



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES

“CUAUTITLAN”

**CALCULO DE PROPIEDADES TERMODINAMICAS EN UNA
COMPUTADORA, PARA USO MULTIPLE, EN LA F. E. S. C.**

**T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
Q U I M I C O
P R E S E N T A
ARTURO GUILLERMO RODRIGUEZ ROMERO**

DIRECTOR DE TESIS:

I. Q. JAIME DANIEL MORENO JIMENEZ

MEXICO, D. F.

1982



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

CONTENIDO .

INTRODUCCION. - - - - -	1	
CAPITULO I:		
NECESIDADES DE CALCULO DE PROPIEDADES TERMODINAMICAS - -	5	
EN EL AREA DE QUIMICA.		
CAPITULO II:		
ALTERNATIVAS Y OBJETIVOS DE TRABAJO. - - - - -	10	
CAPITULO III:		
IMPLANTACION DEL PROGRAMA. - - - - -	15	
Características del programa original. - - - - -	15	
Implantación del sistema. - - - - -	16	
CAPITULO IV:		
PRESENTACION Y MANEJO DEL SISTEMA. - - - - -	30	
Presentación. - - - - -	30	
Manejo del sistema. - - - - -	36	
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES. - - - - -		43
Modificaciones al sistema: - - - - -	43	
A) Estado actual. - - - - -	43	
B) Implementación del resto del sistema. - - - - -	47	
Conclusiones. - - - - -	49	
APENDICE A - - - - -	50	
APENDICE B - - - - -	78	
APENDICE C - - - - -	89	
BIBLIOGRAFIA - - - - -	87	

I N T R O D U C C I O N

Actualmente, la información en todos y cada uno de los campos de la ciencia es amplísima; mientras que el tiempo promedio de un investigador está restringido.

Por otra parte, los medios comunes de divulgación resultan, - según la especificidad de los propósitos, obsoletos. Es necesario por lo tanto, recurrir a técnicas especiales y singularmente complejas para satisfacer tales necesidades.

Entre otras técnicas contemporáneas, la computación ofrece - alternativas, tanto para almacenar información como para transferirla, que se pueden ajustar a los propósitos del inquiridor, lo cual por los medios convencionales sería costoso y lento. Ha probado además, que es una técnica conveniente y adecuada (como lo demuestran el incremento de artículos, donde lleva implícita la aplicación de la computación) que a la larga, razonablemente utilizada, resulta económica su consulta.

Aunque la mayoría de las computadoras utilizadas en Ingeniería y Ciencias operan con varios lenguajes, es muy frecuente desarrollar los programas en FORMULA TRANslater language (FORTRAN).

La dinámica en la construcción de las computadoras ha permitido, en múltiples proposiciones, mayor libertad para manejar el lenguaje; pero en general, éste se va haciendo más exigente o lo que es lo mismo, acepta la menor cantidad de errores ofreciendo - en cambio mayor flexibilidad en la forma de definir algunas proposiciones. Cabe notar, en esta parte, que cada máquina posee un grupo particular de instrucciones que varían de una a otra y de lo que se especifique en una, puede no funcionar en otra; por lo tanto antes de comenzar cualquier trabajo es necesario conocer - ese grupo particular de instrucciones.

En química, la computación ha abierto posibilidades que anteriormente se consideraban insalvables tanto a nivel docencia e investigación, como en la vida cotidiana de los individuos que la practican.

La fisicoquímica es una disciplina que trata de los cambios físicos y químicos que experimentan las sustancias; así como las causas que los originan. El interés de la fisicoquímica, en general es describir suficientemente un sistema, ya en equilibrio o fuera de él y entonces predecir el comportamiento seguido al variar cualquier parámetro de interés.

Los parámetros necesarios que haya que especificar para describir un sistema, aumentan conforme a la complejidad del mismo; no obstante, las propiedades observables ó macroscópicas dependen del comportamiento molecular de los componentes, esto es, el comportamiento microscópico. El describir el comportamiento de este conjunto de partículas es la tarea de la mecánica estadística y particularmente de la termodinámica estadística, las concepciones de este campo varían, según la complejidad del sistema desde representaciones sencillas (modelo de las esferas rígidas) hasta los más sofisticados (que incluyen los efectos cuánticos). Es de este análisis de donde surgen las relaciones matemáticas -- que explican cuantitativamente el fenómeno bajo estudio y la precisión, frecuentemente, está relacionada con la complejidad del modelo diseñado.

Abstraer la fisicoquímica del conocimiento, equivaldría a retroceder al empirismo y la elucubración, por eso es sumamente importante armarla de herramientas cuyo uso la haga versátil y hasta comoda.

La tarea que se desarrolla a continuación va encaminada a la aplicación de la computadora, como herramienta auxiliar, en aspectos de fisicoquímica de uso general.

El lector encontrará a lo largo de esta breve exposición el desarrollo de los siguientes temas:

CAPITULO I: Necesidades de cálculo de propiedades termodinámicas en el área de química.

En él, se explica las situaciones que motivaron la realización del presente.

CAPITULO II: Alternativas y objetivos de trabajo.

Se contemplan las opciones que se presentaron en la etapa inicial, así como la definición del trabajo a desarrollar según la situación.

CAPITULO III: Implantación del sistema.

- a) Se analizan las consideraciones realizadas sobre el estado del sistema.
- b) Se detallan las modificaciones hechas al mismo
- c) Se explica la reconstrucción del sistema a través de los módulos.

CAPITULO IV: Presentación y manejo del sistema

Contiene la capacidad del sistema

Abarca el número de módulos y los cálculos ejecutados.

Contiene las instrucciones que el usuario deberá seguir para manipular el sistema, además de resultados que ejemplifican tales instrucciones.

Conclusiones y recomendaciones.

Incluye las conclusiones del trabajo desarrollado así como las recomendaciones para futuros trabajos que ocupen el presente, lo amplien y/o modifiquen.

Finalmente, el que un químico se interese por un trabajo de esta naturaleza, refleja la inquietud por desarrollar medios de cálculo más convenientes a los actualmente utilizados en diversos

niveles de la carrera y en la rutina del investigador, es por tan
to un servicio que se ofrece a la sección de fisicoquímica, prin-
cipalmente, y a la Facultad de Estudios Superiores, en general.

CAPITULO I

NECESIDADES DE CALCULO DE PROPIEDADES TERMODINAMICAS EN EL AREA DE QUIMICA.--

Para explicar lo que ocurre en nuestro alrededor, lo más conveniente es organizar un modelo; esto es, una representación mental de lo que queremos entender. Tal modelo debe carecer de contradicciones, esencialmente, y expresar lo más precisamente posible el fenómeno investigado.

Hasta nuestros días no existe un modelo que explique con exactitud, no ya un conjunto de fenómenos; sino uno solo, luego entonces, podemos elegir diferentes caminos a seguir, entre ellos:

a) Destruir el modelo original y proponer uno totalmente nuevo.

