de equilibrio de fases utilizan a las ecuaciones de estado como la manera directa de evaluar propiedades.

El impacto de las computadoras ha tenido una significación especial en los cálculos asociados con procesos de separación multi-componente.

Ahora es posible analizar procesos que involucren mezclas multicomponentes en una forma más rigurosa y rutinaria.

Durante el desarrollo de este trabajo se utilizaron diferentes técnicas numéricas para seleccionar la más adecuada y así disminuir el tiempo de proceso. La principal dificultad se presentó en los -- problemas de " flasheo " adiabático (isoentrópico), en donde, se encontró que la expresión para el balance de energía debería estar dado por la ec. (5-36b) o bien por :

$$S = \frac{(H_V - H_L)(V/F) + HL}{HP} - 1 \quad (7-1)$$

En el programa se optó por la ecuación (5-36b) en lugar de la -- ecuación (7-1) ya que para sistemas de compuestos semejantes la convergencia era más rápida. No obstante con la expresión (7-1) los -- problemas virtualmente convergían. Entonces para estos tipos de pro-

blemas se tienen dos opciones. ( en ambos casos se utiliza el método de Newton-Raphson )

En relación con los programas de cómputo estos fueron desarrollados para que usaran el mínimo de memoria y realizara su trabajo lo más rápido posible. Esta doble meta tuvo que ser moderada de tal forma que los programas fueran fiables, fáciles de escribir, usar, leer y modificar.

En la introducción se mencionó que los discos en donde se almacenó la información eran independientes entre sí, esto no implica -- que no puedan interconectarse. Esto último es posible debido a que la parte primera de todos los problemas es idéntica.

El Apple II trata a la impresora como la sustituta de la pantalla de video. Para crear salida para una impresora tendrá que agregar o incluir sentencias que envíen la salida desde la pantalla a la impresora. Esto se realiza mediante la sentencia PRNL.

Este trabajo en ningún momento tuvo como finalidad hacer un estudio comparativo entre las siete ecuaciones de estado analizadas, es decir, sólo consistió en la implementación de programas para resolver problemas relacionados con el EIV multiconforme.

## CAPITULO VIII

## A P E N D I C E S

APENDICE	PROGRAMA
A - 1	Cálculo de los parámetros de los componentes puros
A - 2	Cálculo de los puntos de burbuja o de rocío
B - 1	Cálculo de un punto de burbuja y uno de rocío
B - 2	Cálculo del flash
C - 1	Cálculo de los puntos necesarios para construir la zona de dos fases de un diagrama termodinámico
D - 1	Simulación de una columna de destilación multicomponente
E - 1	Actualizador del banco de platos

## A P E N D I C E A - 1

```

10 REM
   << PROGRAMA QUE CALCULA LAS CONSTANTES DE LOS COMPONENTES PUROS >>
20 DATA "FEDLICH-WANG", "SCAVE ORIGINAL", "SCAVE-ORABOSKI-DAUBERT", "PENO-ROBINSON", "SCHMIDT-KENZEL", "HARMENS-NAPP",
   "FATEL-TEJAL"
30 FOR I = 1 TO 7: READ EQ:I: NEXT I
40 VTAB $: INVERSE : FOR I = 1 TO 7: HTAB $: PRINT I: PRINT : NEXT I: NORMAL
50 FOR I = 1 TO 7: VTAB (3 + 2 * I): HTAB 10: PRINT "...:MSD(I): NEXT I
60 PRINT : PRINT " SELECCIONE LA ECUACION DE ESTADO QUE DESEA USAR (DE ACUERDO CON SU NUMERO)": PRINT
70 VTAB 20: HTAB 1: INPUT "ELECCION=":E0: VTAB 20: HTAB 11: FOR I = 1 TO 45: PRINT " ": NEXT
80 E0 = VAL E0:
90 IF E0 > = 1 AND E0 < = 7 THEN 110
100 GOTO 70
110 IF E0 = 1 THEN E0$ = "FEDLICH-WANG"
120 IF E0 = 2 THEN E0$ = "SCAVE ORIGINAL"
130 IF E0 = 3 THEN E0$ = "SCAVE-ORABOSKI-DAUBERT"
140 IF E0 = 4 THEN E0$ = "PENO-ROBINSON"
150 IF E0 = 5 THEN E0$ = "SCHMIDT-KENZEL"
160 IF E0 = 6 THEN E0$ = "HARMENS-NAPP"
170 IF E0 = 7 THEN E0$ = "FATEL-TEJAL"
180 $: = "DMS (CINCO = ORES 144)"
190 TEXT : HOME : INVERSE : PRINT "ENTRADA DE DATOS": NORMAL : PRINT : PRINT
200 PRINT "DE CUANTOS COMPONENTES ESTA CONSTITUIDA LA MEZCLA?": PRINT : INPUT "N=":N: PRINT : IF N < = 0 OR N >
20 THEN 190
210 DIM NCON(N),P(N),N1(N),P1(N),Z(N),M(N),COP(N),CCOP(N),CCOP(N),CCOP(N),CFOP(N),RN(N),DF(N),DGN
(N),B(N),CN(N),DN(N),ADN(N),R(N),T(N),N1(N)
220 PAGE 14:7
230 PRINT "¿LOS COMPONENTES DE LA MEZCLA ESTAN INCLUIDOS EN EL CATALOGO DE DATOS?": PRINT : INPUT "RESPUESTA (S
/D/N):"R:
240 IF R#="S" THEN N1 = 0: GOTO 330
250 IF R#="D" OR "N" THEN N1 = 1: GOTO 330
260 PRINT : PRINT "¿CÓMO SE IDENTIFICAN LOS COMPONENTES?": INPUT "N=":NS: IF NS > N OR NS < 0 THEN 450
270 N1 = N - NS: FOR I = 1 TO NS
280 HOME : PRINT : PRINT "¿CÓMO SE IDENTIFICAN LOS PARÁMETROS DEL COMPONENTE "I": PRINT : INPUT "NOMBRE=":N1(I): INPUT "FORM
ULA=":F0(I): INPUT "TEMP. CRÍTICA (K)=":T0(I): INPUT "PRESION CRÍTICA (KG/CM2)=":P0(I): INPUT "ZETA CRÍTICA (
D=":Z0(I): INPUT "FACTOR ACENTRADO (A=":A0(I): PRINT
290 PRINT " CONSTANTES DE LA ECUACION DEL GAS IDEAL (CON CF EN CAL/MOL K Y T EN K)":
PRINT : PRINT "CP = "COP + "CCOP1 + "CCOP2 + "CCOP3": PRINT
300 INPUT "COP=":COP(I): INPUT "CCOP1=":CCOP1(I): INPUT "CCOP2=":CCOP2(I): INPUT "CCOP3=":CCOP3(I)
310 PRINT : INPUT "ENTALPIA DE FORMACION ESTÁNDAR A 129 K (CF/MOL-GAS)=":DF(I): PRINT : INPUT " ENERGÍA DE GIBBS
DE FORMACION ESTÁNDAR A 129 K PARA EL GAS IDEAL (KJ/KMOL-GAS)=":DGN(I)
320 NEXT I: IF NS = 0 THEN 340
330 PRINT "¿PRES. BANDA DE DATOS (LÍMITE): PRINT "PRES. BANDA DE DATOS (LÍMITE): INPUT N1(0):FOR I=N1(0)+1 TO (0):P0(I)
:Z0(I):M(I):COP(I):CCOP1(I):CCOP2(I):CCOP3(I):CFOP(I):DGN(I):PRINT "POSICION BANDA DE DATOS(0)"
340 FOR I = (N1 + 1) TO N
350 HOME : PRINT " PROPORCIONE EL NO. QUE IDENTIFICA AL COMPONENTE "I" EN EL BANDA DE DATOS": INPUT "
N=":N1(I): IF N1(I) < = 0 OR N1(I) > N1(0) THEN 350
360 PRINT "PRES. BANDA DE DATOS(0)=":P0(I)
370 INPUT N1(1):P1(I):R0(I):T0(I):F0(I):A0(I):COP(I):CCOP1(I):CCOP2(I):CCOP3(I):DF(I):DGN(I)
380 PRINT "POSICION BANDA DE DATOS"
390 PRINT : PRINT "DATOS LIBRE PARA EL COMPONENTE "I(I)": PRINT
400 PRINT "N=":N1(I): PRINT "FORMULA=":F0(I): PRINT "NOMBRE=":N1(I): PRINT "T0=":T0(I): PRINT "P0=":P0(I): PRIN
T "Z0=":Z0(I): PRINT "A=":A0(I)
410 PRINT "COP=":COP(I): PRINT "CCOP1=":CCOP1(I): PRINT "CCOP2=":CCOP2(I): PRINT "CCOP3=":CCOP3(I): PRINT "DF
=":DF(I): PRINT "DGN=":DGN(I)
420 PRINT : PRINT "PARA CONTINUAR PRESIONE CUALQUIER TECLA": GET $:
430 NEXT I

```



```

1240 REM
1250 << PEM-AGELEBEN >>
1260 FOR I = 1 TO N
1270 B(I) = (0.0726 * T(I) / P(I)
1280 D(I) = B(I)
1290 S(I) = B(I)
1300 W(I) = (0.4374 * T(I) / P(I)
1310 A(I) = SQR(W(I))
1320 N(I) = (0.2744 + 1.8725 * W(I) - 0.2672 * W(I) ^ 2)
1330 NEXT I
1340 GOTO 970
1350 REM
1360 << SCHMIDT-WENZEL >>
1370 FOR I = 1 TO N
1380 A = 0 * W(I) + 1.8 - 0.4 * D(I) = - 1
1390 GOSUB 950
1400 ZE = 1 / (3 * W(I) + 3 * W(I) ^ 2)
1410 S(I) = ST - ZE * T(I) / P(I)
1420 D(I) = 1 + W(I) + S(I)
1430 S(I) = D(I)
1440 W(I) = (1 - ZE * (1 - ST) ^ 3) * (T(I) ^ 2) / P(I)
1450 A(I) = SQR(W(I))
1460 N(I) = (0.485 + 1.147 * W(I) - 0.258 * W(I) ^ 2)
1470 NEXT I
1480 GOTO 970
1490 REM
1500 << WÄRMENÄHME >>
1510 FOR I = 1 TO N
1520 ZE = (0.011 - 0.0034 * W(I) ^ 2) + 0.017
1530 ST = 0.1070 + 0.76405 * ZE - 0.24232 * (ZE ^ 2) + 0.76219 * (ZE ^ 3)
1540 S(I) = ST * ZE * T(I) / P(I)
1550 D(I) = S(I) * W(I) + 1 + S(I) * ST * ZE
1560 S(I) = D(I)
1570 W(I) = (1 - S * ZE - 3 * ZE ^ 2) / (ST * ZE * (3 - 6 * ZE + ST * ZE)) + (T(I) ^ 2) / P(I)
1580 A(I) = SQR(W(I))
1590 NEXT I
1600 GOTO 970
1610 REM
1620 << FADEL-TEIL >>
1630 FOR I = 1 TO N
1640 ZE = 0.32132 - 0.076746 * W(I) - 0.0011447 * W(I) ^ 2)
1650 A = (1.8 - 3 * ZE) / (3 * ZE + 0.14) = - (ZE ^ 2)
1660 GOSUB 950
1670 S(I) = ST * T(I) / P(I)
1680 D(I) = (1 - S * ZE) * T(I) / P(I)
1690 S(I) = D(I)
1700 W(I) = (1 - ZE + ST) ^ 3) * (T(I) ^ 2) / P(I)
1710 A(I) = SQR(W(I))
1720 N(I) = (0.451413 + 1.00182 * W(I) - 0.245437 * W(I) ^ 2)
1730 NEXT I
1740 RETURN
1750 REM
1760 << RESULTANALITICA PARA LAS EC. CUASICAS DE SCHMIDT-WENZEL Y DE FADEL-TEIL >>
1770 DEF FN FAKA = - W(N) / SQR(- K * K + 1) + 1.3707333
1780 NH = S / W(N) : C = W(N) : D = W(N) : E = 1 / 3
1790 NH = NH / CPM : W(N) = W(N) ^ 2 : W(N) = W(N) / C
1800 W = W(N) * NH - CPM / 2 - W(N) : C

```



```

9825 G1 = (GN ^ 2) - (GM ^ 2)
9826 IF G1 = 0 THEN 9835
9835 G1A = - GM/G1A = GM/R1A = - GM
9840 G1 = 2 * G1A - (G1A ^ 2)
9845 G2 = - (G1A ^ 3) + 4.5 * G1A * G1A - 15.5 * R1A
9850 G1 = G1A * DIFI = FN F1A - 0.5
9855 F1 = FN F1A - 30 / 30R * (- AX) / 3
9860 IF G1 = 0 AND 4/1) < = - 0.107 THEN 9875
9865 G1 = G1A + 2 * 30R * (- AX) * COS (F1) / 3
9870 GOTO 9820
9875 G1 = (G1A + 2 * 30R * (- AX) * COS (F1 + 2 * PI)) / 3
9880 GOTO 9820
9885 G1 = 30R * GR
9890 G1 = G1 + G1G2 = G1 - G1
9895 IF G1 > 0 THEN A1 = G1 * G1
9900 IF G1 < 0 THEN A1 = - (G1 * G1)
9905 IF G2 > 0 THEN A2 = G2 * G1
9910 IF G2 < 0 THEN A2 = - (G2 * G1)
9915 G1 = A1 + A2 - DR
9920 RETURN
11000 REM
<< SUBROUTINA QUE DA LA OPCION PARA ALIMENTAR MIO S >>
11010 IF N = 1 THEN A48 = "N": RETURN
11020 HOME : PRINT : PRINT " ¿DESEA ALIMENTAR PARAMETROS DE INTERACCIÓN SINÁRGICOS DE LA REDDULA ?": PRINT : PRINT
11030 INPUT "SÍ/NO": RESPUESTA11030A
11040 IF A48 = "S": THEN 11070
11050 IF A48 < > "N": THEN 11020
11060 RETURN
11070 PRINT : PRINT : PRINT " PROPORCIONE LOS PARAMETROS DE INTERACCIÓN SINÁRGICOS MIO S": PRINT
11080 FOR I = 1 TO N - 1: FOR J = I + 1 TO N: PRINT " MIO S": INPUT A101010: READ J
11090 FOR S = N TO 2 STEP - 1: FOR T = S - 1 TO 1 STEP - 1: INPUT A101010: READ J: HOME : VTAB 10: HTAB 8
: FLASH : PRINT " " : NORMAL : PRINT " PASADOBARRAS INFORMACIÓN": FLASH : PRINT " " : NORMAL
11100 PRINT "MIO S": PRINT "MIO S": PRINT "MIO S": PRINT "MIO S": PRINT "MIO S"
11110 FOR I = 1 TO N: FOR J = 1 TO N: PRINT "MIO S": PRINT "MIO S": PRINT "MIO S"
11120 PRINT "MIO S": RETURN
12000 REM
<< SUBROUTINA QUE DA A ELEJIR EL SISTEMA DE UNIDADES A EMPLEAR >>
12010 HOME : VTAB 5: PRINT " ¿CONTINUACIÓN DEL TENDERA LAS UNIDADES PARA LA PRESIÓN, TEMPERATURA Y ENTALPIA?": PRINT
: PRINT : PRINT " EN LAS UNIDADES EXISTENTES SE ALIMENTARÁN LOS DATOS PULSADOS POSTERIORMENTE ": VTAB 10: PRINT
" ¿DESEA CONTINUAR PRESIONANDO CUALQUIER TECLA?": GET C18
12020 TEXT : HOME : PRINT : PRINT SPC: KEY: INVERSE : PRINT "SELECCIÓN DE UNIDADES": NORMAL
12030 PRINT : PRINT SPC: VAR: VARIABLE : FREQ: FREQ
12040 PRINT SPC: (4) "UNIDADES": PRINT " Opción " : SPC: (8) "RESPONDELES": SPC: (8) "TEMPERATURA": PRINT
12050 FOR I = 1 TO 12: PRINT SPC: (4) "1": SPC: (4) "2": SPC: (4) "3": SPC: (4) "4": SPC: (4) "5": SPC: (4) "6": SPC: (4) "7": SPC: (4) "8": SPC: (4) "9": SPC: (4) "10": SPC: (4) "11": SPC: (4) "12": PRINT
12060 VTAB 9: HTAB 10: PRINT ".,ATMOSFERAS.,": HTAB 31: PRINT ".,ATM"
12070 HTAB 10: PRINT ".,BARES.,": HTAB 31: PRINT ".,BAR"
12080 HTAB 10: PRINT ".,DINAMOS/CM.,": HTAB 31: PRINT ".,DIN/CM"
12090 HTAB 10: PRINT ".,LIVERTON/M.,": HTAB 31: PRINT ".,MM/M"
12100 HTAB 10: PRINT ".,GRAMOS/CM.,": HTAB 31: PRINT ".,G/CM"
12110 HTAB 10: PRINT ".,GRAMOS/CM.,": HTAB 31: PRINT ".,G/CM"
12120 HTAB 10: PRINT ".,MILIFADDALES.,": HTAB 31: PRINT ".,MFA"
12130 HTAB 10: PRINT ".,MM DE MERCURIO": HTAB 31: PRINT ".,MM HG"
12140 HTAB 10: PRINT ".,PIE DE AGUA": HTAB 31: PRINT ".,PI H2O"
12150 HTAB 10: PRINT ".,PULGADA DE HG.,": HTAB 31: PRINT ".,IN HG"
12160 HTAB 10: PRINT ".,LIBRAS/FLE.,": HTAB 31: PRINT ".,PSI"
12170 HTAB 10: PRINT ".,LIBRAS/FLE.,": HTAB 31: PRINT ".,LB/FT"
12180 VTAB 20: HTAB 10: INPUT " ¿DELEE LETRA DE OPCION?": UP: VTAB 22: HTAB 27: FOR I = 1 TO 30: PRINT " " : NEXT