Este camino requiere, que el autor radicalice su estructura mental ó que, conforme pase el tiempo, una generación posterior lo lleve a cabo. La historia se ha encargado de demostrarnos que la primera posibilidad es extremadamente reducida y que depende de muchos factores el que no ocurra, entre otros, los momentos críticos que sufre toda teoría cuando se profundiza en el conocimiento y el que para entonces su autor no logra sobrevivir. La segunda posibilidad es todavía mas plausible; aunque también ocurre en forma reducida.

b) Complicar el modelo de tal forma que se obtenga mayor precisión.

Esto, es lo que ocurre comúnmente, no requiere que el autor modifique totalmente sus ideas; sino que las afina de tal manera que su confrontación sea lo más satisfactorio posible.

En ambos casos la información disponible se organiza de la manera más conveniente para poder extraer los rasgos esenciales ligados al fenómeno en estudio, éstos deben "traducirse" en alguna notación cuya operación resulte lo más comprensible, compacta y sencilla posible.

En ciencias naturales tal notación se ha complejado lo suficiente, para que algunos lo eleven a la jerarquía de lenguaje.

Tal lenguaje comúnmente utilizado es el matemático. Una vez convenida la forma de expresión, la parte más importante de la construcción del modelo y lo que en verdad constituye el esfuerzo intelectual es: El planteamiento del fenómeno estudiado.

Una vez elaborado el modelo y resuelto los problemas inherentes a él, la etapa inmediata, es la de expresar la información que se desea confrontar con el fenómeno estudiado. En ciencias naturales y particularmente en fisicoquímica, las conclusiones arrojadas por tal modelo y que constituye, por supuesto, información disponible, se suelen expresar en relaciones matemáticas llamadas ecuaciones.

La complejidad de las ecuaciones a menudo depende de la complejidad del modelo elaborado; aunque no siempre, y la experiencia nos muestra que conforme complejemos nuestro modelo, mayor será la precisión de los datos obtenidos al confrontarlos con los reales.

Confrontar la información obtenida por medio del modelo elaborado, significa: Estimar las relaciones matemáticas obtenidas para los puntos de interés y disponibles.

Si las relaciones obtenidas en termodinámica fueran sencillas digamos del tipo:

$$A \propto B \quad \text{y} \quad \therefore A = KB$$

donde K es una constante.

Y si, además, tuviésemos que calcular la variación de A con B por solo 3 ó 4 puntos, no tendría caso utilizar técnicas sofisticadas para resolver nuestro problema; sin embargo, el tipo de ecuaciones que continuamente se obtiene, es del tipo:

$$A = A(X, Y, \dots)$$

Cuya naturaleza explícita diverge en complejidad dependiendo de la propiedad. Citamos, por ejemplo, una función en serie de potencias:

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p = a + bt + ct^2 + dt^3 + \dots$$

Definida como capacidad calorífica a presión constante.

El evaluar una serie de puntos, aunque sea 3 ó 4, implican ya un gasto de tiempo importante, el cual se puede duplicar en caso de cometer errores, aunado a éste debe tomarse en cuenta el utilizado para recopilar la información básica.

En general, existe la necesidad de evaluar propiedades cuya relación no es sencilla.

Si el número de cálculos necesarios para una determinada propiedad, mas que para muy pocos compuestos fuera posible, tampoco sería justificable utilizar tales técnicas; pero afortunadamente existen casos muy generales. Pensemos entonces, en 50 ó más compuestos y 10 ó más relaciones; por tanto, el tiempo necesario para coleccionar los datos básicos, llevar a cabo los cálculos, organizarlos y obtener conclusiones, exige, además de mucha paciencia, de la mayor parte del tiempo disponible, cosa nada fácil para un investigador común.

Como extensión al párrafo anterior se puede añadir la opción de requerir del cálculo de propiedades al variar algún parámetro de interés, esto se puede lograr con incrementos pequeños que pueden cubrir intervalos amplios de condiciones requeridas ó lo que es lo mismo contruir tablas ó gráficas convenientes.

Luego entonces, existe también la necesidad de hacer disponible un medio, por el cual se puede tener acceso a grandes cantidades de información ya sea originales o transformada.

Por otra parte, en los cursos corrientes de Fisicoquímica - II, III Y IV, tanto para Ingenieros Químicos, en Alimentos, Químicos y Químicos Farmacéuticos Biólogos, es frecuente encontrar que la limitación para efectuar predicciones más confiables, es la complejidad del cálculo. Específicamente, en algunas materias -

ya mencionadas, se ven reducidos a resolver problemas cuya complejidad se limita a considerar condiciones ideales; esto es, llevar a cabo cálculos sencillos. Continuamente el docente se frena ante la posibilidad de presentar problemas cuyas consideraciones incluyan situaciones más reales, con el tiempo de clase que se dispone.

El introducir ecuaciones más complejas del tipo Beattie - - Bridgemann, Dietericci, Berthelot, de coeficientes viriales etc., redundará en la profundidad, que de otra manera no es suficientemente clara, de los conceptos explicados y lo que se ha venido -- subrayando: ganar mayor precisión en las predicciones.

Un ejemplo diferente aparece cuando deseamos examinar un sistema en el que ocurren diferentes procesos y/o reacciones con varios componentes. Es obvio que la complejidad de tal sistema no es objeto de solución en corto tiempo; sino que exige de procedimientos más largos y específicos, no obstante en los que se necesita de los datos termodinámicos. Si el alumno es tempranamente iniciado en las técnicas de computación, entonces su principal preocupación recaerá en la forma en que tratará de abordarlo y no en la manera de calcularlo.

En alumnos más avanzados e investigadores, al pretender llevar a cabo proyectos, es necesario, en ciencias químicas, conocer algunos detalles de procesos específicos y evaluarlos. Dada la cantidad de variables que comúnmente se maneja, existen alternativas a seguir:

a) Simulación: con las relaciones matemáticas y datos disponibles, el investigador realiza una serie de operaciones cuyo fin es representar de la manera más adecuada el fenómeno de interés. Tales operaciones son, a menudo, de error y ensayo mediante procedimientos iterativos. La aplicación de la computación ó más explícitamente de sistemas que incluyan la rápida evaluación de cada procedimiento iterativo, electrónicamente, es bastante claro; aun que no siempre obvio.

b) Experimental: en este caso se obtienen los datos deseados y se estructuran de la manera deseada. Si la cantidad de datos es abundante se requiere, también, de las técnicas de computación para hacer análisis exhaustivos.

Las instituciones de educación descentralizadas, de reciente creación, requieren de una estructura adecuada que satisfaga las necesidades académicas de su población, entre las cuales destaca: la información extraclase. La construcción de bibliotecas, hemerotecas, salas audiovisuales, laboratorios, talleres etc., son alternativas en función. Aun así, existen actividades específicas - las cuales no satisface del todo y para las cuales se pueden canalizar otras vías ya existentes; esto es: El centro de cálculo.

De acuerdo a las necesidades, ya expuestas, del uso de la computadora, en la actualidad un investigador tiene que trasladarse a otras instituciones para resolver su problema descuidando así, el objeto central de su investigación.

Aquellas tampoco han satisfecho tales necesidades del todo, - sin embargo, están en posibilidad de resolver premisas básicas.