```

```

12190 IF UF# = "" THEN UF# = "0"
12200 UF = ASC (UF#) - 64: IF UF > = 1 AND UF < = 12 THEN 12220
12210 GOTO 12180
12220 ON UF GOTO 12230,12240,12250,12260,12270,12280,12290,12300,12310,12320,12330,12340
12230 UF# = "ATH":RPF = 1: GOTO 12350
12240 UF# = "BAR":RPF = 1:GOTO 12350
12250 UF# = "GAW":RPF = 1:G1326: GOTO 12350
12260 UF# = "MAM":RPF = 1:G1326: GOTO 12350
12270 UF# = "NGW":RPF = 1:G1327: GOTO 12350
12280 UF# = "OGW":RPF = 1:G1327: GOTO 12350
12290 UF# = "SAM":RPF = 1:G1328: GOTO 12350
12300 UF# = "MAM":RPF = 76: GOTO 12350
12310 UF# = "HT":RPF = 16:9: GOTO 12350
12320 UF# = "IN":RPF = 2:4:8: GOTO 12350
12330 UF# = "SMA":RPF = 14:7: GOTO 12350
12340 UF# = "LBF":RPF = 2:13:4
12350 IF UF < = 9 THEN UT#(1) = "JHELVIN":TAB$(1) = "A":UT#(2) = "CENTIGRADOS":TAB$(2) = "C"
12360 IF UF > = 1 THEN UT#(1) = "WANG MEI":TAB$(1) = "A":UT#(2) = "FAHRENHEIT":TAB$(2) = "F"
12370 TEXT : HOME : PRINT : PRINT : SPC( 9): INVERSE : PRINT "SELECCION DE UNIDADES": NORMAL
12380 PRINT : PRINT : SPC( 3): "VARIABLE : TEMPERATURA": PRINT
12390 PRINT : SPC( 14): "UNIDADES": PRINT : OPTION " ": SPC( 3): "DIGITALES": SPC( 3): "ABREVIATURA": PRINT
12400 FOR I = 1 TO 2: PRINT : SPC( 14): "OVR# (04 = 1):":....."UT#(1):".....":TAB$(1): NEXT
12410 VTAB 1: HTAB 1: INPUT "TECLAS LETRA DE OPCION (":UT#): VTAB 1: HTAB 2: FOR I = 1 TO 35: PRINT " ": NEXT
12420 IF UT# = "" THEN UT# = "0"
12430 UT = ASC (UT#) - 64: IF UT > = 1 AND UT < = 2 THEN 12450
12440 GOTO 12410
12450 IF UT < = 5 AND UT = 1 THEN UT# = "K":UT = 0:RPF = 1: GOTO 12490
12460 IF UT < = 9 AND UT = 2 THEN UT# = "C":UT = 0:RPF = 1: GOTO 12490
12470 IF UT > = 1 AND UT = 1 THEN UT# = "R":UT = 0:RPF = 1: GOTO 12490
12480 IF UT > = 9 AND UT = 2 THEN UT# = "F":UT = 0:RPF = 1: GOTO 12490
12490 UH#(1) = "CALORIAS":TAB$(1) = "CAL":TAB$(2) = "JULIOS":TAB$(1) = "JULIOS"
12500 TEXT : HOME : PRINT : PRINT : SPC( 9): INVERSE : PRINT "SELECCION DE UNIDADES": NORMAL
12510 PRINT : PRINT : SPC( 3): "VARIABLE : ENTALPIA": PRINT
12520 PRINT : SPC( 14): "UNIDADES": PRINT : OPTION " ": SPC( 3): "DIGITALES": SPC( 3): "ABREVIATURA": PRINT
12530 FOR I = 1 TO 2: PRINT : SPC( 14): "OVR# (04 = 1):":.....": SPC( 14):".....": VTAB 1: HTAB 1: PR
INT UH#(1): HTAB 3: PRINT UH#(1): NEXT
12540 VTAB 1: HTAB 1: INPUT "TECLAS LETRA DE OPCION (":UH#): VTAB 1: HTAB 2: FOR I = 1 TO 35: PRINT " ": NEXT
12550 IF UH# = "" THEN UH# = "0"
12560 UH = ASC (UH#) - 64: IF UH > = 1 AND UH < = 2 THEN 12580
12570 GOTO 12540
12580 IF UH = 1 THEN UH# = "CAL":TAB$(1) = UH# + UH#(1):TAB$(2) = "CALOR"
12590 IF UH = 2 THEN UH# = "JUL":TAB$(1) = UH# + UH#(1):TAB$(2) = "JULIOS"
12600 UH# = "CALOR"
12610 GOTO 12630
12620 UH# = "ENTALPIA":TAB$(1) = UH# + UH#(1):TAB$(2) = "ENTALPIA":TAB$(1) = "ENTALPIA"
12630 HOME : PRINT : PRINT "SIGUIENTE SELECCION DE UNIDADES PARA LA ENTREGA SALIDA DE DATOS. RESULTADOS"
12640 PRINT : PRINT "PRESION EN : "UF#): PRINT : PRINT "TEMPERATURA EN : "UT#): PRINT : PRINT "ENTALPIA EN : "UH#
): PRINT : PRINT "ENTROPIA EN : "US#): PRINT : PRINT "PLUG EN : "UP#): PRINT : PRINT "CARGA TERMICA EN : "UQ#
12650 VTAB 1: HTAB 1: PRINT "ESTA DE ADEBERO (":INPUT " :S:YANG":UT#): VTAB 1: HTAB 1: FOR I = 1 TO 45: P
RINT " ": NEXT
12660 IF UQ# = "0" THEN UP# = 0: RETURN
12670 IF UQ# = "1" THEN 12690
12680 GOTO 12650

```

## A P E N D I C E A - 2

Nota : Los siguientes listados contienen subrutinas afines a otros programas. Por lo que cuando se haga referencia a una subrutina (mediante el número de línea) en los subsiguientes apéndices y no se liste se entenderá que corresponden a listados anteriores.

```

10 REM
11 << ESTE PROGRAMA CALCULA UN PUNTO DE BURBUJA O UNO DE ROCIO >>
12 SA = DMS (4/17) : IE = 3 : DEF FN S1(X) = INT (X * 100 + 0.5) / 100 : DEF FN S2(X) = INT (X * 100 + 0.5) / 1
13 EO
14 PRINT SA: OPEN POP: INPUT PRINT SA: REAL POP: INPUT N: E: E2: E3: E4: E5: E6: E7: E8: E9: E10: E11: E12: E13: E14: E15: E16: E17: E18: E19: E20: E21: E22: E23: E24: E25: E26: E27: E28: E29: E30: E31: E32: E33: E34: E35: E36: E37: E38: E39: E40: E41: E42: E43: E44: E45: E46: E47: E48: E49: E50: E51: E52: E53: E54: E55: E56: E57: E58: E59: E60: E61: E62: E63: E64: E65: E66: E67: E68: E69: E70: E71: E72: E73: E74: E75: E76: E77: E78: E79: E80: E81: E82: E83: E84: E85: E86: E87: E88: E89: E90: E91: E92: E93: E94: E95: E96: E97: E98: E99: E100: E101: E102: E103: E104: E105: E106: E107: E108: E109: E110: E111: E112: E113: E114: E115: E116: E117: E118: E119: E120: E121: E122: E123: E124: E125: E126: E127: E128: E129: E130: E131: E132: E133: E134: E135: E136: E137: E138: E139: E140: E141: E142: E143: E144: E145: E146: E147: E148: E149: E150: E151: E152: E153: E154: E155: E156: E157: E158: E159: E160: E161: E162: E163: E164: E165: E166: E167: E168: E169: E170: E171: E172: E173: E174: E175: E176: E177: E178: E179: E180: E181: E182: E183: E184: E185: E186: E187: E188: E189: E190: E191: E192: E193: E194: E195: E196: E197: E198: E199: E200: E201: E202: E203: E204: E205: E206: E207: E208: E209: E210: E211: E212: E213: E214: E215: E216: E217: E218: E219: E220: E221: E222: E223: E224: E225: E226: E227: E228: E229: E230: E231: E232: E233: E234: E235: E236: E237: E238: E239: E240: E241: E242: E243: E244: E245: E246: E247: E248: E249: E250: E251: E252: E253: E254: E255: E256: E257: E258: E259: E260: E261: E262: E263: E264: E265: E266: E267: E268: E269: E270: E271: E272: E273: E274: E275: E276: E277: E278: E279: E280: E281: E282: E283: E284: E285: E286: E287: E288: E289: E290: E291: E292: E293: E294: E295: E296: E297: E298: E299: E300: E301: E302: E303: E304: E305: E306: E307: E308: E309: E310: E311: E312: E313: E314: E315: E316: E317: E318: E319: E320: E321: E322: E323: E324: E325: E326: E327: E328: E329: E330: E331: E332: E333: E334: E335: E336: E337: E338: E339: E340: E341: E342: E343: E344: E345: E346: E347: E348: E349: E350: E351: E352: E353: E354: E355: E356: E357: E358: E359: E360: E361: E362: E363: E364: E365: E366: E367: E368: E369: E370: E371: E372: E373: E374: E375: E376: E377: E378: E379: E380: E381: E382: E383: E384: E385: E386: E387: E388: E389: E390: E391: E392: E393: E394: E395: E396: E397: E398: E399: E400: E401: E402: E403: E404: E405: E406: E407: E408: E409: E410: E411: E412: E413: E414: E415: E416: E417: E418: E419: E420: E421: E422: E423: E424: E425: E426: E427: E428: E429: E430: E431: E432: E433: E434: E435: E436: E437: E438: E439: E440: E441: E442: E443: E444: E445: E446: E447: E448: E449: E450: E451: E452: E453: E454: E455: E456: E457: E458: E459: E460: E461: E462: E463: E464: E465: E466: E467: E468: E469: E470: E471: E472: E473: E474: E475: E476: E477: E478: E479: E480: E481: E482: E483: E484: E485: E486: E487: E488: E489: E490: E491: E492: E493: E494: E495: E496: E497: E498: E499: E500: E501: E502: E503: E504: E505: E506: E507: E508: E509: E510: E511: E512: E513: E514: E515: E516: E517: E518: E519: E520: E521: E522: E523: E524: E525: E526: E527: E528: E529: E530: E531: E532: E533: E534: E535: E536: E537: E538: E539: E540: E541: E542: E543: E544: E545: E546: E547: E548: E549: E550: E551: E552: E553: E554: E555: E556: E557: E558: E559: E560: E561: E562: E563: E564: E565: E566: E567: E568: E569: E570: E571: E572: E573: E574: E575: E576: E577: E578: E579: E580: E581: E582: E583: E584: E585: E586: E587: E588: E589: E590: E591: E592: E593: E594: E595: E596: E597: E598: E599: E600: E601: E602: E603: E604: E605: E606: E607: E608: E609: E610: E611: E612: E613: E614: E615: E616: E617: E618: E619: E620: E621: E622: E623: E624: E625: E626: E627: E628: E629: E630: E631: E632: E633: E634: E635: E636: E637: E638: E639: E640: E641: E642: E643: E644: E645: E646: E647: E648: E649: E650: E651: E652: E653: E654: E655: E656: E657: E658: E659: E660: E661: E662: E663: E664: E665: E666: E667: E668: E669: E670: E671: E672: E673: E674: E675: E676: E677: E678: E679: E680: E681: E682: E683: E684: E685: E686: E687: E688: E689: E690: E691: E692: E693: E694: E695: E696: E697: E698: E699: E700: E701: E702: E703: E704: E705: E706: E707: E708: E709: E710: E711: E712: E713: E714: E715: E716: E717: E718: E719: E720: E721: E722: E723: E724: E725: E726: E727: E728: E729: E730: E731: E732: E733: E734: E735: E736: E737: E738: E739: E740: E741: E742: E743: E744: E745: E746: E747: E748: E749: E750: E751: E752: E753: E754: E755: E756: E757: E758: E759: E760: E761: E762: E763: E764: E765: E766: E767: E768: E769: E770: E771: E772: E773: E774: E775: E776: E777: E778: E779: E780: E781: E782: E783: E784: E785: E786: E787: E788: E789: E790: E791: E792: E793: E794: E795: E796: E797: E798: E799: E800: E801: E802: E803: E804: E805: E806: E807: E808: E809: E810: E811: E812: E813: E814: E815: E816: E817: E818: E819: E820: E821: E822: E823: E824: E825: E826: E827: E828: E829: E830: E831: E832: E833: E834: E835: E836: E837: E838: E839: E840: E841: E842: E843: E844: E845: E846: E847: E848: E849: E850: E851: E852: E853: E854: E855: E856: E857: E858: E859: E860: E861: E862: E863: E864: E865: E866: E867: E868: E869: E870: E871: E872: E873: E874: E875: E876: E877: E878: E879: E880: E881: E882: E883: E884: E885: E886: E887: E888: E889: E890: E891: E892: E893: E894: E895: E896: E897: E898: E899: E900: E901: E902: E903: E904: E905: E906: E907: E908: E909: E910: E911: E912: E913: E914: E915: E916: E917: E918: E919: E920: E921: E922: E923: E924: E925: E926: E927: E928: E929: E930: E931: E932: E933: E934: E935: E936: E937: E938: E939: E940: E941: E942: E943: E944: E945: E946: E947: E948: E949: E950: E951: E952: E953: E954: E955: E956: E957: E958: E959: E960: E961: E962: E963: E964: E965: E966: E967: E968: E969: E970: E971: E972: E973: E974: E975: E976: E977: E978: E979: E980: E981: E982: E983: E984: E985: E986: E987: E988: E989: E990: E991: E992: E993: E994: E995: E996: E997: E998: E999: E1000
150 HOME : PRINT "¿CÓMO ES LO QUE DESEA CALCULAR ?": PRINT
160 PRINT "1) PRESION DE BURBUJA": PRINT
170 PRINT "2) PRESION DE ROCIO": PRINT
180 PRINT "3) TEMPERATURA DE BURBUJA": PRINT
190 PRINT "4) TEMPERATURA DE ROCIO": PRINT
200 POKE 34: 12
210 HOME : INPUT "ELECCION =": E1: IF VAL (E1) < = 0 OR VAL (E1) > = 5 THEN 160
220 TEXT 108 = VAL (E1)
230 HOME : PRINT " ¿QUE TIPO DE SOLUCION QUIERE PARA EL CALCULO DEL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD ZETA ?": PRINT
240 PRINT " 1) ANALITICA  2) NUMERICA": PRINT
250 POKE 34: c
260 HOME : INPUT "ELECCION =": E2: IF VAL (E2) < = 0 OR VAL (E2) > = 3 THEN 210
270 TEXT 101 = VAL (E2)

```

```

330 IF ER = 1 THEN BR# = "PRESION DE BURBUJA"
340 IF ER = 2 THEN BR# = "FRACCION DE ROCIO"
350 IF ER = 3 THEN BR# = "TEMPERATURA DE BURBUJA"
360 IF ER = 4 THEN BR# = "TEMPERATURA DE ROCIO"
370 ON ER GOTO 350,350,370,370
380 UNTIL: PRINT "A QUE TEMPERATURA (*UT#) QUIERE LA *ER#:"; PRINT
390 INPUT "T# ="; T#; T# = UT# / TCF; PRINT; PRINT
400 ON ER GOTO 310,340
410 PRINT " PROPORCIONE LA COMPOSICION DE LA FASE LIQUIDA EN FRACCION MOL:"; PRINT
420 BX = 0; FOR I = 1 TO NB: PRINT "X("NCS+I#) ="; INPUT X(I)/SA = BX + X(I); NEXT I
430 FOR I = 1 TO NB: (X(I) = X(I) / BX) NEXT I; GOTO 400
440 PRINT " PROPORCIONE LA COMPOSICION DE LA FASE VAPOR EN FRACCION MOL:"; PRINT
450 BX = 0; FOR I = 1 TO NB: PRINT "Y("NCS+I#) ="; INPUT Y(I)/SB = BX + Y(I); NEXT I
460 FOR I = 1 TO NB: (Y(I) = Y(I) / BX) NEXT I; GOTO 400
470 UNTIL: PRINT "SOL# 100% LA QUE PRESION (*PUP#) QUIERE LA *ER#:"; PRINT
480 INPUT "P# ="; P#; P# = P#; PRINT; PRINT
490 ON ER = 3 GOTO 310,340
500 PRINT; PRINT " PROCESO ITERATIVO PARA ENCONTRAR LA *ER#:"; PRINT; GOSUB 3000
510 ON ER GOTO 450,450,510,510
520 HOME; PRINT "SOL# 4# INVERSE:"; PRINT " << R E S U L T A D O S >>"; NORMAL; PRINT
530 PRINT BR#;"# + UF:"; #UF#
540 PRINT "TEMPERATURA# EN DEG * TCF = UT#:"; #UT#
550 PRINT "SOL# 1# INVERSE:"; PRINT " < COMPOSICIONES >"; NORMAL
560 PRINT "SOL# 2# FRACCION MOL:"; PRINT "COMPONENTE#:"; SOL# 7# "LIQUIDA:"; SOL# 7# "VAPOR:"; PRINT
570 FOR I = 1 TO NB: PRINT "X("NCS+I#) ="; TAB(15); PRINT "Y("NCS+I#) ="; TAB(15); PRINT; NEXT I
580 PRINT "SOL# 15#-----:"; SOL# 15# "-----"
590 BX = W#; Y# = 0; FOR I = 1 TO NB: BX = BX + X(I); Y# = Y# + Y(I); NEXT I
600 PRINT "TOTAL#:"; SOL# 12#; PRINT "SOL# 20# EN DEG#:"; PRINT
610 PRINT "PROPIEDADES #:"; SOL# 1# "LIQUIDA#:"; SOL# 7# "VAPOR#:"; PRINT; PRINT "ENTALPIA #:"; TAB(15); #HL * TCF; TAB(15); #L#; PRINT " (*H#)"; #H#
620 PRINT "ENTROPIA #:"; TAB(15); #EL; TAB(15); #EV; PRINT " (*H#)"; PRINT "CETA #:"; TAB(15); #ZL; TAB(20); #ZV; PRINT
630 PRINT "CUESTA MATER OTRO CALCULO #:"; #SOL#; #NS#; PRINT
640 PRINT "RESPUESTA#:";
650 GET BX
660 IF BX = "S" THEN IT = #FE * W#; P# = 0; T# = 0; GOTO 100
670 IF BX = "N" THEN PRINT "NO:"; PRINT; PRINT; PRINT " << PARA EL CALCULO DE PROPIEDADES TERCODINAMICAS SE UTILIZO LA ECUACION DE ESTADO DE "HEUN#>>"; PRINT; PRINT " << PROGRAMA TERCOD# >>"; END
680 GOTO 550
690 HOME; PRINT "SOL# 4# INVERSE:"; PRINT " << R E S U L T A D O S >>"; NORMAL; PRINT
700 PRINT BR#;"# + TCF = UT#:"; #UT#
710 PRINT "PRESION# P# = UF:"; #UF#
720 GOTO 450
730 REM
<< SUBROUTINA PUNTOS DE BURBUJA / BURBUJA >>

3010 ON ER GOTO 3020,3040,3020,3040
3020 FOR I = 1 TO NB: (X(I) = X(I)) NEXT I
3030 GOTO 3050
3040 FOR I = 1 TO NB: (Y(I) = Y(I)) NEXT I
3050 IF P = 0 AND ER = 1 THEN GOSUB 4500
3060 IF P = 0 AND ER = 2 THEN GOSUB 4500
3070 IF T = 0 AND ER = 3 THEN GOSUB 4500
3080 IF T = 0 AND ER = 4 THEN GOSUB 4500

```

```

3070 IT = 0
3080 REM
<< COMIENZA EL PROCESO ITERATIVO >>

3100 IT = IT + 1: PRINT : INVERSE : PRINT "IT=";IT; NORMAL
3120 IF IT > 20 THEN 3790
3130 REM
<< CALCULO DE LAS RELACIONES DE EQUILIBRIO Ki/γ >>

3140 GOSUB 3000
3150 S = 0
3160 REM
<< CALCULO DE LA SUMA DE Ki (BURBUJAS) O (V1 / P) (VOCIO) >>

3170 FOR I = 1 TO N
3180 K(I) = F(I) / P(I)
3190 ON ER GOTO 3200,3210,3220,3230
3200 DN(I) = A(I) / K(I)
3210 GOTO 3230
3220 DN(I) = (V1) / K(I)
3230 S = S + DN(I)
3240 NEXT I
3250 ON ER GOTO 3260,3270,3270,3270
3260 PRINT "S=";S : OF."ERROR=";ER: PRINT "ZL=";ZL: SPC(5); "ZV=";ZV: GOTO 3290
3270 PRINT "P="; P : FN 30.1 : * TOP = 0.7 : "ERROR=";ER: PRINT "ZL=";ZL: SPC(5); "ZV=";ZV
3280 ON ER GOTO 3300,3300,3430,3440
3290 FE
<< COMPARAR SI SE HA ALCANZADO LA CONVERGENCIA >>

3300 IF ABS(S - I) < TO THEN 3710
3310 REM
<< CALCULO DE LAS Ki A PARTIR PARA CALCULAR LA DERIVADA DEL ERROR (S-I) CON RESPECTO A P >>

3320 P = P * 1.01: GOSUB 3000: P = P / 1.0133 = 0
3330 IF ER = 2 THEN 3380
3340 REM
<< CALCULO DE LA NUEVA COMPOSICION DEL VAPEOR (BURBUJAS) >>

3350 FOR I = 1 TO N: V(I) = DN(I) / S: S3 = S - F(I) * V(I) / P: V(I) = V(I) / S3: NEXT I
3360 GOTO 3410
3370 REM
<< CALCULO DE LA NUEVA COMPOSICION DEL LIQUIDO (VOCIO) >>

3380 FOR I = 1 TO N: V(I) = DN(I) / S: S3 = S - P: V(I) = V(I) / F(I): NEXT I
3390 REM
<< CALCULO DE LA NUEVA PRESION DE BURBUJA O VOCIO >>

3400 DP = P * (S3 - S) / (S3 - I - (S - I) * F / (P * 1.01)) - F
3410 REM
<< COMPARAR SUE LA NUEVA PRESION ESTE DENTRO DE RANGO (ENTRE 1E-6 Y 1000 MM) >>

3420 IF DP > 20 THEN DP = 20
3430 IF DP < - 20 THEN DP = - 20
3440 P = P + DP
3450 IF P < 1E - 6 THEN P = 1E - 6
3460 IF P > 1000 THEN P = 1000
3470 GOTO 3110
3480 FO = LOG (S)
3490 REM

```

<< COMPROBAR SI SE HA ALCANZADO LA CONVERGENCIA >>

3500 IF ABS (F0) < TT THEN 3710

3510 REM

<< CALCULO DE LAS  $n_i$  PARA CALCULAR LA DERIVADA DE ERROR (F0) CON RESPECTO A T >>

3520 T = T + 1

3530 GOSUB 3600

3540 T = T - 1:SS = 0

3550 IF SS = 4 THEN 3600

3560 REM

<< CALCULO DE LA NUEVA COMPOSICION DEL VAPOR (R0000) >>

3570 FOR I = 1 TO N:R(I) = C(I) / (SS + SS + F(I) \* X(I) / P(I)) :NEXT I

3580 GOTO 3610

3590 REM

<< CALCULO DE LA NUEVA COMPOSICION DEL LIQUIDO (R0100) >>

3600 FOR I = 1 TO N:R(I) = C(I) / (SS + SS + F(I) \* X(I) / P(I)) :NEXT I

3610 F1 = 100 \* SS

3620 REM

<< CALCULO DE LA NUEVA TEMPERATURA POR NEWTON-RAPHSON >>

3630 DT = (F1 - F0) \* T / (F1 - T \* F0 / (T + 1)) - T

3640 REM

<< COMPROBAR QUE LA NUEVA TEMPERATURA ESTE DENTRO DE RANGO (ENTRE 50 Y 700 K) >>

3650 IF DT > 50 THEN DT = 50

3660 IF DT < - 50 THEN DT = - 50

3670 T = T + DT

3680 IF T > 700 THEN T = 700

3690 IF T < 50 THEN T = 50

3700 GOTO 3510

3710 FOR I = 1 TO N

3720 REM

<< VERIFICACION DE LA COMPOSICION DE LA FASE INICIANTE >>

3730 ON ER GOTO 3740,3750,3760,3770

3740 R(I) = C(I) / S

3750 GOTO 3770

3760 R(I) = C(I) / S

3770 NEXT I

3780 RETURN

3790 PRINT "NO HUBO CONVERGENCIA EN EL CALCULO DE EL PUNTO DE BURBUJA O ROCI0": STOP : RETURN

4000 REM

<< SUBROUTINA QUE ESTIMA TEMPERATURA Y COMPOSICION INICIAL >>

4100 T = 400

4110 DT = 0

4120 SS0 = 0

4130 SS = 0

4140 FOR I = 1 TO N

4150 PVAF = P(I) \* EXP (5.3727 \* (1 + K(I)) \* (1 - T(I)) / T)

4170 IF SS = 4 THEN 4100

4180 C(I) = R(I) \* PVAF

4190 GOTO 4110

4190 C(I) = R(I) / PVAF

4110 SS0 = SS0 + C(I)

4120 SS = SS + C(I) \* T(I) \* (1 + K(I))

4130 NEXT I

```

4140 IF BR = 4 THEN 4190
4150 SUM = SUMA / F
4160 DS = DS * 0.3727 / F
4170 T = ( 1 / T + SUMA * LOG (SUMA) / DS )
4180 GOTO 4220
4190 SUM = SUMA * F
4200 DS = DS * 0.3727 * F
4210 T = ( 1 / T + SUMA * LOG (SUMA) / DS )
4220 IF ABS (SUMA - T) < = 10 THEN 4260
4230 IF IT > 20 THEN PRINT "NO HUBO CONVERGENCIA PARA EL ESTIMACION INICIAL DE T"; STOP ; GOTO 4300
4240 IT = IT + 1
4250 GOTO 4220
4260 FOR I = 1 TO N
4270 IF BR = 4 THEN 4300
4280 U(I) = DN(I) / (F * SUM)
4290 GOTO 4310
4300 U(I) = DN(I) * F * SUM
4310 NEXT I
4320 PRINT "ESTIMACIONES INICIALES "; PRINT ; PRINT "T="; FN DLT * TCF - UT; "F="; F * UF; "SE U=";
4330 REM
<< SUBROUTINA DE ESTIMA FRECUENCIA Y COMPOSICION INICIAL >>

4310 SUMA = 0
4320 FOR I = 1 TO N
4330 PVAF = P(VI) * EXP (0.3727 * (VI + WVI)) * (VI - TCF) / T
4340 IF BR = 1 THEN DN(I) = VI * PVAF
4350 IF BR = 2 THEN DN(I) = VI * PVAF
4360 SUMA = SUMA + DN(I)
4370 NEXT I
4380 IF BR = 2 THEN 4400
4390 FOR I = 1 TO N
4400 U(I) = DN(I) / SUMA
4410 NEXT I
4420 F = SUMA
4430 GOTO 4310
4440 FOR I = 1 TO N
4450 U(I) = DN(I) * SUMA
4460 NEXT I
4470 F = 1 / SUMA
4480 PRINT "ESTIMACIONES INICIALES "; PRINT ; PRINT "T="; FN DLT * TCF - UT; "F="; F * UF; "SE U=";
4490 REM
<< SUBROUTINA DE INGRESO DE LAS PROPIEDADES DEL LIQUIDO Y VAPORES >>
5010 LV = 1; GOSUB 7000;ZL = ZAL; HSL = HSL; SE; FOR I = 1 TO N;FL(I) = F(I); NEXT I
5020 LV = 2; GOSUB 7000;ZV = ZHV; HSV = HSV; SE; FOR I = 1 TO N;FV(I) = F(I); NEXT I
5030 RETURN
7000 REM
<< SUBROUTINA DE LAS PROPIEDADES TERMODINAMICAS >>
7010 RHS = 1.9871446F = 1.9871446; IF BR = 0 THEN RHS = 8.31446
7020 IF LV = 1 THEN FOR I = 1 TO N;H(I) = H(I); NEXT I
7030 IF LV = 2 THEN FOR I = 1 TO N;H(I) = H(I); NEXT I
7040 GOSUB 7000;HML = HML; DML = DML; DM
7050 ON EI GOSUB 7000;SML
7060 SC = SM * CMCL = SC * SC * * SM * ENH = Z + Z - SC;SD = SCR * DL
7070 L = AM * LOG (V) = SD / (Z - SD) / SD;ZEM = Z - SM;HLS = LOG (ZM;ZEM = EM / ZEM
7080 HUA = Z * H - D;HAD = Z * EM * H / HUA;H = EM * H + Z * AM * G / HUA; BL
7090 CACP = G;CCCP = G;CCCP = G;CCCP = G;CCCP = G
7100 FOR I = 1 TO N
7110 CACP = CACP + X(I) * CACP(I);CCCP = CACP + X(I) * CACP(I)
7120 CCCP = CCCP + X(I) * CCCP(I);CCCP = CCCP + X(I) * CCCP(I)

```

```

7130 CPOP = CPOP + (X1) * (CSPN1)/CPOP = CPOP + (X1) * (CSPN1) - CPOP * LOG (X1/1)
7140 P1 = - AL2B + GB(V) * ZM + L * B(ALL) + AD * (DB(V) + DB(L)) - AD * (BC * (GB(V) + GB(L)) + 2 * (EM * DB(V) +
EM * DB(L)))
7150 F1(L) = EXP (F1)
7160 NEXT I
7170 T2 = T * T: T3 = T2 * T: T4 = T3 * T
7180 H = CPOP + CACP * T + CBCP * T2 / 2 + CDDP * T3 / 3 + CDDP * T4 / 4
7190 H = RHS * (H / RCP + T * (Z - 1 + (Z - B(HT) * L))
7200 SE = CPOP + CACP * LOG (T) + CBCP * T + CDDP * T2 / 2 + CDDP * T3 / 3
7210 SE = RHS * (SE / RLP + AL2B - B(HT) * L - LOG (P))
7220 RETURN
8000 REM
<< RESOL. ANALITICA PARA EL CALCULO DEL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD ZETA >>
8010 DEF FN F(X) = - ATN (X) / SUR - X * X + (X) + 1.5758
8020 P1 = FN F(X) - 0.5 * D1 = 1 / 3
8030 CA = A - B + C + (B * D + C * D + 1) * DA = 1 - D * RA = B * (A - D - D * B) * RA = B * CA - (CA * D)
8040 BB = - (A * B) + 4.5 * CA * CA - 15.5 * RA * RA = AA * B * B - 3B * BB + AA
8050 DN = SUR * (D - 2) * D * D * D * D * D
8060 P1 = FN F(X) - BB / SUR * (AA) / 3
8070 OR LV 8070 GOTO 8100
8080 Z = (DA + 2 * SUR * (AA) * LOG (F1 + P1)) / 3
8090 IF D < B THEN 8090
8100 Z = (DA + 2 * SUR * (AA) * LOG (F1)) / 3
8110 GOTO 8090
8120 AA = SUR * (D * D) - BB * RA * DA = - BB - AA
8130 DN = SUR * (D - 2) * D * D * D * D * D * D
8140 BA = - (A * D)
8150 GOTO 8130
8160 BA = 0
8170 GOTO 8130
8180 BA = BA * D1
8190 DN = SUR * (DA) + D * D * D * D * D * D * D * D
8200 CA = - (A * D)
8210 GOTO 8030
8220 CA = 0
8230 GOTO 8030
8240 CA = CA * D1
8250 Z = EA + BA + CA * D1
8260 RETURN
8300 REM
<< RESOLUCION NUMERICA PARA EL CALCULO DEL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD ZETA >>
8310 DEF FN F(X) = X * B - CA * X * X + DA * X * X + RA
8320 DEF FN DF(X) = B * X * X - 2 * DA * X + DA
8330 DEF FN DD(X) = B * X - 2 * DA
8340 D1 = 1 - D
8350 CA = A - C - B * (B + C + D - 1)
8360 RA = B * (A - D - D * B)
8370 IF (DA > = ((DA / 3) / 3) THEN 8370
8380 IF (RA > = ((DA / 3) / 3) AND LV = 2 THEN 8340
8390 IA = (DA - SUR * (DA * 2) - B * DA) / 3
8400 Z = (DA + SUR * (DA * 2) - B * DA) / 3
8410 FA = FN F(IA)
8420 FE = FN F(Z)
8430 IF LV = 1 THEN 8340
8440 IF FE < 0 THEN 8340
8450 Z = ZB
8460 Z1 = (1/6) * B * B * Diff = D * B - (B * B + B * (C + D)) * Z1 + C * Z1 * Z1 - (B + C) * Z1 - A * B * RA = (Z1
* B) - (Z1 * 2) + A * Z1
8470 K = 1