Por la situación física de las citadas instituciones descentralizadas y los problemas de comunicación vial, resulta difícil efectuar consultas a tales centros, por otra parte, la consulta a tales archivos de datos o sistemas es muy restringido y requiere de un complejo trámite burocrático ó bien el pago del tiempo - utilizado, por el usuario de tal dispositivo.

Ante tal problemática, se reconoce la necesidad de desarrollar un sistema autónomo por medio del cual se proponga resolver lo más ampliamente posible, las necesidades anteriormente expuestas.

CAPITULO II

ALTERNATIVAS Y OBJETIVOS DE TRABAJO

Es usual, entre el personal que estudia ó labora en la -- U.N.A.M., utilizar las propiedades derivadas de la termodinámica específicamente en el área de Ciencias Químicas, para trabajos -- cuyo estudio involucra la transformación de la energía. Estas -- propiedades cuantitativas, suelen ser números que concatenados -- con información alterna, dan un esquema explícito para interpretar lo que ocurre con un determinado proceso.

Tomando en cuenta la situación descrita anteriormente y los medios de que se dispone en la actualidad, trataremos de señalar el panorama al cual se enfrenta un alumno o investigador al requerir de esta información.

1º) Investigación Bibliográfica:

Las fuentes más generales son los libros de texto, éstos a menudo introducen las ecuaciones y condiciones de aplicación de las mismas. Contienen tablas de las propiedades de interés y su variación con respecto a algún parámetro del cual depende en intervalos mas o menos amplios; sin embargo, éstos no son tan amplios como se desearía; por lo cual nos vemos obligados a recurrir a textos mas especializados, de los cuales se presentan -- los siguientes casos:

- a) Principalmente datos sobre algunas sustancias y/o ecuaciones específicas.
- b) Referencias generales.

Si las condiciones de cálculo ó particularidad del sistema difiere, con mucho, de las reportadas corrientemente, entonces la investigación puede consumir tiempo excesivo, de acuerdo claramente, al horario promedio a que está sujeto un investigador y a las limitaciones propias de transporte de su lugar de trabajo -- al lugar físico donde se encuentran las fuentes. En trabajos -- que requieran la mayor precisión es común referirse a las fuentes de primera y segunda mano.

2º) Cálculo.

Una vez encontrada la fuente principal de información, es necesario manipularla; es decir desarrollarla. Tal desarrollo significa: Estimar las citadas propiedades.

Expuesta y reconocida la problemática que nos ocupa, tornamos nuestro interés hacia la forma en que hemos de darle solución, --partiendo desde la etapa inicial que es la consecución de la información.

a) El paso inicial consiste en investigar cuales son las propiedades que revisten mayor interés ó en consecuencia mayor uso cotidiano. Para lo cual, la revisión de textos comunmente usados y la opinión de los profesores (Fisicoquímica e Ingeniería), fué de vital importancia. Estas se expondrán en un capítule posterior detalladamente.

b) Una vez detectadas tales propiedades, se procede a realizar la investigación bibliográfica, simultaneamente se examinan:

- I) Los textos generales
- II) Los textos especializados
- III) La fuente general de referencias. (Chemical Abstracts)

Las referencias obtenidas, tan solo en un año, de cada una de las propiedades es abrumadora, al clasificar parte de esta información se da una cuenta de la naturaleza de estas, las cuales son:

- i) Intervalos específicos de aplicabilidad reducida.
- ii) Componentes poco comunes.
- iii) Mezclas binarias y obtención de parámetros empíricos (ctes.) etc,etc.

Lo cual redundo en hacer sumamente laborioso el trabajo.

Tras esta experiencia inicial cabe hacer notar que lo ideal - sería poder sistematizar esta información tan variada como específica y ofrecerla al lector por medio de la computadora, desgraciadamente no se cuenta, en esta institución, con los recursos humanos y materiales necesarios para llevar a cabo dicha tarea, lo que llevaría, además, tiempo excesivo.

Como camino alternativo se decide revisar las tesis hechas en años anteriores; debido a que estos trabajos proporcionan la generalidad conveniente así como la especificidad deseada; esto es, - una fuente excelente para trabajos singulares. Para realizar la - revisión de tesis, se escogió dos instituciones fértiles en este tipo de trabajos:

Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Química.
Instituto Politécnico Nacional (ESIQIE Y CIEA).

c) Desarrollar el sistema.-

Teniendo en cuenta las necesidades así como el material con - que se cuenta, es posible dilucidar las características que se de - sean posea el sistema, las cuales enunciamos:

- 1) Reunir la mayor cantidad de propiedades
- 2) Reunir la mayor cantidad de constantes específicas - para cada compuesto utilizado y según la propiedad - evaluada.
- 3) Las propiedades sean generales
- 4) La precisión de las propiedades sea la mayor posible
- 5) Proporcione la mayor cantidad de información posible
- 6) Sea fácilmente modificable
- 7) No incluya conocimientos de programación para el usuario
- 8) La interacción usuario computadora sea la mínima posible

Una cuidadosa revisión de las tesis registradas en cada una de las instituciones mencionadas, conduce al trabajo del I.Q. -- Loperena Zuñiga et. al.; trabajo presentado por 3 personas en la Facultad de Química.

Este trabajo posee características básicas afines a nuestros propósitos por lo cual se trató de obtener en la biblioteca del centro de cálculo de C. U.; pero en tal centro se negó su existencia, por lo que se tuvo solamente disponible el trabajo escrito.

Un análisis detenido del citado trabajo revela que el manejo de datos es ineficiente, a nivel de operación de la computadora, rasgo sumamente importante y problema que siempre enfrentaron sus autores.

La máquina en que fué realizado tal tesis es la Burroughs -- B-6700, cuya capacidad de memoria es muy amplia; mientras que la existente en la Facultad de Estudios Superiores es ECLIPSES/130 cuya capacidad de memoria es reducida.

Teniendo presente el objetivo final, que es desarrollar un sistema de evaluación de propiedades termodinámicas y contando con el material conseguido, a este punto se presenta la disyuntiva:

- a) Continuar la revisión bibliográfica hasta crear un sistema con las características deseadas.
- b) Tomar como base la tesis del I.Q. Loperena. et. al. y a partir de él desarrollar el sistema que se desea.

La decisión fué favorable a la segunda opción por las siguientes razones:

Dada las características de dicha tesis, cubría en gran parte la labor que necesitaba la primera opción, pero principalmente, -- debido a la ineficiencia del manejo de la capacidad de memoria.

Por lo tanto se definen objetivos de trabajo para conseguir - el objetivo final (terminal), los cuales son:

i) Hacer que el trabajo de tesis del I.Q. Loperena Z. - et. al sea compatible con las características de la **ECLIPSE S/130**.

ii) Maximizar la eficiencia en el manejo de la capacidad de memoria.

Las opiniones experimentadas suelen aconsejar se continúe con los buenos trabajos hasta lograr los mejores resultados posibles, esto redundará en mayor confiabilidad de los trabajos realizados, al estar continuamente bajo examen.