```



```

6680 FK = (K ^ 3) * Q0 + (K ^ 2) * FF + k * G0 + KR
6690 IF ABS (FK) <= 1E - 8 THEN 6730
6700 DR = 5 * K * K * Q0 + 2 * K * FF + 40000 = 5 * K * Q0 + 2 * FF
6710 K = K - ((2 * DR * FK) / (2 * (DR ^ 2) + FK * KR))
6720 GOTO 6680
6730 S = 5 * K * EM = 5 * C * K * DM = 5 * D * K * DM = D: GOTO 6680
6740 IF FA > 0 THEN 6750
6750 I = IA: GOTO 6680
6760 FD = FN * DA * D
6770 IF FS < 0 THEN 6640
6780 I = 6
6790 FD = FN * FD
6800 IF ABS (FE) <= 1E - 8 THEN 6830
6810 DE = FN * DE / 100 = FN * DE
6820 I = I - ((2 * DE * FD) / (2 * (DE ^ 2) + FE * DE))
6830 GOTO 6740
6840 I = 1
6850 GOTO 6740
6860 IF I <= 8 THEN I = I - 1E - 9 * 8: INVERSE: PRINT "O ES MENOR O IGUAL A 8: NORMAL: STOP
6870 RETURN
10000 END
<< SUBROUTINA QUE CALCULA LOS PARAMETROS DE MEZCLA >>
10010 DM = QDM * JCM = 0
10020 FI = F / TRAFI = 500 * F / I
10030 FOR I = 1 TO NTR = I / 10: ISTRAT = 500 * ITR
10040 IF EV = 1 THEN 10050
10050 IF EV = 5 THEN 10070
10060 IF EV = 6 THEN 10130
10070 AFP2 = 1 + M1 * (1 - STR2) * DT1 = - M1 * RTA2 / AFP1: GOTO 10080
10080 AFP2 = (1 / TR) * (Q2) * DT1 = - 1 * (2 * AFP2 * AFP1 * RTA2) / GTO 10090
10090 IF TR > 1 THEN 1010
10100 AUX = 5 * TR - 5 * M1 = 1000 * M1 + AUX * AUX * 2 * AFP2 = 1 - 500 * (1 - RTA2)
10110 DT1 = (1 - 500 * RTA2 - 2 * (1 - RTA2) * AUX * TR * 7) / AFP1: GOTO 10090
10120 EA = M1 * ((K - 5 * M1) / 2) * 2 * AFP2 = 1 + 500 * (1 - RTA2) * DT1 = - 500 * RTA2 / AFP1: GOTO 10090
10130 IF TR <= 1 THEN 10140
10140 AFP2 = 500 * (1 - 0.925E - 1.500 * M1) * (500 * TR) = 1001500 - 500 * M1 * (1 + 500 * TR) * 2
10150 DT1 = (1 - 0.925E - 1.500 * M1) * (500 * TR) = 1001500 - 500 * M1 * (1 + 500 * TR) * 2 / AFP2: GOTO 10090
10160 IF M1 <= 0.12 THEN 10170
10170 AM = 0.41311 + 1.14657 * M1 * DM = 0.0118: GOTO 10190
10180 AM = 0.5 + 0.27767 * M1 + 2.17125 * (M1 - 0.1) * DM = - 0.922 - 0.500 * M1 - 0.150 * DM * 10
10190 AFP2 = (1 + AM * (1 - STR2) - DM * (1 - I / TR)) * DT1 = - 2 * AM * STR2 * 2 + DM * TR * AFP2
10200 M21 = RAC1 * AFP2 * RT21 * DT1 = 2 * PT * DT1 = 0.1 * RT21 * DT1 = DT1 * PT
10210 SM = SM + M1 * C * DM * DM = CM + M1 * C * DM * DM = CM + M1 * C * DM * DM: NEXT I
10220 AM = GDM * C: GDM = 0: FOR I = 1 TO N
10230 AUX = M1 * M21 * AM * AM = AM * M1 * AM * AM * DM * DM = DM * DM * M1 * M1 * DM * DM * C
10240 FOR J = 1 TO N: SA = M1 * M21 * M1 - 2 * (J * J) * SA = DM * M1 * SA
10250 IF J <= I THEN 10270
10260 AM = AM + 2 * SA * AM * DM * DM = DM * M1 * SA * (DT1) + DT1 * J
10270 NEXT J
10280 DM1 = 2 * DM1 * M21 * DM1: NEXT I
10290 FOR I = 1 TO N: DC1 = DM1 / SM * DC1 = DM1 / SM * DC1 = DM1 / SM * DC1: AM1: NEXT I
10300 DM1 = DM1 / AM1: RETURN

```







```

910 PRINT "ENTROPIA (J): TAB: 14:15L: TAB: 20:16V: PRINT " (YUS4: "
920 PRINT "DETA (J): TAB: 15:16L: TAB: 30:17V: PRINT : PRINT
930 PRINT "PROPIEDADES DE LA ALIMENTACION (J): PRINT "ENTALPIA =*HF * TCF: "YUS4: PRINT "ENTROPIA =*SIF: "YUS4:
PRINT : PRINT
940 PRINT "¿DESEA HACER OTRO CALCULO? (S=SI/N=NO): PRINT
950 PRINT "RESPUESTA=**"
960 GET B$
970 IF B$ = "N" THEN PRINT B$11 = FRE (4): GOTO 110
980 PRINT "N": PRINT : PRINT "« PARA LOS CALCULOS DE LAS PROPIEDADES TERMODINAMICAS SE UTILIZA LA ECUACION DE LA
"TABLA DE "EQU8" »"
990 PRINT : PRINT " « PROGRAMA TERMINADO »": END
100 REM

« DETERMINACION DEL BLV »
110 F = P*ST = TA
120 ON FF GOTO 700,710,720,730,740,750,760,770,780,790,800
130 IF FE > = TE THEN 200
140 IF F < = TE THEN 200
150 IF T > = TE THEN 200
160 F = (T + TE) * 10 - TE
170 GOTO 150
180 BL = 814*V = 844*BL = 211*V = 24
190 IF BL > = 50 THEN 200
200 IF BL < = 10 THEN 110
210 IF BL > = 30 THEN 120
220 FV = (F - BL) * 10 - FV = BL
230 GOTO 200
240 IF FV < 0.999 THEN 110
250 IF FV > 0.999 THEN 120
260 GOTO 200
270 IF F1 > = F2 THEN 200
280 IF F > = F2 THEN 110
290 IF F < = F2 THEN 120
300 FV = (F - F2) * 10 - FV = F2
310 GOTO 200
320 BL = 414*V = 444*BL = 211*V = 24
330 IF BL > = 50 THEN 200
340 IF BL < = 10 THEN 110
350 IF BL > = 30 THEN 120
360 FV = (F - BL) * 10 - FV = BL
370 F = F2 + FV = FE - FE
380 GOTO 150
390 BL = 514*V = 544*BL = 211*V = 24
400 IF BL > = 50 THEN 200
410 IF BL < = 10 THEN 110
420 IF BL > = 30 THEN 120
430 FV = (F - BL) * 10 - FV = BL
440 F = F2 + FV = FE - FE
450 GOTO 150
460 BL = 614*V = 644*BL = 211*V = 24
470 IF BL > = 50 THEN 200
480 IF BL < = 10 THEN 110
490 IF BL > = 30 THEN 120
500 FV = (F - BL) * 10 - FV = BL
510 GOTO 100
520 REM
« LA ALIMENTACION ES LIQUIDA. FV=0 »
1100 PRINT : PRINT "LA ALIMENTACION ES LIQUIDA": PRINT

```



```

    << CALCULO DE LOS INCREMENTOS EN T Y FM/VA POR NEWTON-RAPHSON >>
1830 IF FF = 1 THEN 1930
1840 T = T + 0.2: GOOSB GOOSHT = 1 - 0.2:APS = 0:VPS = 0
1850 FOR I = 1 TO N(K1) = FL(I) / FV(I) - 1:APS = APS + Z(I) / (K1 * FV + 1):VPS = (PS + Z(I) * FL(I) / (FV(I) * (K1 * FV + 1))):NEXT I
1860 FD = (PS - VPS):TFD = (FD - F) * 5
1870 ON FF GOTO 1930,1890,1900,1880
1880 DT = - F / TFD:DFV = 0: GOTO 2010
1890 GP = (FV * MV * (PS + (1 - FV) * HL * APS) / HF - 1):GOTO 1910
1900 GP = (FV * SV * (PS + (1 - FV) * SL * APS) / SF - 1
1910 TGD = (GP - G) * 5:DET = HD * TGD - TFD * ABS:DFV = - (F + TGD - G * TFD) / DET:DT = - (G * HD - F * HD) / DET
1920 GOTO 2010
1930 DFV = - F / ABS:DT = 0:FM = FV + DFV:V1 = 0
1940 S1 = 0:ST = 0:AD = 0
1950 FOR I = 1 TO N(K1) = K(I) - 1:U(I) = Z(I) / (K1 * FM + 1):W(I) = K(I) * U(I):SA = SA + U(I):S1 = S1 + W(I)
1960 AD = HD - (W(I) - 1) * Z(I) * 2 / Z(I):NEXT I
1970 FD = S1 - SA
1975 IF ABS(FD) < TT * 0.1 THEN 2010
1980 IF IT > 20 THEN 2000
1990 FM = FM + FD / ABS:V1 = V1 + 1:GOTO 1940
2000 PRINT "NO HUBO CONVERGENCIA PARA LA ROTINA INTERNA PARA LAS COMPOSICIONES DEL LIQUIDO Y VAPORES EN EL FLASH ISO
TERMINAR GOTO 2250
2010 FOR I = 1 TO N(K1) = U(I) / SA:V(I) = W(I) / S1:NEXT I
2020 TN = T + V1 * FM:FG = FG
2030 T = TN + VA * DT:PV = VN + VA * DFV
2040 IF PV > 1 THEN PV = 0.999
2050 IF PV < 0 THEN PV = 0.001
2060 IF T > TO THEN T = 0.99 * TO
2070 IF T < TB THEN T = TB + 1.01
2080 IF DL = 0 THEN IT = IT + 1
2090 GOTO 1830
2100 REM
    << SALIDA NORMAL DEL PROGRAMA >>
2110 FOR I = 1 TO N(K1) = U(I) / SA:V(I) = W(I) / S1:NEXT I
2120 IF FF < = 4 AND FF > 2 THEN HF = HL + FV * (PV - HL)
2130 IF FF > = 5 AND FF < = 6 THEN HF = HL + FV * (SV - HL)
2140 IF FF < = 4 AND FF < = 3 THEN SF = SL + FV * (SV - SL)
2150 IF FF > = 5 AND FF < = 7 THEN SF = SL + FV * (SV - SL)
2160 IF FF = 1 OR FF = 8 THEN 2210
2170 IF FF > = 0 THEN 2240
2180 IF T > = 700 THEN 2250
2190 IF T < = 90 THEN 2250
2200 IF FF = 4 THEN 2230
2210 IF PV < 0 THEN 2250
2220 IF PV > 1 THEN 2250
2230 RETURN
2240 IF P > = 1000 THEN 2260
2250 IF P < = 1E - 9 THEN 2250
2260 IF FF = 8 THEN RETURN
2270 GOTO 2210
2280 PRINT "NO SE ENCONTRO SOLUCION": END
2290 IF IT = 0 THEN 2330
2300 IF FG < ANFD THEN 2350
2310 VA = - VA / 2:V1 = 1
2320 IF ABS(VA) > 0.3 THEN 2350
2330 V1 = 0:VA = 1
2340 IF FF = 5 THEN 2450
2350 REM

```

```

<< CALCULO DE LOS INCREMENTOS EN P Y FV=V/F POR NEWTON-RAPHSON >>
1300 P = P * 1.01: GOSUB 6000:P = P / 1.01:APS = 0:IPS = 0
1310 FOR I = 1 TO N:K1 = FL(I) / FV(I) - 1:KPS = XPS + Z(I) / (K1 * FV + 1):KIFS = IPS + Z(I) * FL(I) / (FV(I) * K1
1 * FV + 1):NEAT I
1320 FD = IPS - APSP:PDF = (FD - F) / (0.01 * P)
1330 ON (FF - 4) GOTO 2450,2410,2420,2400
1340 DP = - F / PFD:DVF = 0:GOTO 2530
1410 GP = (FV * HV * IPS + (1 - FV) * HC * XPS) / HF - 1:GOTO 2450
1420 GP = (FV * SV * IPS + (1 - FV) * BL * XPS) / SF - 1
1430 FGD = (GF - G) / (0.01 * P):DET = HLD * FGD - PFD * AGD:DVF = - (F * POL - G * FFD) / DET:DVF = - (G * AGD -
F * AGD) / DET
1440 GOTO 2530
1450 DVF = - F / AGD:DF = 0:FM = FV + DVF:II = 0
1460 SA = 1:SI = 0:AS = 0
1470 FOR I = 1 TO N:K1 = K(I) - 1:K2(I) = Z(I) / (K1 * FM + 1):K3(I) = K(I) + U(I):S1 = SA + U(I):S2 = SI + K3(I)
:K4(I) = K(I) - K3(I) - U(I):S3 = S1 + Z(I):NEAT I
1480 FE = SI - SA
1490 IF ABS(FD) < TT * 0.1 THEN 2530
1500 IF II > 20 THEN 2530
1510 FM = FM - FD / AGD:II = II + 1:GOTO 2450
1520 PRINT "NO HUBO CONVERGENCIA PARA LA ROUTINA INTERNA PARA LAS COMPOSICIONES DEL LIQUIDO Y VAPORES EN EL FLASH 160
SERVIDO":GOTO 2300
1530 FOR I = 1 TO N:K(I) = U(I) / S1:II = N:K(I) / S1:NEAT I
1540 FN = FVN = FV:K(FN) = FV:K(FN) = FVN = 0
1550 P = FN * VA * GF:FV = VN * VA * DVF
1560 IF FV > 1 THEN FV = 0.999
1570 IF FV < 0 THEN FV = 0.001
1580 IF P > PE THEN P = PE * 0.99
1590 IF P < PD THEN P = PD * 1.01
1600 IF II = 0 THEN II = II + 1
1610 GOTO 1530
2010 HOME : PRINT : PRINT "EXISTE ERROR EN LOS DATOS,VERIFIQUE P.F.": PRINT : PRINT "NO SE DETERMINO EL V": END
5000 REM
<< SUBROUTINA QUE CALCULA LAS PROPIEDADES DE UNA SOLA FASE >>
5010 GOSUB 7000:IS = IHS = H:IS = SE
5020 IF FF > = 5 THEN 5100
5030 IF FF = 2 OR FF = 0 THEN 5050
5040 HF = H5:SF = S5:ZF = Z5:RETURN
5050 TS = T:IT = 0:PRINT "PROCESO ITERATIVO EN PROPIET":PRINT
5060 IF FF = 3 THEN 5080
5070 EER = HS - HF:T = T - EER * (T - TS) / (HS - H5):EER = EER / HF:GOTO 5100
5080 EER = (SS - SF) / SF
5090 PRINT : PRINT : PRINT "FF=":FF:PRINT "LV=":LV:PRINT "IT=":IT:PRINT "T=":T * TCF - UT:PRINT "EER=":EER:PR
INT "HS=":HS / TCF:PRINT "S5=":S5:PRINT "HF=":HF / TCF:PRINT "SF=":SF:PRINT : PRINT
5100 IT = 1:IF LV = 1 THEN IT = - 1
5110 T = T + DT
5120 GOSUB 7000:HC = H:SC = SE
5130 IF FF = 3 THEN 5150
5140 EER = HC - HF:T = T - EER * (T - TS) / (HC - H5):EER = EER / HF:GOTO 5100
5150 EER = SC - SF:T = T * EXP(EER * (LOG(T) / TS)) / (SC - S5):EER = EER / SF
5160 PRINT : PRINT "FF=":FF:PRINT "LV=":LV:PRINT "IT=":IT:PRINT "T=":T * TCF - UT:PRINT "EER=":EER:PRINT "HC="
:HC / TCF:PRINT "SC=":SC
5170 IF ABS(EER) < TT THEN 5200
5180 IF IT > = 20 THEN PRINT "NO HUBO CONVERGENCIA EN PROPIET":STOP:RETURN
5190 IT = IT + 1
5200 IF LV = 1 AND I > = TS THEN T = TS - 10