Existe la convicción de que la tarea que a continuación se expone, cumple con los objetivos y necesidades anteriormente descrititos, hasta donde ha sido posible y revelan el deseo de continuar con un trabajo bien realizado, para el mejor desempeño del mismo y beneficio de los usuarios.

CAPITULO III

IMPLANTACION DEL SISTEMA

Una vez bosquejados los objetivos de trabajo, en el capítulo anterior, se procede a describir las alternativas propuestas, a fin de darle solución al problema en cuestión.

Se comenzará por explicar las características del programa original, en forma general, conocer la problemática que involucra tal programa y posteriormente presentar las soluciones propuestas.

CARACTERISTICAS DEL PROGRAMA ORIGINAL

- 1) Ha sido desarrollado en la computadora Burroughs B-6700, localizada en el centro de servicios de cómputo de la U.N.A.M., en lenguaje FORTRAN IV.

Tal situación concede a dicho programa la ventaja de poder manejar capacidad de memoria mucho mayor que la que ofrecen las computadoras del tipo mini, como la ECLIPSE S/130, en las escuelas descentralizadas.

- 2) El sistema está diseñado para que se utilice el mínimo de conocimientos de FORTRAN IV

Esto es, se ha procurado que la interacción usuariocomputadora sea la mínima posible; requiriendo ésta, solamente la especificación de un pequeño grupo de datos para funcionamiento interno de la computadora

- 3) Es capaz de manejar 55 sustancias diferentes (10 a la vez) cuyo uso es frecuente y la desviación del estado ideal, por politropismo, sea mínimo.

4) Considera las propiedades más comunes, tanto termodinámicas como de transporte, las cuales son:

- I) DENSIDAD
- II) ENTALPIA
- III) CONDUCTIVIDAD TERMICA
- IV) CAPACIDAD CALORIFICA
- V) VISCOSIDAD
- VI) CALOR LATENTE DE VAPORIZACION
- VII) PRESION DE VAPOR
- VIII) TENSION SUPERFICIAL
- IX) DIFUSION

5) Evalúa las ecuaciones que producen el mínimo error, según las condiciones requeridas.

6) El programa, estructuralmente, es modular. Los módulos son independientes entre sí y coordinados por un programa principal.

7) Cada módulo ó subrutina evalúa una propiedad o bien sirve como auxiliar en el funcionamiento interno.

8) Dada la amplitud de las propiedades y compuestos utilizados; es necesario contar con una gran cantidad de datos; - estos son agrupados en una subrutina llamada BLOCK DATA.-- (Características más profundas serán expuestas posteriormente conforme lo requiera la explicación de la implantación del sistema).

IMPLANTACION DEL SISTEMA.

Debido a las características que presenta el programa original es claro que aprovechar al máximo cada una de éstas compete con la capacidad de memoria a la que está sujeta la máquina a utilizar:
ECLIPSE 8/130.

Expondremos por tanto las soluciones propuestas, en el desarrollo del trabajo, coherentes con las características del lenguaje, diseño del programa y capacidad de memoria de la máquina a utilizar.

En principio, es necesario analizar cada una de las subrutinas esto es, se desgloza el programa en cada uno de sus componentes y se investiga:

- a) Características de funcionamiento.
- b) Relación con otras subrutinas y con el programa principal.
- c) Reproducibilidad de resultados.

Al término de ésta, se conocen los detalles de incompatibilidad entre una máquina y otra, que explicaremos posteriormente en forma amplia; pero que cabe presentarlos en este momento, ellos son: I.1, I.2, I.3, I.4, I.6 y I.10

Los datos necesarios para cada una de ellas fueron introducidos como variables mediante tarjetas.

Una vez verificados cada uno de los módulos, tanto de las propiedades como los auxiliares, se precede a la reunión de éstos, interrelacionándolos por medio de programas principales temporales, los cuales van aumentando su complejidad según la cantidad y/o calidad de las subrutinas utilizadas.

En la evaluación de un compuesto puro, los datos necesarios para cada una de las subrutinas y todos en conjunto se manejaron por medio de la subrutina BLOCK DATA en un arreglo de 33 elementos, lo que probó haber funcionado, referenciados unidimensionalmente; por ejemplo:

R M = VAL (3)

Pero esta forma de trabajar el conjunto de datos, no facilita la elección de cualquiera de los compuestos (55), que como se - -

mostrará posteriormente es la parte central del trabajo; por lo tanto se tuvo que recurrir a los recursos disponibles en la computadora.

Los nuevos detalles encontrados y modificados se contemplan en los puntos: I.5, I.7, I.8, I.9 y II.1 a II.4.

Ya reunido el sistema es necesario introducir el banco de datos para poder hacer las elecciones que se requieran, dicha introducción no ha sido sencilla, sin embargo, en el punto II.4, se explica la forma en que se resolvió el problema.

Al cubrir la investigación se identifican los detalles inherentes al sistema que lo hacían ineficiente e inoperable, a pesar de su estructura modular, debido a la diferencia entre máquinas utilizadas y de recursos operados. Tales diferencias se considerarán en las siguientes categorías:

I) Relativas a la compilación y ejecución de las instrucciones

I.1) Tarjetas de control.

Cada máquina posee un grupo particular de instrucciones las cuales, intrínsecamente, efectúan lo mismo; pero son distinguidas por palabras diferentes (claves).

I.2) En las tarjetas de control se introduce la opción P.

El programa original fué escrito como se acostumbraba hacerlo, esto es:

Columna 1: con una C significa un comentario

Columnas 1 a 5: para etiquetar las proposiciones.

Columna 6: para continuar alguna expresión no terminada en la tarjeta anterior.

Columna 7-72: para compilación de expresiones FORTRAN IV.

Actualmente, la ECLIPSE S/130 acepta la compilación hasta -- la columna 80.

En la perforación de las tarjetas, por ser muchísimas (aproximadamente 3000), se decidió numerarlas haciendo las perforaciones correspondientes a partir de la columna 74

La ECLIPSE S/130 tiene la capacidad de ignorar los blancos -- que se interpongan al declarar una instrucción en un renglón; por consiguiente todo lo que se perfora en una tarjeta lo considera -- como parte de una instrucción única; por ejemplo:

Instrucción	Número de Tarjeta.
CG TS 100	1111

En vez de llevar el control a la proposición con etiqueta -- 100, tratará de llevarla a la 1001111, marcando múltiples errores. Se pensó duplicar nuevamente las tarjetas solamente hasta la columna 72 y numerarlas sin perforar; afortunadamente existe la opción de compilación de 72 caracteres por línea de registro: P.

I.3) Corrección a la correspondencia de variables en -- las proposiciones.

Dado el gran número de proposiciones, se incurrió en el error (quizá involuntario) de trabajar con modos mixtos de variables, por ejemplo:

```
EV = CLV * M          ( SUBROUTINE ROSA (PV) )  
M = 1. / (0.0853 + ....) ( SUBROUTINE INTALP(H) ) etc.
```

La computadora ECLIPSE S/130 marcaba error de conversión ó -- bien no asignaba el valor correctamente, esto se solucionó dando el modo real a los valores con punto decimal y el modo entero para las cuales no lo llevan, dequiera que se necesitase, quedando las expresiones como se asienta enseguida:

HV = CLV * RM

AM = 1. / (0.0853 + -----) etc.