```



```

5210 IF LV = 2 AND T < = T5 THEN T = T5 + 10
5220 IF T < 50 THEN T = 50
5230 IF T > 700 THEN T = 700
5240 GOTO 5120
5250 IF FF = 3 THEN HF = HC: RETURN
5260 SF = SC: RETURN
5270 IF FF = 6 OR FF = 7 THEN 5290
5280 HF = HS+SF / 35: IF = 15: RETURN
5290 PS = P: IT = 0: PRINT "PROCESO ITERATIVO EN PROPIED": PRINT
5300 IF FF = 7 THEN 5320
5310 EER = (HS - HF) / HF: GOTO 5330
5320 EER = (SS - SF) / SF
5330 PRINT: PRINT: PRINT "FF=":FF: PRINT "LV=":LV: PRINT "IT=":IT: PRINT "P=":P * UP: PRINT "EER=":EER: PRINT "H
5=":HS / TCF: PRINT "SS=":SS: PRINT "HF=":HF / TCF: PRINT "SF=":SF: PRINT: PRINT
5340 SF = 1.01 * P: IF LV = 2 THEN SF = - 1.01 * P
5350 P = P * SF
5360 0000 7000:HC = H+10: SE
5370 IF FF = 7 THEN 5390
5380 EER = HC - HF: P = P - EER * (P - PS) / (HC - HS): EER = EER / HF: GOTO 5400
5390 EER = SC - SF: P = P - EER * (P - PS) / (SS - SC): EER = EER / SF
5400 PRINT: PRINT "FF=":FF: PRINT "LV=":LV: PRINT "IT=":IT: PRINT "P=":P * UP: PRINT "EER=":EER: PRINT "HC=":HC /
TCF: PRINT "SC=":SC
5410 IF ABS(EER) < IT THEN 5470
5420 IF IT > 20 THEN PRINT "NO HUBO CONVERGENCIA EN PROPIED": STOP: RETURN
5430 IT = IT + 1
5440 IF LV = 1 AND P < = PS THEN P = PS * 1.1
5450 IF LV = 2 AND P > = PS THEN P = PS * 0.9
5460 IF P < 1E - 6 THEN P = 1E - 6
5470 IF P > 1000 THEN P = 1000
5480 GOTO 5360
5490 IF FF = 7 THEN HF = HC: RETURN
5500 SF = SC: RETURN
0000 REM:
<< SUBROUTINA QUE CALCULA LAS PROPIEDADES DEL LIQUIDO Y VAPOR >>
0010 LV = 1: 0000 7000
0020 ZL = Z+HL = H+SL: SE
0022 IF ZL < 0: THEN ZL = 0
0024 IF ZL > 12 THEN ZL = 12
0030 FOR I = 1 TO N(FVL): F(I): NEXT I
0040 LV = 2: 0000 7000
0050 ZV = Z+HV = H+SV: SE
0052 IF ZV < 20 THEN ZV = 20
0054 IF ZV > 24 THEN ZV = 24
0060 FOR I = 1 TO N(FV1): F(I): NEXT I
0070 RETURN

```



```

100 PLED = P1
110 IF (P - P1) < 0 THEN PLED = - P1
120 LED = PLED / (P - P1) * PLED = (T - TA) * LEDTA = T1 + T + PLED
130 SA = 0: FOR I = 1 TO N/2: SA = (A(I) - A(N-I)) * LEDTA(I) = A(I) * A(I) = A(I) * PLED
140 IF A(I) < 0 THEN A(I) = - T
150 IF A(I) > 1 THEN A(I) = 1/ABS
160 SA = SA + A(I): NEXT I
170 FOR I = 1 TO N/2: SA = A(I) / SA: NEXT I
180 PA = P1 + P - PLED: GOTO 270
190 END

<< SURVA DE SURDURA >>
200 PRINT " << SURVA DE SURDURA >>": PRINT: PRINT: P1 = P1 + P1 + P1 + P1 + P1 + P1 + P1 + P1
210 FOR I = 1 TO N/2: SA = 0: NEXT I
220 SA = 0: FOR I = 1 TO N/2: SA = (A(I) - A(N-I)) * SA = T
230 FOR I = 1 TO N/2: SA = A(I) * SA: NEXT I
240 P = PA + P1 + P1 + P1 + P1: SA = 0: FOR I = 1 TO N/2: SA = A(I): NEXT I
250 SA = 0: FOR I = 1 TO N/2: SA = SA
260 IF (A(I) - A(I)) < 0 THEN SA = 0
270 T1 = P1 + P1 + P1 + P1 + P1
280 IF (A(I) - A(I)) < 0 THEN T1
290 TLED = T1
300 IF (T - T1) < 0 THEN TLED = - T1
310 LED = TLED / (T - T1) * PLED = (P - P1) * LEDTA = P1 + P1 + PLED
320 SA = 0: FOR I = 1 TO N/2: SA = (A(I) - A(N-I)) * LEDTA(I) = A(I) * A(I) = A(I) * PLED
330 IF A(I) < 0 THEN A(I) = - T
340 IF A(I) > 1 THEN A(I) = 1/ABS
350 SA = SA + A(I): NEXT I
360 FOR I = 1 TO N/2: SA = A(I) / SA: NEXT I
370 TA = T1 + T + TLED
380 PF = 0: FOR I = 1 TO N/2: PF = 0
390 GOTO 390
400 PLED = P1
410 IF (P - P1) < 0 THEN PLED = - P1
420 LED = PLED / (P - P1) * PLED = (T - TA) * LEDTA = T1 + T + PLED
430 SA = 0: FOR I = 1 TO N/2: SA = (A(I) - A(N-I)) * LEDTA(I) = A(I) * A(I) = A(I) * PLED
440 IF A(I) < 0 THEN A(I) = - T
450 IF A(I) > 1 THEN A(I) = 1/ABS
460 SA = SA + A(I): NEXT I
470 FOR I = 1 TO N/2: SA = A(I) / SA: NEXT I
480 PA = P1 + P1 + P1 + PLED: GOTO 270
490 END

<< SURVA (VFI) CONSTANTE >>
500 P1 = P1 + P1 + P1 + P1
510 SA = 0: FOR I = 1 TO N/2: SA = 0
520 SA = 0: FOR I = 1 TO N/2: SA = (A(I) - A(N-I)) * SA = P1 + P1 + P1 + P1 + P1 + P1 + P1 + P1
530 SA = (A(I) - A(N-I)) * SA + A(I) * SA = SA + A(I) * SA: NEXT I
540 FOR I = 1 TO N/2: SA = A(I) * SA: NEXT I
550 PF = 0: FOR I = 1 TO N/2: PF = 0
560 FOR I = 1 TO N/2: SA = A(I) * SA: NEXT I
570 P = PA + P1 + P1 + P1 + P1 + P1 + P1 + P1
580 SA = 0: FOR I = 1 TO N/2: SA = (A(I) - A(N-I)) * SA = P1 + P1 + P1 + P1 + P1 + P1 + P1 + P1
590 SA = (A(I) - A(N-I)) * SA + A(I) * SA = SA + A(I) * SA: NEXT I
600 FOR I = 1 TO N/2: SA = A(I) * SA: NEXT I
610 FOR I = 1 TO N/2: SA = A(I) * SA: NEXT I
620 PF = 0: FOR I = 1 TO N/2: PF = 0

```



100 REM

<< ESTE PROGRAMA REALIZA LA SIMULACION >>

```

150 HOME : PRINT "1.- NO UTILIZARA IMPRESORA": PRINT "2.- UTILIZARA IMPRESORA": PRINT "TECLEE NUMERO DE OPCION:";
160 GET M: PRINT : IF M = 1 OR M = 2 GOTO 150
200 M = M - 1
250 G = DATA (M): IT = IE + G
300 DEF FN D1(X) = INT (X * 100 + 0.5) / 100: DEF FN D2(X) = INT (X + 100000 + .5) / 100000
350 PRINT CHR# (4) "PRN":M
400 REM
    
```

<< LECTURA DE DATOS DE DISCO >>

```

450 HOME : PRINT SPC(11): "-----": PRINT SPC(11): "LECTURA DE DATOS": PRINT SPC(11): "-----"
-----": PRINT SPC(19): "": PRINT SPC(19): "M"
500 FLA(1) = "LIQUIDO SUCIERFRIADO": FLA(2) = "LIQUIDO SATURADO": FLA(3) = "MEZCLA LIQUIDO VAFGA": FLA(4) = "VAFGA SATU
RADO": FLA(5) = "VAFGA SUCIERFRIADO"
550 PRINT D1: "OPCION POP. LECS": PRINT D1: "READ POP. POP": INPUT N, E, D, C, U, F, U, T, U, H, U, S, U, F, U, T, U, T, O, P, C, M: P
RINT D1: "PRN"
600 DIM T(10), P(10), M(10), S(10), C(10), D(10), E(10), F(10), U(10), H(10), U(10), S(10), U(10), T(10), T(10), O(10), P(10), C(10), M(10),
C(10), M(10), F(10), D(10), E(10), F(10), U(10), H(10), U(10), S(10), U(10), T(10), T(10), O(10), P(10), C(10), M(10)
650 FOR I = 1 TO N: PRINT D1: "READ POP. POP": INPUT M(I), T(I), P(I), S(I), C(I), D(I), E(I), F(I), U(I), H(I), U(I), S(I), U(I), T(I), T(I), O(I), P(I), C(I), M(I)
: P(10), C(10), M(10), F(10), D(10), E(10), F(10), U(10), H(10), U(10), S(10), U(10), T(10), T(10), O(10), P(10), C(10), M(10)
700 PRINT D1: "LECS"
750 IF M(I) = "NO" THEN 1000
800 PRINT D1: "OPEN MATRIX-KU S"
850 FOR I = 1 TO N: FOR J = 1 TO N: PRINT D1: "READ MATRIX-KU S": INPUT A(I, J): NEXT J
900 PRINT D1: "LECS"
950 REM
    
```

<< CARACTERISTICAS DE OPERACION >>

```

1000 HOME : PRINT : PRINT "PRESION DE OPERACION ("UTS")=": INPUT P: F = F / U: GOTO 910
1100 M(I) = 1: M(10) = 1: IF UH = 0 THEN M(1) = 2: M(10) = 4: 94
1150 PRINT : INPUT "NUMERO DE ETAPAS DE DESTILACION=": N: PRINT : PRINT "FLUJO DESTILADO ("UF")=": D=: INPUT I
: IT = IT * M(I): PRINT : INPUT "TEMPERATURA DE OPERACION (LW)"=: W
1150 D1 = 1: M(1) * 1.1 * W + 1.1 * M(2) * W + 1.1 * M(3) * W + 1.1 * M(4) * W + 1.1 * M(5) * W + 1.1 * M(6) * W + 1.1 * M(7) * W + 1.1 * M(8) * W + 1.1 * M(9) * W + 1.1 * M(10) * W
+ 1.1 * M(1) * W + 1.1 * M(2) * W + 1.1 * M(3) * W + 1.1 * M(4) * W + 1.1 * M(5) * W + 1.1 * M(6) * W + 1.1 * M(7) * W + 1.1 * M(8) * W + 1.1 * M(9) * W + 1.1 * M(10) * W
1200 FRNE + D = IT * W: D = D * W: TS
1250 D1 = M(1) * 1.1 * W + 1.1 * M(2) * W + 1.1 * M(3) * W + 1.1 * M(4) * W + 1.1 * M(5) * W
1300 PRINT : INPUT "NUMERO DE ETAPAS DE ALIMENTACION=": M: N
1350 FOR VL = 1 TO N: HOME : PRINT "CARACTERISTICAS DE LA ALIMENTACION "VL
1400 PRINT : INPUT "ALIMENTACION EN LA ETAPA NUMERO ("PUJ)=": J: PRINT "FLUJO ALIMENTADO ("UFJ)=": FJ: INPUT FJ
: J(J, P) = FJ: J * M(J, P): J: PRINT "PRESION EN LA COMPOSICION ("FRACTION WJ)"
1450 PRINT D1: "F = F * FRACTION": F = F * FJ: FOR K = 1 TO N: PRINT "AF ("NKJ")=": FJ: INPUT AF(J, K): FJ = FJ + AF(J, K) * N
EXT K: FOR K = 1 TO N: AF(J, K) = AF(J, K) / S: NEXT K: GOTO 1100
1500 CALL = 750: PRINT "TEMP. DE RESOL=": FN D1: T = T - UT: "UT": PRINT : PRINT : PRINT "TEMP. DE BURBUJEA"
: FN D1: T = T - UT: "UT": PRINT : PRINT : PRINT "TEMP. DE ALIMENTACION": TA ("UT")=": "": INPUT TF(J, T)
J) = (TF(J) + UT) / TCF
1550 IT = 1: IF TF(J) > TS THEN FOR IC = 1 TO N: IC) = AF(J, IC): PRINT IC: LV = 1: T = TF(J): GOTO 2700: HF(J)
= H: GOTO 1600
1600 IT = 2: IF TF(J) = TS THEN HF(J) = H: GOTO 1600
1650 IT = 4: IF TF(J) = TD THEN HF(J) = H: GOTO 1650
1700 IT = 5: IF TF(J) > TD THEN FOR IC = 1 TO N: IC) = AF(J, IC): NEXT IC: LV = 2: T = TF(J): GOTO 2700: HF(J)
= H: GOTO 1650
1750 IT = 3: GOTO 1200: GOTO 1900
1800 PRINT : PRINT FLA(IT): FOR IC = 1 TO N: AF(J, IC) = AF(J, IC): NEXT IC: GOTO 1950
1850 PRINT (FR(J) = 1): PRINT FLA(IT): FOR IC = 1 TO N: AF(J, IC) = AF(J, IC): NEXT IC: GOTO 1950
1900 CALL = 750: PRINT FLA(IT): "FRACCION EVAPORADA=": (FR(J)
1950 IT(J) = IT: PRINT : PRINT "PAGA CONTINUAR PRESIONE CUALQUIER TECLA": GET AA: NEXT VL
    
```

```

2000 HOME : PRINT : INPUT "NUMERO DE CORRIENTES LIQUIDAS LATERALES, DESCARGADAS=?":NL: IF NL = 0 GOTO 2100
2050 FOR I = 1 TO NL: PRINT : PRINT "ETAPA EN LA QUE SE DESCARGA LA CORRIENTE NUMERO "I": ": PRINT : INPUT "ETAP
A=?":JQ: PRINT : PRINT "FLUJO "I":":DESCARGADO = ": INPUT U(JQ):U(JQ) = U(JQ) * N(JQ) / 50 + U(JQ): NEXT I
2100 HOME : PRINT : INPUT "NUMERO DE CORRIENTES VAPOR LATERALES, DESCARGADAS=?":NV: IF NV = 0 GOTO 2200
2150 FOR I = 1 TO NV: PRINT : PRINT "ETAPA EN LA QUE SE DESCARGA LA CORRIENTE NUMERO "I": ": PRINT : INPUT "ETAP
A=?":JQ: PRINT : PRINT "FLUJO "I":":DESCARGADO=?": INPUT U(JQ):U(JQ) = U(JQ) * N(JQ) / 50 + U(JQ): NEXT I
2200 HOME : PRINT : PRINT "CALOR ADMINISTRADO": PRINT : INPUT "SIN CONSIDERAR CONDENSADOR-RESERVADOR, EN CUANTAS ET
APAS SE ADMINISTRA CALOR ? "M": IF M = 0 GOTO 2300
2250 FOR I = 1 TO M: PRINT : PRINT " ETAPA EN LA QUE SE AÑADE O ELIMINA CALOR ": INPUT JQ: PRINT : PRINT "CA
LOR ADMINISTRADO "Q":":": INPUT Q(JQ):Q(JQ) = Q(JQ) * M: NEXT I
2300 HOME : PRINT : PRINT "SELECCIONA OPCION 1: PRINT "1.- CONDENSADOR TOTAL": PRINT "2.- CONDENSADOR PARCIAL": I
NPUT "SELECCIONA NUMERO DE OPCION":OF
2350 OF = 1 : "CONDENSADOR TOTAL":OF = 2 : "CONDENSADOR PARCIAL"
2400 IF OF = 1 THEN V(0) = V(0) + FRNE + L
2450 IF OF = 2 THEN V(0) = FRNE + V(0) / 2
2500 V(1) = (U(0) + V(0)) * (1 - TC(0)) + (V(0) + U(0)) * R
2550 REM
    << COMPOSICION PERFILES DE TEMPERATURAS >>
2600 PRINT "OPC 14:""PROM"
2650 HOME : PRINT "M": FOR I = 1 TO 36: PRINT "-": NEXT I: PRINT "M": VTAB (2): PRINT "DISTRIBUCION FLUJOS VAPOR
Y TEMPERATURAS": VTAB (3): PRINT "M": FOR I = 1 TO 36: PRINT "-": NEXT I: PRINT "M": VTAB (4)
2700 FOR JQ = NE - 1 TO 0 STEP - 1: U(0) = V(0) + (NE + 1 - JQ) * (NE + 1) * (V(2) - V(3)): FOR IC = 1 TO N(K(JQ))
: U(1) = (U(0) + V(0)) * (1 - TC(0)) + (V(0) + U(0)) * P / P(0): NEXT IC:JQ
2750 REM
    << DISTRIBUCION PERFILES FLUJO DE VAPOR Y FLUJOS CONSTANTES >>
2800 V(1) = (U(0) + V(0)) * (1 - R) / R: FOR I = 2 TO NE + 1: V(I) = V(1) - (FR(1) - IS * P(1 - IS)) / NEXT I
2850 PRINT "OPC 15:""M": PRINT "SFC 15:""M": PRINT "M": FOR I = 1 TO 34: PRINT "M": NEXT I: PRINT "M": PRINT
"-DISTRIBUCION PERFILES TRAPEZOIDALES SFC": PRINT "M": FOR I = 1 TO 34: PRINT "M": NEXT I: PRINT "M"
2900 PRINT "M": SFC(15) = "M": PRINT "M": SFC(15) = "M": PRINT "M": SFC(15) = "M": FOR I = 1 TO 34: PRINT "M": NEXT
I: PRINT "M": PRINT "M": SFC(15) = "CORRECCION TEMP. Y FLUJOS VAPOR": PRINT "M": SFC(15) = "M": FOR I = 1 TO 34: PR
INT "M": NEXT I: PRINT "M"
2950 PRINT "M": SFC(15) = "M": PRINT "M": SFC(15) = "M": PRINT "M": FOR I = 1 TO 34: PRINT "M": NEXT I: PRINT "
M": PRINT "M": SFC(15) = "TEMPERATURE"
3000 PRINT "SFC 15:""M": FOR I = 1 TO 34: PRINT "M": NEXT I: PRINT "M": PRINT "SFC 15:""S1": PRINT "SFC 15:""
S2": PRINT "SFC 15:""S3": FOR I = 1 TO 14: PRINT "M": NEXT I: PRINT "M": PRINT "SFC 15:""FIN DE PROCESO": PRINT
"SFC 15:""M": FOR I = 1 TO 14: PRINT "M": NEXT I: PRINT "M"
3050 PRINT "OPC 14:""PROM"
3100 VL = 1: VTAB (5): HTAB (20): FLASH : PRINT "V"
3150 V(1) = (U(0) + V(0)) * (1 - R)
3200 L(0) = (U(0) + V(0)) * R
3250 L(NE + 1) = SF - SU - SM - U(0) - V(0)
3300 REM
    << PERFIL DE LIQUIDAS >>
3350 FOR I = 1 TO NE: L(I) = F(I) + L(I - 1) + V(1) - V(I) - G(I) - U(I): NEXT I
3400 REM
    << DETERMINACION COEFICIENTES SISTEMA BALANCE DE MATERIA POR COMPONENTE, DESDE JQ=0 HASTA JQ=NE: EQU
ACIONES >>
3450 T(1) = 0: FOR JQ = 1 TO NE: FOR I = 2 TO NE + 2: T(I) = L(I - 2): NEXT I
3500 FOR I = 1 TO NE + 2: T(I) = - (L(I - 1) + U(I - 1) + (V(I - 1) - G(I - 1)) * N(I - 1, I)) / NEXT I
3550 FOR I = 1 TO NE + 1: T(I) = V(I) * N(I, I): NEXT I
3600 T(0) = G(0) * NE - 2: FOR I = 2 TO NE + 1: T(I) = - (F(I - 1) * A(I - 1, I)) / NEXT I
3650 NS = NE + 2: G(0) = T(0)
3700 FOR JQ = 0 TO NE + 1
3750 T(0) + 1 = ABS (T(0) + 1)
3800 A(JQ, I) = T(0) + 1: NEXT JQ
3850 NEXT IC: FOR JQ = 0 TO NE + 1
3900 SA = 0: FOR IC = 1 TO N(K(JQ)): NEAT IC = SA + A(JQ, IC): NEAT IC: FOR IC = 1 TO N(K(JQ)): A(JQ, IC) = A(JQ, IC) / SA: NEXT IC