Este error es aparentemente insignificante; pero dada la situación de la variable equivocada, mostraba diferencias muy apreciables.

I.4) Corrección a la correspondencia de constante - variable en las proposiciones.

El modo mixto entre variables no solamente fué advertido; sino también entre constantes, por ejemplo:

DATA VAL / 0,0, 273., 1.23 E-2,---- / (BLACK DATA)

DATA LVP / 0.1, 0.3 ----- / (SUBROUTINE VIS (V))etc.

Lo cual fué corregido o bien asignando el punto decimal ó modificando el nombre de la variable. Esto fué muy comunmente encontrado, tanto en expresiones aritméticas, lógicas, proposición DATA - como en las proposiciones COMMON.

I.5) Corrección en la caracterización y/o nombre de las constantes alfanuméricas.

Originalmente se utilizó constantes alfanuméricas que contenían una o varias espacias en blanco con formato Hollerith y éste se aprovechaba como caracter distintivo, por ejemplo:

HCAPACI contiene todos los caracteres necesarios.

HCAALOR no satisface el campo asignado.

Combinado lo anterior con la incapacidad, de la ECLIPSE #/130, de poder comparar 6 caracteres a la vez, no dejó otra alternativa que evitar la inclusión de tales constantes sustituyéndolas por otras que explicaremos posteriormente.

I.6) Corrección de variables para compatibilidad del sistema.

La ECLIPSE S/130 como todas las máquinas posee un grupo de caracteres alfanuméricos, que no deben ser utilizados explícitamente en el programa a compilar, por ejemplo:

SIN, T\$ etc.

Tal fué el caso, dado el cambio de computadora, por ejemplo:

PVAP fué cambiado por ROSA.

I.7) Situación adecuada de las proposiciones DATA.

Inicialmente se acostumbraba situar la proposición DATA en donde se necesitase, dados los requerimientos de la ECLIPSE S/130, esto puede ser llevado a cabo en la subrutina BLACK DATA, adjudicándole una proposición ~~CARDEN~~ etiquetada, lo cual fue realizado.

I.8) Corrección en instrucciones de transporte de control.

El desarrollo del programa original presenta, frecuentemente, situaciones donde es necesario decidir entre caminos alternativos: por ejemplo: Dada una instrucción nos interesa transferirnos a otra posterior sin ejecutar las intermedias: esto es:

```
IF (ICOND. EQ. "AA") G$ T$ 10  
CALL ERR$R (5)  
10 READ (10) INDEX.
```

Al interpretarle observamos:

Si ICOND es igual a la constante "AA" no hay problema pues el control se transfiere a la etiqueta con número 10; pero si ICOND no es igual a "AA" entonces llama al error 5 y posteriormente leerá la variable INDEX, lo que es incorrecto.

La solución estriba en introducir los transportes de control adecuados; ya sea en la forma `GO TO` ó `RETURN` para terminar el programa después de un error ó retornarlo al programa principal, si se trata de una subrutina.

I.9) Corrección en la lectura y/o comparación de las constantes alfanuméricas.

En la Burroughs B-6700 la comparación y/o lectura de las constantes alfanuméricas se puede efectuar tanto en variables reales como en enteras; pero en la ECLIPSE S/130 existe la limitación a solo lectura y comparación con variables enteras. En el programa deben ir encerradas entre comillas, de otra forma lo tomará como variables.

I.10) Se introduce la opción de entrada / salida no formatada.

Doquiera que ha sido posible se ha introducido la lectura ó escritura no formatada, esto es particularmente útil en la entrada cuando deseamos leer varios datos con diferentes campos.

Con el `READ` ó `WRITE` no formatados, los valores solo son separados por comas y no es necesario asignar columnas en la tarjeta de datos.

II) Relativo a la capacidad de la computadora requerida.

El problema principal y eje de este trabajo es minimizar la capacidad de memoria requerida. De hecho, es la más importante contribución a la labor original.

Describiremos en seguida la naturaleza del problema y de como se solucionó teniendo siempre presente, que de no haber erradicado los errores de sintaxis, compilación y ejecución anteriormente

descritos, no habría servido esta segunda parte; puesto que la computadora es de tal modo exigente, que sencillamente no proporciona los resultados correctos, hasta que se demuestre la consistencia interna del programa.

Ya se ha apuntado, al principio de este capítulo, que el programa original consta de una gran cantidad de datos numéricos, -- unos generales y otros específicos, para evaluar todas y cada una de las propiedades presentadas.

Un solo compuesto requiere de 38 datos, cada uno de estos representa una propiedad ó constante característica útil y según el diseño del programa su situación es importante. Por otra parte, -- el número de compuestos es 55 requiriendo la misma cantidad de datos, cada uno de ellos, sumando, por lo tanto: $38 \times 55 = 2090$ datos totales.

Se organizó una disposición matricial del tamaño 38×55 y se colocó dentro de la subrutina BLOCK DATA. Los valores se hacen -- disponibles al programa principal por medio de una proposición -- ~~COMMON~~ de la forma:

~~COMMON~~ / AUX / ARR (38,55)

Tal instrucción colocaba los datos de cada compuesto, en el arreglo matricial, en columnas, esto es, 38 datos de un compuesto en una columna, otros 38 en la siguiente etc., hasta completar la matriz de 38×55 . Consideraron mejor tener el arreglo, en vez de -- columnas, por renglones e invirtieron la matriz, llamándole a la matriz invertida VAL (55,38) y entonces hacer disponibles los valores por medio de la proposición siguiente:

~~COMMON~~ / CONS / VAL (55,38)

La naturaleza de los datos es real; este es, con punto decimal por lo cual para guardarlos en memoria se requiere de 2 palabras (2 series de 16 bit) de memoria, siendo el número de palabras totales:

2090 x 2 = 4180	provenientes de la matriz ARR (38,55)
2090 x 2 = 4180	provenientes de la matriz VAL (55,38)
<u>8360</u>	palabras totales a guardar en memoria.

Tal requerimiento es excesivo; pero aún nos falta contabilizar las palabras provenientes del resto del programa lo que nos hace pensar en la gran capacidad necesaria.

La mayor capacidad de memoria de la computadora Burroughs -- B 6700 permite que se lleve a cabo; pero no así la ECLIPSE S/130, que es con la que se cuenta en la FES-C.

Dado su mayor tamaño la palabra de la Burroughs B-6700 es capaz de comparar, leer y escribir constantes alfanuméricas en formato Hellerth 6 A hasta de 6 caracteres, lo que utiliza para seleccionar diferentes condiciones, propiedades y unidades mediante un arreglo adecuado. La ECLIPSE S/130 no está en condiciones de llevar a cabo tales actividades; por lo que a continuación se exponen las alternativas propuestas para solucionar tal problema.

II.1 Cambio en la forma de elegir la condición a efectuar, -- las unidades de los datos de entrada y las propiedades a utilizar.

La forma de elegir las condiciones de cálculo, era comparar -- la variable COND contra una constante alfanumérica en formato -- Hellerith hasta de 6 caracteres, por ejemplo:

```
IF ( COND. EQ. 6H PURO ) G O T O 10
```

Como ya hemos dicho la ECLIPSE S/130 no es capaz de compilar tal instrucción por lo que fue cambiado a una serie de caracteres llamado constantes "string" (en cadena ó encadenadas) tales constantes tienen la propiedad de corresponder a una variable entera, o sea: 1 palabra de memoria, mediante la asignación del campo entero, se pueden diferenciar 2 caracteres, los cuales pueden ser introducidos (y lo fueron) en formato A2.

La correspondencia de caracteres se describe en el apéndice B. La decisión de haber usado tales caracteres, estriba en la poca - diferenciabilidad de las dos primeras letras de las constantes - alfanuméricas, inicialmente utilizadas. Como ya se explicó ante- - riormente (I.9), la identificación de la constante string debe - ir asociada por una variable entera de otra forma la computadora no marca error alguno; pero tampoco efectúa la instrucción deseada.

Como el programa original tiene la opción de introducir los - dates en diferentes unidades, tales unidades se deben especificar en la lectura de dates. La lectura se realizaba también por medio de constantes string, se consideró que era lo conveniente, para - evitar la confusión con otras variables. La correspondencia de - caracteres se describe en el Apéndice B

Ahora, como se observa en la subrutina SIDEU (OU) (Apéndice A), ya no se comparan los caracteres; sino que asignamos el núme- ro directamente y se ejecuta la instrucción.

Para elegir la propiedad a evaluar, nuevamente surge el mismo problema, utilizando los mismos procedimientos anteriores solamen- te se introdujo la modificación en la forma de escribir la propie- dad. Aprovechamos la distinguibilidad de los dos primeros caracte- res para escribir el nombre completo.

La máquina solo distingue las dos primeras letras y el resto las ignora; pero no importa ya que éstas sean diferentes y se pue- den utilizar en la comparación. El campo de lectura es obviamente: A2. La correspondencia de caracteres se describe en el apéndice B

II.2 Modificación de las proposiciones DATA para elegir las propiedades.

Como consecuencia de lo anterior es claro que había que modi- ficar las proposiciones DATA de acuerdo a las variables definidas

que son las siguientes:

```
DATA LXAV / "CA", "VA", "EN", "DE", "VI", "CG", "PR",  
"TE", "AL" /
```

II.3 Modificación en la subrutina TABLA (J PRP)

Debido a que la selección de la propiedad y la de la tabla es casi la misma, ambas requerían casi los mismos DATA excepto por uno o dos elementos, el crear nuevos DATA sin esos elementos aumentaría la memoria usada, por lo que se decidió introducir instrucciones de comparación para llevar a cabo la elección adecuada. Ver subrutina TABLA (JPRP) instrucciones 2222 a 777 (Apendice A).

II.4 Minimización del BLOCK DATA

Mediante el BLOCK DATA es posible englobar gran cantidad de datos, que son utilizados para inicializar constantes ó variables dentro del programa. Si se utilizaran todas las subrutinas, a la vez, el número de valores realmente necesarios son: 38 para cada compuesto; mientras que se ha referenciado un archivo de 2090 datos de los cuales 2052 no son inmediatamente utilizables.

He aquí el gran desperdicio de espacio útil en la memoria, -- que no podemos evitar; mientras exista como tal la instrucción BLOCK DATA, debido a que el grabado de datos es permanente y al querer referirse, aunque sea, a dos ó tres datos hay que citar el gran BLOCK DATA.

La solución consiste en minimizar el requerimiento de tales datos en conjunto, que son las siguientes:

La estructura original de los datos y su modificación se puede consultar en el apéndice B. Se ha considerado que algunos de ellos pueden ser operados en forma diferente.

- 1) La clave del compuesto no es necesaria puesto que podemos introducirlo como dato.
- 2) Nombre del compuesto: La ECLIPSE S/130 no puede compararse 6 -- caracteres sino 2. Con este formato, el nombre introduciría 12 nuevos datos, por ejemplo:

T E T R A C L O R U R O _ D E _ C A R B O N O _
 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12

por cada compuesto; pero son 55 compuestos lo que ocasionaría un incremento de datos de: $55 (12-3) = 495$. Por lo tanto es evidente que la inclusión del nombre en el BLOCK DATA no precede.

La decisión fue organizar una lista de los compuestos y adjudicarles un dato numérico identificado como INDEX, éste sirve como la clave del compuesto, interiormente. Así, se elimina la subrutina SELEC (ANOM, INDEX) que en base al nombre del compuesto introducido como dato, asignaba un dato numérico a la variable INDEX.

Consecuentemente a las medidas tomadas, ha sido necesario --- crear nuevas subrutinas que son:

- a) ϕ MAR (INDEX): que tiene la función de escribir el nombre del compuesto a partir del argumento INDEX.
- b) EXTRAE (BUF, INDEX, J)
- c) DISPON (INDEX)
- d) CARGA (BUFF, INDEX, J) (Apéndice C)

La función de las 3 últimas subrutinas es la siguiente:

El afán de minimizar la memoria usada por el BLOCK DATA encasó a partir la memoria en matrices de (33,10) y de (33,5) resultando infructuoso pues la computadora indicaba memoria insuficiente para ejecutar el programa.

Una alternativa fue dejar el programa haciendo las referencias unidimensionalmente; pero es evidentemente molesto tener que manejar diferentes juegos de datos (55), cuando es necesario las propiedades para diferentes compuestos, además de riesgosa, pues una mala colocación de ellos ofrece resultados terribles.

Es posible introducir datos no directamente a la computadora sino a dispositivos adyacentes a ella, por ejemplo en disco, que no ocupan espacio de memoria y a los cuales se les puede referenciar en el momento adecuado.

Se prepara, por tanto, un programa que tiene la función de grabar los datos disponibles al disco. Como la grabación se lleva a cabo linealmente, es necesario adjudicarle un lugar a cada elemento de la matriz, por lo cual se creó una función que cumple el cometido y se procede a la grabación. Este programa es completamente independiente al que nos ocupa y tiene como subrutina solamente a la llamada: `CANJA (BUFF, INDEX, J)`. Ver apéndice C.

Si los datos no existen permanentemente grabados en disco bajo el nombre de archivo `TESIS.DT`, entonces, antes de compilar el programa que evalúa las propiedades debe compilarse el programa que graba los datos, una vez hecho ya no es necesario regrabarlos, a menos que el archivo se borre a propósito.

Grabados los datos, la subrutina `EXTRAE (BUF, INDEX, J)` tiene la función de leer los datos grabados de disco mientras que la SUBROUTINA `DISPEN (INDEX)` ofrece los datos en un arreglo matricial `ARR (J)`, 33 en total, por medio de la instrucción `COMMON / AUX / VAL (33)`. Ver apéndice B

relegando así al `BLCK DATA` a solamente aquellos `DATA` que no pueden ser acomodados en las subrutinas respectivas.