```

```

3000 HOME : PRINT : INPUT "NUMERO DE CORRIENTES LIQUIDAS LATERALES.DESCARGAS="*ML: IF ML = 0 GOTO 2100
3010 FOR I = 1 TO ML: PRINT : PRINT "ETAPA EN LA QUE SE DESCARGA LA CORRIENTE NUMERO "I": ": PRINT : INPUT "ETAP
#="*JL: PRINT : PRINT "FLUJO "I*JL": DESCARGAS=": INPUT J1/J2/J3/J4 = V1(J) * W1(J) : J1/J2/J3 = 50 + U(J) : NEXT I
3100 HOME : PRINT : INPUT "NUMERO DE CORRIENTES VAPOR LATERALES.DESCARGAS="*MV: IF MV = 0 GOTO 2200
3110 FOR I = 1 TO MV: PRINT : PRINT "ETAPA EN LA QUE SE DESCARGA LA CORRIENTE NUMERO "I": ": PRINT : INPUT "ETAP
#="*JL: PRINT : PRINT "FLUJO "I*JL": DESCARGAS=": INPUT G1/G2/G3 = G(J) * W1(J) : G1 = G(J) : NEXT I
3200 HOME : PRINT : PRINT "CUAL ADMINISTRADOR": PRINT : INPUT "SI ALGUNA CORRIENTE CONDENSADOR-REHEMISOR.ENCUENTRA ET
APAS DE ADMINISTRACION CALOR ? "YH: IF YH = 0 GOTO 3300
3210 FOR I = 1 TO YH: PRINT : PRINT " ETAPA EN LA QUE SE ADECCIONA O ELIMINA CALOR ": INPUT J3: PRINT : PRINT "CA
LOR ADMINISTRADO "Y3(J) ": INPUT G3/G4/J3 = G(J) * W3(J) : NEXT I
3240 HOME : PRINT : PRINT "SELECCION OPCION ": PRINT "1.- CONDENSADOR TOTAL": PRINT "2.- CONDENSADOR PARCIAL": I
NPUT "TECLE NUMERO DE OPCION"*J
3250 G3/J = "CONDENSADOR TOTAL" : G3/J = "CONDENSADOR PARCIAL"
3260 IF J = 1 THEN V3(J) = G3/J3 - FRINE + W3
3270 IF J = 2 THEN V3(J) = FRINE - (G3/J3) = 0
3280 V1 = (J1(J) + V3(J)) * (1 - R1(L)) + (V1(J) + U1(J)) * R
3290 REM
<< DISTRIBUCION PERFIL DE TEMPERATURAS >>
3300 PRINT CHR$(4)*"PARTEM"
3310 HOME : PRINT "": FOR I = 1 TO 34: PRINT " ": NEXT I: PRINT "": VTAB (2): PRINT "DISTRIBUCION FLUJOS VAPOR
Y TEMPERATURAS": VTAB (3): PRINT "": FOR I = 1 TO 34: PRINT " ": NEXT I: PRINT "": VTAB (4):
3320 FOR J = NE - 1 TO 0 STEP -1: T(J) = V1(J) + (NE - 1 - J) * (NE + 1) * (V1(J) - V1(J)) : FOR IC = 1 TO MAX(J)
: T(J) = (T(J) * (1 + W1(J)) * (1 - T(J)) / (T(J) * P) / P) : NEXT IC, J
3330 REM
<< DISTRIBUCION PERFIL FLUJO DE VAPOR Y FLUJOS CONSTANTES >>
3340 V1 = (J1(J) + V3(J)) * (1 + R) : FOR I = 2 TO NE + 1: V1(I) = V1(I) - (FR1 - 1) * FR1 - 1: NEXT I
3350 PRINT "": VTAB (5): PRINT "SPL 1": PRINT " ": FOR I = 1 TO 34: PRINT " ": NEXT I: PRINT "": PRINT
" DISTRIBUCION MARCHA TRIDIMENSIONAL SPL": PRINT " ": FOR I = 1 TO 34: PRINT " ": NEXT I: PRINT "":
3360 PRINT "": SPL 1: PRINT "": SPL 2: PRINT "": SPL 3: PRINT "": SPL 4: PRINT "": FOR I = 1 TO 34: PRINT " ": NEXT
I: PRINT "": PRINT "": SPL 5: PRINT "CONDENSACION TEMP. Y FLUJOS VAPOR": PRINT "": SPL 6: PRINT "": FOR I = 1 TO 34: PR
I " ": NEXT I: PRINT "":
3370 PRINT "": SPL 10: PRINT "": SPL 15: PRINT "INDIC": FOR I = 1 TO 34: PRINT " ": NEXT I: PRINT "
": PRINT " ": SPL 20: PRINT "E":
3380 PRINT "": SPL 30: PRINT "": FOR I = 1 TO 34: PRINT " ": NEXT I: PRINT "": PRINT "": SPL 15: PRINT "SI": PRINT " SPL 19":
V1: PRINT "": SPL 12: PRINT "": FOR I = 1 TO 34: PRINT " ": NEXT I: PRINT "": PRINT "": SPL 12: PRINT "FIN DE PROCESO": PRINT
" SPL 12: PRINT "": FOR I = 1 TO 34: PRINT " ": NEXT I: PRINT "":
3390 PRINT CHR$(4)*"PRRO"
3400 VL = 1: VTAB (3): HTAB (20): FLASH : PRINT "V"
3410 V1 = (J1(J) + V3(J)) * (1 + R)
3420 L1 = (J1(J) - V3(J)) * R
3430 LNE = 1 + (JF - J3) - JH - (L1) - V3
3440 REM
<< PERFIL DE LIQUIDOS >>
3450 FOR I = 1 TO NE(L) = FR1 + L1 - 1 + V1 + 1 - V1 / - G1 - U1: NEXT I
3460 REM
<< GENERACION DE DATOS PARA SISTEMAS ENLACES DE MATERIA POR COMPONENTE. DESDE J=0 HASTA J=NE+1 EQU
ACIONES >>
3470 TAV1 = 0: FOR IC = 1 TO NE: FOR I = 2 TO NE - 2: TAV1 = L1 - 2: NEXT I
3480 FOR I = 1 TO NE + 2: TAV1 = - L1 - 1 + U1 - 1 + (V1 - 1) + G1 - 1: NEXT I
3490 FOR I = 1 TO NE + 2: TAV1 = V1 * MAX(L) : NEXT I
3500 TAV1 = G1 * (NE - 2) : FOR I = 2 TO NE + 1: TAV1 = - FR1 - 1 + FR1 - 1, IC: NEXT I
3510 NS = NE + 2: GOSUB 1000
3520 FOR J = 0 TO NE + 1
3530 TAV(J) = ABS (TAV(J) + 1)
3540 X(J), IC = TAV(J) + 1: NEXT J
3550 NEXT IC: FOR J = 0 TO NE + 1
3560 SA = 0: FOR IC = 1 TO NE: SA = SA + X(J), IC: NEXT IC: FOR IC = 1 TO N: X(J), IC = X(J), IC / SA: NEXT IC

```

```

3950 NORMAL : VTAB (5): HTAB (20): PRINT "V": VTAB (7): HTAB (2): PRINT "/": VTAB (17): HTAB (1): PRINT "A"
4000 VTAB (10): HTAB (20): FLASH : PRINT "V": NORMAL : PRINT "...PLATO : ;JJ:"
4050 REM
  << CORRECCION PERFIL DE TEMPERATURAS Y CALCULO DE ENTALPIAS PARA EL LIQUIDO Y VAJOR >>
4100 FOR IC = 1 TO NEX(10) : X(10,IC) = X(10,IC) : NEXT IC
4150 EA = 1 : T = T(10) : GOSUB 13000:TT(10) = T:HL(10) = HLH(V(10)) = HV
4200 FOR IC = 1 TO NXY(10,IC) = Y(10):X(10,IC) = Y(10) / X(10) : NEXT IC
4250 NEXT JJ
4300 REM
  << VERIFICACION PERFILES DE VAJOR POR BALANCE DE ENERGIA >>
4350 T(1) = V(1)
4400 FOR JU = 2 TO NE + 1:TA(10) = (F(10) - 1) * (HL(10) - 1) - HF(10) - 17) + L(10) - 2) * (HL(JU) - 1) - HL(10) - 2)
+ (V(10) - 1) + G(10) - 1) * (HV(10) - 1) - HL(10) - 1) + G(10) - 1) / (HV(10) - HL(10) - 1)) : NEXT JU
4450 EV = 0 : FOR JU = 1 TO NE + 1:EV = EV + (ES (V(10) - TA(10)) / V(10)+V(10)) = TA(10) : NEXT JU
4500 ET = 0 : FOR JU = 2 TO NE + 1:ET = ET + (TT(10) - T(10)) * 2:TA(10) : NEXT JU
4550 NORMAL : VTAB (17): HTAB (20): FLASH : ET: SPC: 4: CHR: (7): CHR: (7): VTAB (10): HTAB (20): PRINT "V": VTAB (1
5): HTAB (20): FLASH : PRINT "V"
4600 IF ET < = 0.01 * (NE + 2) GOTO 4750
4650 NORMAL : VTAB (15): HTAB (20): PRINT "V": VTAB (7): HTAB (2): FLASH : PRINT "/": VTAB (17): HTAB (1): PRINT "
"
4700 VL = VL + 1: GOTO 4150
4750 IF EV > = 0 GOTO 4350
4800 HOME : INVERSE : PRINT "EXISTE ERROR EN SUS DATOS. VERIFIQUELOS P.F.": NORMAL : PRINT CHR: (1)"CLOSE": END
4850 REM
  << CORRECCION PERFIL DE LIQUIDOS >>
4900 FOR I = 1 TO NE - 1:L(1) = F(1) + L(1) - 1) + V(1) - 1) - V(1) - 6(1) - U(1) : NEXT I:(L(NE) = V(NE + 1) - L(NE +
1)
4950 NORMAL : VTAB (15): HTAB (20): PRINT "V": VTAB (20): HTAB (20): FLASH : PRINT "V": CHR: (7): CHR: (7): CHR: (
7): CHR: (7)
5000 IF ON = 1 THEN PRINT "CORRIGIENDO EL PERFIL DE SU IMPRESORA"
5050 NORMAL : VTAB (24): PRINT "PARA CONTINUAR PRESIONE CUALQUIER TECLA": GET AA
5100 GOSUB 13000
5150 END
5200 REM
  << EXPOSICION TEMPERATURAS FONDO Y LONG DE LA COLUMNA >>
9050 HOME : PRINT : PRINT "QUIERE ESTIMAR TEMPERATURAS EN EL FONDO Y FONDO DE LA COLUMNA ?": PRINT : INPUT "(SI/NO)
RESUESTA:" : AA: PRINT
9100 IF AA = "NS" THEN 9300
9150 IF AA = "SI" THEN 9250
9200 GOTO 9050
9250 PRINT "TEMP. EN EL FONDO T = (UT):" : INPUT TO:TD = (TD + UT) / TCF : PRINT "TEMP. EN EL FONDO T = (UT):" :
11: INPUT TE:TE = (TE + UT) / TCF: RETURN
9300 TD = 5000:TE = - 5000: FOR I = 1 TO NNE = T(1) / (1 - (LOG (P / P(1)) / (5.37 * (1 + W(1))))))
9350 IF NE < TD THEN TD = NE
9400 IF NE > TE THEN TE = NE
9450 NEXT I
9500 IF (TE - TD) / 100 THEN II = (TD + TE) / 5:TS = TE - II * 0.75:TD = TE + II * 0.125
9550 PRINT : PRINT "ESTIMACION TEMPERATURAS EN LA COLUMNA I": PRINT : PRINT " FONDO T=": FN DI(1) * TCF - UT): " :
UT: PRINT : PRINT " FONDO T=": FN DI(1) * TCF - UT): " : UT: RETURN
10000 REM
  << RESOLUCION MATRIZ TRIDIAGONAL >>
10100 BETHA(1) = T(1):GAMA(1) = TD(1) / BETHA(1)
10200 FOR I = 2 TO NS:BETHA(1) = TD(1) - TR(1) : TEC(1) = 1 / BETHA(1) - 1):GAMA(1) = (TD(1) - TR(1) * GAMA(1) - 1)
/ BETHA(1) : NEXT I:TE(NE) = GAMA(NS)
10300 FOR I = NS - 1 TO 1 STEP - 1:TE(I) = GAMA(I) - TEC(I) * TB(1 + 1) / BETHA(I) : NEXT I
10400 RETURN

```



11000 REM

&lt;&lt; FINITE DE BURBUJA Y ROCIO DE LA NEBLA ALIMENTADA &gt;&gt;