Es evidente que el ahorro de palabras de memoria al realizarse la ejecución del programa es el siguiente:

2090 x 2 = 4180 provenientes de la matriz ARR (38,55)
2090 x 2 = 4180 provenientes de la matriz VAL (55,38)
8360 palabras totales a guardar en memoria.

Al eliminar el arreglo bidimensional se elimina la inversión de la matriz quedando 4180 palabras y al citarse solo 33 datos - de disco, quedarán por tanto solo 66. El ahorro es por tanto de 8294 palabras de memoria.

Se tiene la convicción de haber cumplido los objetivos inicialmente trazados, con lo anteriormente expuesto, pues se ha resuelto la problemática fundamental.

CAPITULO IV

PRESENTACION Y MANEJO DEL SISTEMA.

En el capítulo anterior describimos las modificaciones hechas al programa original. Al presente, se relaciona al lector con la capacidad y opciones del sistema implantado, para proceder a explicar, posteriormente, las etapas que debe cumplir el usuario - para poder utilizarlo.

PRESENTACION

Programa principal .-

Se caracteriza el programa principal por lo siguiente:

- a) Cumple la función de coordinar los módulos de que consta el sistema, por medio de los llamados a las subrutinas correspondientes.
- b) Da lectura de los parámetros útiles al sistema los cuales son:

JPROP: Denota la propiedad que se desea evaluar (Según apéndice B)

ICOND: Denota la condición en la cual se lleva a cabo la evaluación (según apéndice B)

NCOMP: Se refiere al número de compuestos manejados por el sistema.

T: Temperatura a la cual se lleva a cabo la evaluación.

P: Presión a la cual se lleva a cabo la evaluación.

TRE: Temperatura de referencia a la cual se efectúa la evaluación.

U: Opción de unidades ligado a los datos de entrada.

INDEX: Número ligado al compuesto que maneja el sistema (Según AMON (INDEX), Apéndice A)

TF: Temperatura final a la cual se efectúa la evaluación

TINC: Incremento de la temperatura.

PF: Presión final a la cual se efectúa la evaluación.

PINC: Incremento de la presión.

c) Verifica:

Que el intervalo de compuestos a utilizar sea de 1 a 10
Que las unidades sean compatibles con las utilizadas anteriormente.
Que la condición de evaluación exista.

d) Elige:

Dadas las condiciones a evaluar: el estado del compuesto, mediante la evaluación de la presión de vapor.

Dado ICND: la condición a evaluar.

Dado JPRSP: la propiedad a evaluar.

e) Termina el programa cuando encuentra cualquier error en la especificación de los parámetros leídos.

f) Declara el error cometido resultando fácilmente localizable.

g) Termina normalmente el programa.

Como se observará (Apendice A), el programa principal contiene mas instrucciones, correspondientes a la opción de las men-
clas, la cual no se ha implementado; pero que muy pronto será hecha disponible. Se conservan, entonces, para uso posterior.

Subrutinas.-

CALOR LATENTE DE VAPORIZACION

Ecuación utilizada: Procopio y Jen Su

Limitaciones: Sin límite

Error aceptable: 1.85 a 4%

Unidades: BTU/LB

CAPACIDAD CALORÍFICA (Cp)

Ecuación utilizada: Polinomio en serie de potencias

Limitaciones:

Aplicable a 364 compuestos orgánicos y 53 compuestos inorgánicos.

Error aceptable:

$\leq 1.44\%$ para gases

$\leq 3\%$ para líquidos

Unidades: CAL / G-MOL °K

CONDUCTIVIDAD TÉRMICA.-

Ecuaciones utilizadas:

Rubins / Kingree: Compuestos orgánicos

Palmer (corrección de): Compuestos inorgánicos

Sucken (corrección de): Gases (con corrección por presión de Stiel y Thodos)

} Líquidos

Depende de Cp, α y β , el error en éstas se propaga en CT. Para líquidos puede utilizarse por debajo del punto de ebullición con error aceptado del 15% y en gases se acepta el 10%.

Error aceptable: 10 - 15 %

Unidades: BTU / HR - PIE - °F

DENSIDAD.-

Ecuaciones utilizadas:

Goldhammer (correlación modificada) : líquidos

Utilizando el factor de compresibilidad: gases.

Limitaciones:

Hasta 0.98 (T_c) en líquidos.

$0.5 \leq Tr < 0.97$ para gases, no es precisa en el punto crítico y presiones altas.

Error aceptable:

$\approx 2\%$ en gases

1 a 3 % en líquidos

Unidades: LBS / PIE³

ENTALPIA.-

Ecuaciones utilizadas:

Ecuación del polinomio, con corrección por presión, por el método de Yen Alexander y Factor de compresibilidad: Gases.

Ecuación del polinomio: líquidos.

Limitaciones:

Hay grandes variaciones por la presión: Gases

Según validez de las constantes: Líquidos.

No se evalúa la entalpía por cambios de fase.

Error aceptable:

Depende de C_p y factor de compresibilidad, $\approx 2\%$: Gases

Depende de C_p , $\approx 3\%$: Líquidos

Unidades: CAL / G - MOL.

FACTOR DE COMPRESIBILIDAD.-

Ecuaciones utilizadas:

Redlich - Kwong modificada

Limitaciones:

$Pr > 2$ Se utiliza la corrección por el método de Redlich - Ackerman.

$Pr < 2$ Se utiliza la corrección por el método de Gray, Kent y Zudkevitch.

Error aceptable:

3 a 5 %, depende de la presión y de errores muy apreciables en la región crítica.

Unidades: adimensional

PRESION DE VAPOR.-

Ecuaciones utilizadas:

$10 < PV \leq 1500$: Miller (semireducida)

$PV > 1500$: Riedel - Flanck - Miller (mm Hg)

Limitaciones:

No se ha tomado en cuenta el efecto de la presión total.

Error aceptable:

1.54 - 2.9 %

Unidades: M M H G

TENSION SUPERFICIAL.-

Ecuación utilizada:

Mitra - Sanyal

Limitaciones:

La temperatura debe ser menor que la crítica y presiones bajas.

Error aceptable:

Depende de la temperatura , 0.5 a 2.5 %

Unidades: DININAS/ CM.

VISCOSIDAD.-

Ecuaciones utilizadas:

Guzman - Andrade : Líquidos

Sutherland (para $T > T_c$): Gases

Limitaciones:

Sólo líquidos Newtonianos en el intervalo del punto de -
congelación hasta antes del punto de ebullición.

Error aceptado:

Varía de acuerdo al tipo de compuesto calculado y se ob-
serva la variación desde 5 hasta 40 %.

Unidades: CENTIPOISES.

SIDESTU.-

Función:

Convierte los datos introducidos, T Y P a unidades in-
teriormente utilizados (°K, atm).

ERROR .-

Función:

Designa el error cometido en el transcurso del programa.

SELECP.-

Función:

Elige la propiedad deseada y ejecuta la evaluación de
una ó todas las propiedades.

TABLA.-

Función:

Elige y genera una tabla de la propiedad deseada & de todas las propiedades.

SMAR.-

Función:

Escribe el nombre del compuesto.

BLACK DATA.-

Función:

Engloba los datos interiormente disponibles

DISPON.-

Función:

Hace disponibles los datos necesarios para que se lleve a cabo la evaluación de las propiedades.