11100 FLASH : PRINT " \* : NORMAL : PRINT "CALCULANDO TEMPERATURAS DE ROCIO Y BURBUJA PARA ESTA ALIMENTACION"  
11110 FLASH : PRINT " \* : NORMAL THE = FEEL (37) - 1

11200 VMS = WE

11300 TD = DT + TE; FOR IC = 1 TO N\*(IC) = AF(JU,IC) : HEAT IC(1) = 1 : GOSUB 25000(TD = TH) : HL; FOR IC = 1 TO N\*(IC) : HEAT IC

11400 TD = DT + TE; FOR IC = 1 TO N\*(IC) = AF(JU,IC) : HEAT IC(1) = 2 : GOSUB 25000(TD = TH) : HV; FOR IC = 1 TO N\*(IC) : HEAT IC

11500 RETURN

12000 REM

&lt;&lt; CALCULO DE LA FRACCION EVAPORADA DE LA ALIMENTACION (FLASH ISOTERMICO) &gt;&gt;

12010 FLASH : PRINT " \* : NORMAL : PRINT "CALCULANDO LA FRACCION EVAPORADA DE LA ALIMENTACION": FLASH : PRINT " \* : NORMAL THE = FEEL (37) - 1

12100 VMS = WE

12200 FR(JU) = (F(JU) - TE) / (TD - TE)

12300 SA = (18) + 0

12400 FOR IC = 1 TO N\*(IC) = AF(JU,IC) + FR(JU) \* (DU(IC) - AF(JU,IC)) / (IC) = NN(IC) + FR(JU) \* (F(JU,IC) - NN(IC)) : HEAT IC

12500 HT = HVA + (17) \* (DT + F(JU))

12600 GOSUB 25000(HS = HST) : UNDO 10

12700 FOR IC = 1 TO N\*(IC) = F(JU) : FV(IC) = U(IC) - (18) = FR(JU) \* N1 + (100(IC) = AF(JU,IC) / K2\*HW(IC) + (18) + (100(IC) = SA + (100(IC) = SY + HW (100(IC) = HD - (HW(IC) - U(IC)) / 2 / AF(JU,IC) : HEAT IC

12800 IF HT &gt; SA THEN GOTO 12800

12900 IF HT &gt; 50 THEN PRINT "NO HUBO CONVERGENCIA": STOP

13000 IF HT = 0 THEN 12100

13100 IF HT &lt; HST THEN 12100

13200 VA = VA + (18) : I = 1

13300 IF VA &gt; 0.1 THEN 12400

13400 IN = HVA = 1

13500 DV = (F) / (HD) = (F) = FR(JU) + (18) : I = 0

13600 SA = (18) + 0

13700 FOR IC = 1 TO N\*(IC) = K(IC) - (18) = N1 \* FN + (100(IC) = AF(JU,IC) / K2\*HW(IC) = K(IC) \* U(IC) / (SA + U(IC) = SA + (K(IC) = HD - (HW(IC) - U(IC)) / 2 / AF(JU,IC) : HEAT IC

13800 FD = SA - (18) : ABS(FD) &lt; = 11 \* (1) THEN 12100

13900 IF 11 &gt; 20 THEN 12200

14000 FN = FN - FD : ABS(FN) = 11 + 1 : GOTO 12700

14100 PRINT "NO HUBO CONVERGENCIA PARA LA RUTINA INTERNA PARA LAS COMPOSICIONES DEL LIQUIDO Y VAPORES EN EL FLASH ISOTERMICO": STOP

14200 FOR IC = 1 TO N\*(IC) = U(IC) / (SA) : (IC) = NN(IC) / (1) : HEAT IC

14300 IN = (18) = FR(JU) \* (18) = (18) : I = 0

14400 T = TH + VA + (18) : (18) = (18) + (18) + DV

14500 IF FR(JU) &lt; 1 THEN FR(JU) = 0.999

14600 IF FR(JU) &lt; 0 THEN FR(JU) = 0.001

14700 IF IN = 0 THEN NT = NT + 1

14800 GOTO 12070

14900 FOR IC = 1 TO N\*(IC) = U(IC) / (SA) : (IC) = NN(IC) / (1) : HEAT IC

15000 FV(JU) = HL = FR(JU) \* (18) = HL

15100 IF FR(JU) &lt; 0.001 THEN PRINT "ERROR": STOP

15200 IF FR(JU) &gt; 0.999 THEN PRINT "ERROR": STOP

15300 RETURN

12000 REM

&lt;&lt; SALIDA NORMAL DEL PROGRAMA &gt;&gt;

10000 PRINT CHR\$(13) : CHR\$(4) : PAUSE : IF SA = 0 THEN SPEED = 180

10010 HOME : PRINT : PRINT "CARACTERISTICAS GENERALES DE LA TORRE :": PRINT "NUMERO DE ETAPAS=" : NEI : PRINT : PRINT "NUMERO CORRIENTES LATERALES DESCARGADAS:"

```

13020 PRINT TAB(3)*"LÍQUIDOS=";NH;TAB(24)*"VAPOR=";NV;PRINT
13030 IF NH + NV = 0 THEN GOTO 13070
13040 PRINT " PLATO:";TAB(12)*"FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"FLUJO VAPOR:";FOR I = 1 TO NE
13050 IF UN(I) < > 0 THEN PRINT TAB(4);TAB(14);UN(I) / WQ;TAB(25);UN(I) / WQ;
13060 NEXT I
13070 PRINT "NÚMERO DE COMPONENTES A SEPARAR=";NH;PRINT
13080 PRINT "NÚM. DE ETAPAS EN USE DE ACCIÓN CALOR=";NH;PRINT
13090 IF NH = 0 GOTO 13130
13100 PRINT " PLATO:";TAB(12)*"CALOR AUTOGENERADO:";FOR I = 1 TO NE
13110 IF Q(I) < > 0 THEN PRINT TAB(4);TAB(16);Q(I) / WQ;
13120 NEXT I
13130 PRINT "POSICIÓN DE OPERACIÓN=";P;PRINT
13140 PRINT "ESPECIFICACIONES DE LA ALIMENTACIÓN"
13150 PRINT
13160 FOR I = 1 TO N
13170 PRINT "PLATO NO:";TAB(12)*"FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"FLUJO VAPOR:";PRINT
13180 PRINT "TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";PRINT
13190 PRINT "ENTRADA:";TAB(12)*"TEMPERATURA:";TAB(17)*"ENTRADA:";TAB(17)*"ENTRADA:";PRINT
13200 PRINT "COMPONENTE COMPOSICIÓN"
13210 FOR J = 1 TO H
13220 PRINT "FLUJO:";TAB(27)*"ENTRADA:";TAB(27)*"ENTRADA:";PRINT
13230 NEXT J
13240 HOME
13250 PRINT "ESPECIFICACIONES DE LA TORRE:";PRINT
13260 FOR I = 1 TO NE
13270 PRINT "PLATO NO:";TAB(12)*"FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"FLUJO VAPOR:";PRINT
13280 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13290 FOR J = 1 TO H
13300 PRINT "FLUJO:";TAB(27)*"ENTRADA:";TAB(27)*"ENTRADA:";PRINT
13310 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13320 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13330 FOR I = 1 TO NE;PRINT "PLATO NO:";TAB(12)*"FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"FLUJO VAPOR:";PRINT
13340 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13350 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13360 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13370 PRINT
13380 PRINT "TIPO:";TAB(12)*"TIPO:";PRINT
13390 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13400 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13410 IF UP = 1 THEN FOR I = 1 TO NE;PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13420 NEXT I
13430 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13440 FOR I = 1 TO NE;PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13450 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13460 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13470 HOME
13480 PRINT "CARACTERÍSTICAS DEL RESERVOIRIO:";PRINT
13490 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13500 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13510 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13520 FOR I = 1 TO NE;PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13530 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13540 FOR I = 1 TO NE;PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13550 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13560 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13570 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13580 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13590 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13600 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13610 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13620 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13630 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13640 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13650 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13660 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13670 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13680 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13690 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13700 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13710 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13720 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13730 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13740 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13750 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13760 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13770 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13780 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13790 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13800 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13810 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13820 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13830 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13840 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13850 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13860 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13870 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13880 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13890 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13900 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13910 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13920 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13930 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13940 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13950 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13960 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13970 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13980 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
13990 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT
14000 PRINT "TEMPERATURA FLUJO LÍQUIDO:";TAB(17)*"TEMPERATURA FLUJO VAPOR:";PRINT

```

```

10560 PRINT CHR$(4)*"PRN": SPEED = 200
10570 PRINT "KKS (4) PLOGE": PRINT : PRINT " PARA EL CALCULO DE FRECUENCIAS TEMPERATURAS SE UTILIZO LA ECUACION
N DE ESTADO DE "EQU: PRINT : PRINT " << FIN DEL PROGRAMA >>": GOTO
10600 REM
<< SUBROUTINA PUNTO DE ROCIO Y BUREAU >>
20010 ON BR GOTO 20020,20030
20020 FOR I = 1 TO N:R(I) = A(I): NEXT I: GOTO 20040
20030 FOR I = 1 TO N:R(I) = A(I): NEXT I
20040 IF T = 0 AND DR = 1 THEN GOSUB 24000
20050 IF T = 0 AND BR = 2 THEN GOSUB 24000
20060 IT = 1
20070 IT = IT + 1
20080 IF IT > 50 THEN GOTO 20100
20090 GOSUB 20000: A = 0
20100 FOR I = 1 TO N:R(I) = F(I) / PV(I)
20110 ON BR GOTO 20120,20140
20120 G(I) = A(I) * R(I)
20130 GOTO 20150
20140 G(I) = A(I) / R(I)
20150 S = S + G(I)
20160 NEXT I
20170 F0 = 100 / S: IF ABS(F0) <= TT THEN GOTO
20180 T = T + IT: GOTO 20070: T = T + 1: GOTO
20190 ON BR GOTO 20200,20210
20200 FOR I = 1 TO N:R(I) = G(I) * S0 + F(I) * A(I) / PV(I): NEXT I: GOTO 20220
20210 FOR I = 1 TO N:R(I) = G(I) * S0 + F(I) * A(I) / PV(I): NEXT I
20220 F1 = 100 / S0
20230 IT = F1 - F0 + IT: F1 - F0 = F0 - IT + 1: GOTO
20240 IF DR > 50 THEN IT = 50
20250 IF IT <= 50 THEN IT = 50
20260 T = T + IT
20270 IF T > 700 THEN T = 700
20280 IF T < 50 THEN T = 50
20290 GOTO 20070
20300 FOR I = 1 TO N
20310 ON BR GOTO 20320,20340
20320 R(I) = G(I) / S
20330 GOTO 20350
20340 R(I) = G(I) / S
20350 NEXT I
20360 IF T = 700 THEN GOTO
20370 IF T <= 50 THEN GOTO
20380 RETURN
20390 HOME: DIVINE: PRINT " NO HUBO CONVERGENCIA DESPUES DE "T": ITERACIONES": NORMAL: STOP
20400 HOME: DIVINE: PRINT "LA TEMPERATURA CONVINO FUERA DEL RANGO ESTABLECIDO": NORMAL: STOP
20410 REM
<< SUBROUTINA QUE ESTIMA TEMPERATURA Y COMPOSICION INICIAL >>
24010 I = 10: IT = 0
24020 SM = WNO = 0
24030 FOR I = 1 TO N
24040 FT = T0(I) * EXP(45.3727 * A(I) + W(I) / (A(I) - T0(I) / T))
24050 IF BR = 2 THEN GOSUB
24060 G(I) = A(I) * FT
24070 GOTO 24090
24080 G(I) = A(I) / FT
24090 SM = SM + G(I)
24100 NS = NS + G(I) * T0(I) * A(I) + W(I)
24110 NEXT I
24120 IF BR = 2 THEN 24170
24130 SM = SM / S

```

```

24140 NS = NS * 0.3727 / P
24150 T = 1 / (1 / T + SM * LOG (SM) / NS)
24160 GOTO 24200
24170 SM = SM * P
24180 NS = NS * 0.3727 / P
24190 T = 1 / (1 / T + SM * LOG (SM) / NS)
24200 IF ABS (SM - 1) < = TT THEN 24250
24210 IF IT > 20 THEN 24240
24220 IT = IT + 1
24230 GOTO 24200
24240 PRINT "NO HUBO CONVERGENCIA": STOP
24250 FOR I = 1 TO N
24260 IF BV = 2 THEN 24270
24270 r(i) = CN(I) / (P * SM)
24280 GOTO 24300
24290 r(i) = CN(I) * P / SM
24300 NEXT I
24310 RETURN
26000 REM
    << SUBROUTINA QUE CALCULA DE PROPIEDADES PARA EL LIQUIDO Y VAPOR >>
26010 LV = 1: GOSUB 27000:ZC = ZHC: HBL = HSL: SE: FOR I = 1 TO N:R(I) = P(I): NEXT I
26020 LV = 2: GOSUB 27000:ZC = ZHV: HBL = HSL: SE: FOR I = 1 TO N:R(I) = P(I): NEXT I
26030 RETURN
27000 REM
    << SUBROUTINA DE LAS PROPIEDADES TERMODINAMICAS >>
27010 RMS = 1.93719:RCP = 1.93719: IF UM = 2 THEN RMS = 0.31497
27020 IF LV = 1 THEN FOR I = 1 TO N:R(I) = A(I): NEXT I
27030 IF LV = 2 THEN FOR I = 1 TO N:R(I) = Y(I): NEXT I
27040 GOSUB 30000:R = RND: SMD = CND: CND = DR: GOSUB 28000

```

•  
•  
•

ETC.

```

28000 REM
    << RESUL. NUMERICA PARA EL CALCULO DEL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD ZETA >>

```

•  
•  
•

```

30000 REM
    << SUBROUTINA QUE CALCULA LOS PARAMETROS DE MEZCLA >>

```

## A P E N D I C E B - 1

```

10 FEN
<< PROGRAMMA QUE ACTUALIZA EL BANCO DE DATOS >>
20 HOME : TEXT :DS = CHR$(4)HS = CHR$(44)
30 PRINT DS:"UNLEO: BANCO DE DATOS"
40 PRINT DS:"OPEN BANCO DE DATOS:LI20"
50 PRINT DS:"READ BANCO DE DATOS:R0"
60 INPUT NL:FS:NB:TC:FC:ED:W:CACP:OCOP:CCOP:CCOP:DF:DG
70 PRINT DS:"POSITION BANCO DE DATOS"
80 HOME : R:NR : PRINT : PRINT : PRINT " * C O M A N D O S *": PRINT : PRINT
90 PRINT DS:"--- ADICIONAR UN COMPONENTE": PRINT
100 PRINT DS:"--- LEER Y/O CAMBIAR PARAMETROS": PRINT
110 PRINT DS:"--- FIN DEL PROGRAMA": PRINT : PRINT
120 VTAB :B: HTAB : INPUT "QUE DESEA HACER ? OPCION => ":J0: VTAB :B: HTAB :G0: FOR I = 1 TO 25: PRINT " ": NEAT
130 J = VAL J0: IF 0 < I OR 0 > 3 THEN 120
140 IN @ J0:G0:G0:G0
150 HOME : PRINT : PRINT : PRINT " ADICIONAR UN COMPONENTE": PRINT : PRINT
160 PRINT "EL COMPONENTE SIGUIENTE SERA EL NO.:"NR + 1
170 PRINT : PRINT : PRINT " ENTRADA DE DATOS (0=COMIENZO)"
180 R = NR * 11: PRINT : PRINT
190 INPUT "FORMULA=":F0: IF F0$ = "0" OR F0$ = "" THEN 50
200 INPUT "NOMBRE=":NR0
210 INPUT "TC=":TC0:TC = VAL (TC0)
220 INPUT "FC=":FC0:FC = VAL (FC0)
230 INPUT "ED=":ED0:ED = VAL (ED0)
240 INPUT "W=":W0:W = VAL (W0)
250 INPUT "CACP=":CACP0:CACP = VAL (CACP0)
260 INPUT "OCOP=":OCOP0:OCOP = VAL (OCOP0)
270 INPUT "CCOP=":CCOP0:CCOP = VAL (CCOP0)
280 INPUT "CCOP=":CCOP0:CCOP = VAL (CCOP0)
290 INPUT "DF=":DF0:DF = VAL (DF0)
300 INPUT "DG=":DG0:DG = VAL (DG0)
310 PRINT DS:"WRITE BANCO DE DATOS:W1R"
320 PRINT F0:R0:NR0:TC0:FC0:ED0:W0:CACP0:OCOP0:CCOP0:CCOP0:DF0:DG0
330 PRINT DS:"POSITION BANCO DE DATOS"
340 NR = NR + 1
350 PRINT DS:"WRITE BANCO DE DATOS:R0"
360 PRINT NR:R0:F0:NR0:TC0:FC0:ED0:W0:CACP0:OCOP0:CCOP0:CCOP0:DF0:DG0
370 PRINT DS:"POSITION BANCO DE DATOS"
380 GOTO 80
390 HOME : PRINT : PRINT : PRINT " LECTURA Y/O CAMBIOS DE PARAMETROS DE UN COMPONENTE": PRINT : PRINT
400 INPUT "CUAL ES EL NO. DEL COMPONENTE ? "NR:R0:R = VAL (R0): IF R = 0 THEN 50
410 IF R > NR THEN 390
420 PRINT DS:"READ BANCO DE DATOS:R1R"
430 INPUT NL:FS:NB:TC:FC:ED:W:CACP:OCOP:CCOP:CCOP:DF:DG
440 PRINT DS:"POSITION BANCO DE DATOS"
450 HOME : PRINT : PRINT "PARAMETROS LEIDOS (": PRINT
460 PRINT "NR="NR: PRINT "FORMULA=":F0: PRINT "NOMBRE=":NR0: PRINT "TC=":TC0: PRINT "FC=":FC0: PRINT "ED=":ED0: PRINT "W=":W0: PRINT "CACP=":CACP0: PRINT "OCOP=":OCOP0: PRINT "CCOP=":CCOP0: PRINT "CCOP=":CCOP0: PRINT "DF=":DF0: PRINT "DG=":DG0

```

```

470 PRINT : PRINT "DESEA HACER ALGUN CAMBIO ? (S/N) ?":
480 GET AC$
490 IF AC$ = "S" THEN 520
500 IF AC$ = "N" THEN 810
510 GOTO 480
520 PRINT AC$
530 VTAB 30: HTAB 1: INPUT "QUE PARAMETRO ES ?":CA$: VTAB 20: HTAB 19: FOR I = 1 TO 37: PRINT " ": NEXT
540 PRINT
550 IF CA$ = "FORMULA" THEN 600
560 IF CA$ = "NUMERO" THEN 670
570 IF CA$ = "TC" THEN 700
580 IF CA$ = "PC" THEN 710
590 IF CA$ = "IC" THEN 720
600 IF CA$ = "M" THEN 730
610 IF CA$ = "CACP" THEN 740
620 IF CA$ = "CBCP" THEN 750
630 IF CA$ = "CCCP" THEN 760
640 IF CA$ = "DCCP" THEN 770
650 IF CA$ = "DF" THEN 780
660 IF CA$ = "DG" THEN 790
670 GOTO 510
680 INPUT "FORMULA :":FC$: GOSUB 800: GOTO 450
690 INPUT "NUMERO :":NC$: GOSUB 800: GOTO 450
700 INPUT "TC (T) :":TC$:TC = VAL (TC): GOSUB 800: GOTO 450
710 INPUT "PC (P) :":PC$:PC = VAL (PC): GOSUB 800: GOTO 450
720 INPUT "IC (I) :":IC$:IC = VAL (IC): GOSUB 800: GOTO 450
730 INPUT "M (M) :":M$:M = VAL (M): GOSUB 800: GOTO 450
740 INPUT "CACP (C) :":CACP$:CACP = VAL (CACP): GOSUB 800: GOTO 450
750 INPUT "CBCP (B) :":CBCP$:CBCP = VAL (CBCP): GOSUB 800: GOTO 450
760 INPUT "CCCP (C) :":CCCP$:CCCP = VAL (CCCP): GOSUB 800: GOTO 450
770 INPUT "DCCP (D) :":DCCP$:DCCP = VAL (DCCP): GOSUB 800: GOTO 450
780 INPUT "DF (F) :":DF$:DF = VAL (DF): GOSUB 800: GOTO 450
790 INPUT "DG (G) :":DG$:DG = VAL (DG): GOSUB 800: GOTO 450
800 FF, R : PRINT @: "LEER BANCO DE DATOS"
810 HOME : FOR I = 1 TO 12: PRINT : NEXT I
820 PRINT "PROGRAMA TERMINADO"
830 PRINT @: "LEER BANCO DE DATOS"
840 END
850 REM
**SUBROUTINA CAMBIO DE UN PARAMETRO**
860 HS = DEF$ + 4: PRINT @: "LEER BANCO DE DATOS,R"R
870 PRINT @: FC$:HS:FC:HS:TC:HS:PC:HS:IC:HS:M:HS:CACP:HS:CBCP:HS:CCCP:HS:DCCP:HS:DF:HS:DG
880 PRINT @: "POSITION BANCO DE DATOS"
890 RETURN

```

## CAPITULO IX

## NOTACION

Excepto cuando se advierte lo contrario, la notación siguiente es la que se emplea en toda la tesis.

Símbolo	Definición
a	Constante definida por la ec. (2-14)
$a_{i,j}$	Coefficiente definido en la ec. (5-24)
A	Energía libre de Helmholtz ; Constante adimensional definida en la ec. (2-12)
AH	Parámetro calculado por las ec. (2-57) o (2-58)
$A_j$	Coefficiente definido por la ec. (5-16)
b	Constante definida por la ec. (2-15)
$b_{i,j}$	Coefficiente definido en la ec. (5-25)
B	Constante adimensional definido en la ec. (2-12)
BH	Parámetro calculado por las ec. (2-57) o (2-58)
$B_{i,j}$	Coefficiente definido en la ec. (5-17)
c	Constante definida por la ec. (2-16)
$c_{i,j}$	Coefficiente definido por la ec. (5-26)
C	Constante adimensional definida en la ec. (2-12)
CACP, CBCP, CCCP y CDCP }	Constantes de la ecuación del calor específico a presión constante como gas ideal
$C_{i,j}$	Coefficiente definido por la ec. (5-16)
$C_p$	Calor específico a presión constante
$C_{p_i}$	Calor específico a presión constante del componente i
d	Constante definida en la ec. (2-17)
D	Constante adimensional definida en la ec. (2-12); Flujo obtenido como destilado (capítulo V)

Símbolo	Definición
DEL <sub>P</sub>	Incremento de presión calculado
DEL <sub>T</sub>	Incremento de temperatura calculado
$D_{i,j}$	Coefficiente definido en la ec. (5-19)
DP	Incremento de presión especificado
DT	Incremento de temperatura especificado
DX	Incremento de composición de la fase líquida
f	Función definida en la ec. (3-33) o (3-34)
f'	Función definida en la ec. (3-39)
$f_i$	Fugacidad del componente i
F	Flujo de una corriente alimentada
g	Función definida en la ec. (3-36a)
g'	Función definida en la ec. (3-39)
G	Energía libre de Gibbs; Corriente lateral de descarga de flujo vapor
GL	Grados de libertad, en la regla de las fases
H	Entalpía
HF	Entalpía de una corriente de alimentación
HL	Entalpía de una corriente líquida
HV	Entalpía de una corriente vapor
IT	Número de iteración
$K_{i,j}$	Parámetro de interacción binario
$K_i$	Relación de equilibrio del componente i
$K_{i,j}$	Relación de equilibrio del componente i en el plato j
L	Cantidad definida en la ec. (2-73); Flujo de una corriente en estado líquido
m	Parámetro de la ec. (2-47)
$m_0$	Parámetro definido por la ec. (2-54)
M	Número de fases, en la regla de las fases
n	Número de moles



Símbolo	Definición
N	Número de componentes
NC	Identificador de los componentes en el Banco de Datos
NE	Número de etapas ideales entre condensador y rehervidor
$P_{i,j}$	Cantidad definida en la ec. (5-50)
P	Presión absoluta
PA	Presión inicial
Pc	Presión crítica, atm
PF	Presión de una corriente de alimentación
Po	Presión que denota el estado de referencia
$q_{i,j}$	Cantidad definida en la ec. (5-31)
Q	Cantidad calculada con la ec. (2-72); Cantidad de calor suministrado o eliminado
R	Constante universal de los gases; Relación de reflujo
S	Entropía
SF	Entropía de una corriente de alimentación
SL	Entropía de una corriente líquida
SS	Función definida por la ec. (3-15) o (3-17)
SV	Entropía de una corriente vapor
SX	Suma de las fracciones mol de la fase líquida
SY	Suma de las fracciones mol de la fase vapor
T	Temperatura absoluta
Tc	Temperatura crítica, °K
TF	Temperatura de una corriente de alimentación
Tr	Temperatura reducida
To	Temperatura que denota el estado de referencia
U	Energía interna; Corriente lateral de descarga de flujo líquido

Símbolo	Definición
$v$	Volumen molar
$V$	Volumen total
$\bar{V}_i$	Volumen molar parcial
$(V/F)$	Fracción evaporada
$X_i$	Fracción molar del componente $i$ en la fase líquida
$Y_i$	Fracción molar del componente $i$ en la fase vapor
$Z$	Factor de compresibilidad
$Z_c$	Factor de compresibilidad crítico
$Z_i$	Fracción molar del componente $i$
$\beta$	Parámetro definido en la ec. (2-41)
$\beta_c$	Parámetro obtenido de la ec. cúbica (2-32)
$\mu_i$	Potencial químico del componente $i$
$\epsilon_T$	Error permitido con respecto a la variable temperatura
$n_a, n_b$ $n_c$ y $n_d$ }	Constantes
$\alpha$	Parámetro de la ec. (2-14)
$w$	Factor acéntrico de Pitzer
$\epsilon_c$	Es $Z$ calculada por la ecuación de estado en el punto crítico
<u>Superíndices</u>	
$^o$	Propiedad del gas ideal
$L$	Propiedad del líquido
$V$	Propiedad del vapor
<u>Subíndices</u>	
$i$	Propiedad del componente $i$
$j$	Propiedad del plato $j$ (capítulo V)
$m$	Propiedad de mezcla
$i, j$	Propiedad del componente $i$ en el plato $j$

## CAPITULO X

## BIBLIOGRAFIA

1. Apple II Computer Inc. EUA. "Basic Programating Reference Manual, 1981".
2. Apple II Computer Inc. EUA. "Disk Operating System, 1981".
3. Apple II Computer Inc. EUA. "Reference Manual, 1981".
4. Asselineau, L., Bogdanic, G. y Vidal, J. : A versatile algorithm for calculating vapour-liquid equilibria. Fluid Phase Equilibria. No. 3 : 273-290. (1979).
5. Balzhiser, R. E., Samuels, M. R. y Eliassen, J. D.: Chemical Engineering Thermodynamics. Prentice-Hall, 1972.
6. Coward, I., Gale, S.E. y Webb, D.R.: Process Engineering Calculations With Equations of State. Trans. I. Chem. E., Vol. 56, 1973.
7. Graboski, M. S. y Daubert, T. E.: A Modified Soave Equation of State for Phase Equilibrium Calculations.
  - 7.1. Hydrocarbon Systems. Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol. 17, No. 4, 1978.
  - 7.2. Systems Containing CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>S, N<sub>2</sub> and CC. Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol. 17, No. 4, 1978.
  - 7.3. Systems Containing Hydrogen. Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol. 18, No. 2, 1979.
8. Gibbs, J. W.: The Scientific Papers of J. W. Gibbs, Vol. I, pp. 55-349, Dover, New York, 1961.
9. Gundersen, Truls. Numerical Aspects of the Implementation of Cubic Equations of State in Flash Calculation Routines. Computer and Chemical Engineering, Vol. 8, No. 3, pp. 245-255, 1980.
10. Harmens, A. y Knapp, H.: Three- Parameter Cubic Equation of State for Normal Substances. Ind. Eng. Chem. Fundam., 1980, Vol. 19, No. 3, pp. 291-294.

11. Kenley, E. J. y Seader J. D.: Equilibrium-Stage : Separations in Chemical Engineering. New York: Wiley, 1981.
12. King, Cary Judson. Separation Process. McGraw-Hill Chemical Engineering Series. Second Edition, 1982.
13. Lapidus, L.: Digital Computation for Chemical Engineers. McGraw-Hill New York, 1962.
14. Leesley, M. E. y Heyen, G.: The Dynamic Approximation Method of Handling Vapor-Liquid Equilibrium Data in Computer Calculations for Chemical Process. Computer and Chemical Engineering. Vol. 1, pp. 109-110, 1977.
15. Martin, Joseph J. : Cubic Equations of State-Which? . Ind. Eng. Chem. Fundam., Vol. 18, No 2, 1979.
16. Mathias, Paul M.: A Versatile Phase Equilibrium Equation of State. Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol. 22, No. 3, 1983.
17. Michelsen, M. L. y Heidemann, R. A.: Calculation of Critical Points from Cubic Two-Constant Equations of State. AIChE Journal. Vol. 27, No. 3. 1981.
18. Gellrich, L., Flöcker, U., Trausnitz, J. M. y Knapp, H.: Equation-of-state methods for computing phase equilibria and enthalpic. International Chemical Engineering, Vol. 21, No. 1, 1981.
19. Patel, Navin C. y Teja, Anyn S.: The Applications of a Generalized Equation of State to the Correlation and Prediction of Phase Equilibria. Chem. Eng. Commun., Vol. 13, pp. 59-53, 1981.
20. Patel, N. C. y Teja, A. S.: A New Cubic Equation of State for Fluids and Fluid Mixtures. Chemical Engineering Science. Vol. 17, No. 3, pp. 463-475, 1982.
21. Peng, D. y Robinson, D. B.: A New Two-Constant Equation of State. Ind. Eng. Chem. Fundam., Vol. 15, No. 1, 1976.
22. Peng, D. y Robinson, D. B.: A Rigorous Method for Predicting the Critical Properties of Multicomponent Systems from an Equation of

- State. AIChE Journal, Vol. 23, No. 2, 1977.
23. Perry, Robert H. y Chilton. Cecil H.: Chemical Engineers' Handbook. Fifth edition. McGraw-Hill Kogakusha, Ltd.
  24. Poling, B. E., Grens II, E. A. y Prausnitz, J. M.: Thermodynamic Properties from a Cubic Equation of State; Avoiding Trivial Roots and Spurious Derivatives. Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol. 20, No. 1, 1981.
  25. Poole, L., McNiff, M y Cook, S.: Apple II / Guia del Usuario. McGraw-Hill, 1983.
  26. Prausnitz, J. M.: Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria. Prentice Hall, 1969.
  27. Prausnitz, J. M., Eckert, C. A., Orye, R. V. y O'Connell, J. P.: Computer Calculations for Multicomponent Vapor-Liquid Equilibria. Prentice Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1967.
  28. Bachford, H., Aime, J. M. y Rice, J. D.: Procedure for Use of Electronic Digital Computers in Calculating Flash Vaporization Hydrocarbon Equilibrium. Journal of Petroleum Technology, 1952.
  29. Raimondi, L.: A Modified Redlich-Kwong Equation of State for Vapour-Liquid Equilibrium Calculations. Chemical Engineering Science, Vol. 35, pp. 1269-1275, 1980.
  30. Redlich, O. y Kwong, J. N. S.: Chem. Rev., Vol. 44; 223, 1949.
  31. Reid, R. C., Prausnitz, J. M. y Sherwood, T. K.: The Properties of Gases and Liquids. Third edition. McGraw-Hill, 1977.
  32. Rohl, J. S., B. E., Ph. D., y Sudall, H.: Convergence Problems Encountered in Flash Equilibrium Calculations Using a Digital Computer. I. Chem. E. Symposium Series No. 23 (1967: Instn Chem. Engrs, London).
  33. Schmidt, G. y Wenzel, H.: A Modified Van der Waals Type Equation of state. Chem. Eng. Sci., Vol. 35, 1980.
  34. Shah, M. K. y Bishnoi, P. R.: Multistage Multicomponent Separation Calculations Using Thermodynamic Properties Evaluated by the SRK/PR

- Equation of State. The Canadian Journal of Chemical Engineering, Vol. 56, 1978.
35. Smith, J. M. y Van Ness, H. C.: Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics. McGraw-Hill Book, Third edition, 1975.
  36. Leiva, Giorgio.: Equilibrium Constants from a Modified Redlich-Kwong Equation of State. Chemical Engineering Science, Vol. 27, pp. 1197-1203, 1972.
  37. Parahad, P. R., Spencer, C. F. y Adler, E. B.: A Comparison of Eight Equations of State to Predict Gas-Phase Density and Fugacity. Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol. 18, No. 4, 1979.
  38. Tomich, J. P.: A New Simulation Method for Equilibrium Stage Processes. AIChE Journal, Vol. 16, No. 2, 1972.
  39. Wang, J. C. y Henke, G. B.: Tridiagonal Matrix for Distillation. Hydrocarbon Processing, Vol. 45, No. 5, 1966.
  40. Zumaya Pérez, Emilio Arturo. Tesis Profesional de Ingeniero Químico. Facultad de Química. UNAM. "Formulación de un modelo matemático generalizado y construcción de un simulador para sistemas de destilación por etapas de mezclas multicomponentes", 1984.