EXTRAE.-

Función:

Extrae los datos necesarios (33) a partir de disco.

MANEJO DEL SISTEMA

Se recomienda que el usuario siga las instrucciones a desarrollar, de otra forma puede exponerse a la declaración de los errores interiormente enunciados.

La información requerida por el programa se introducirá por medio de tarjetas perforadas, las cuales tienen la siguiente estructura.

PRIMERA TARJETA.- Debe proporcionar: JPR^{OP}, IC^{OND}, NC^{OMP} de la siguiente forma:

- I) JPR^{OP} = Propiedad a calcular. Se aclara que el sistema solo tiene opción para una de ellas o todas juntas. Se escribirá conforme el apéndice B a partir de la columna 1 hasta la 24 inclusive.
- II) IC^{OND} = Metodo de cálculo a efectuar. Se escribirá según el apéndice B a partir de la columna 25
- III) NC^{OMP} = Número de componentes presentes en el cálculo - para la opción pares = 01 a partir de la columna 30.

SEGUNDA TARJETA.- Debe proporcionar T, P, TRE, β U de la manera siguiente:

- IV) Temperatura de cálculo = T (°C, °K, °F) a partir de la primera columna hasta la 10 inclusive.
- V) Presión de cálculo = P (Atm, mmdeHg, pies de agua, pulgadas de Hg, libras por pulgada cuadrada, libras por pie -- cuadrado y kilograma por centímetro cuadrado) a partir de la columna 11 hasta la 20.
- VI) Temperatura de referencia= TRE (°C, °K, °F) a partir de la columna 21 hasta la 30.
- VII) β U = Opción de unidades = β U según apéndice B, a partir de la columna 31 y de acuerdo con la naturaleza de los datos introducidos.

TERCERA TARJETA.- Debe proporcionar INDEX.

- VIII) INDEX = La clave del compuesto que se desea evaluar las propiedades según apéndice A a partir de la primera columna.

Nota: Tener cuidado con la perforación de esta tarjeta si el número escogido es menor a 10 debiera perforarse con un cero a la izquierda ejemplo: 5 sera perforado como 05.

CUARTA TARJETA.- Debe proporcionar TF, TINC & PF y PINC ambas para la generación de tabla, a partir de la columna 1 a 10 y 11 a 20 respectivamente.

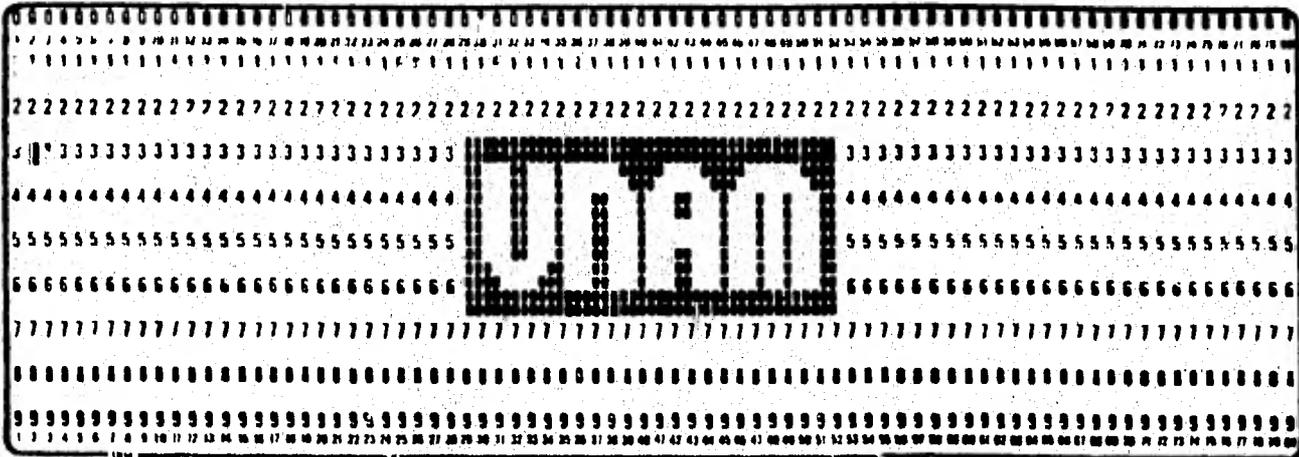
EJEMPLOS:

09
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40 41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 80

32.0 760.0 32.0 13.0
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40 41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 80

ALL AA 01
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40 41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 80

I:



MEM DE MEXICO, S. A. 8838-C
MEM DE MEXICO, S. A. 8838-C
MEM DE MEXICO, S. A. 8838-C

39

PRIMERA TARJETA:
JPROP : ALL (TODAS)
ICOND : AA (PUBC)
NCOMI : 01

SEGUNDA TARJETA:
T : 32.0 °F
P : 760.0 MMHG
TRK : 32.0 °F
OU : 13.0 (FLAMHG)

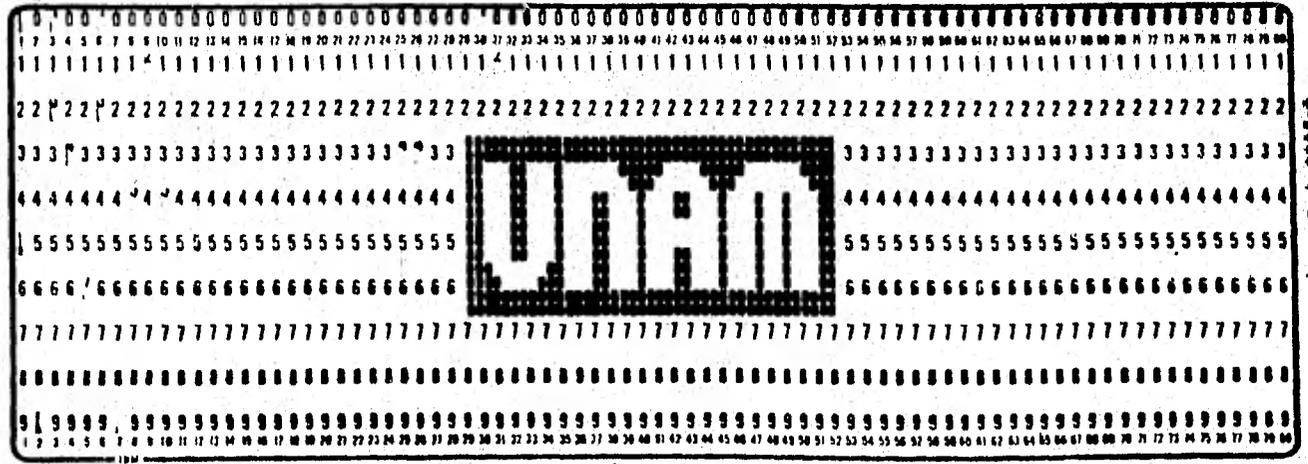
TERCERA TARJETA:
INDEX : 09 (BENCENO)

REGLADO

ENTALPIA A TEMPERATURA DEBIDA ES MENOR QUE 0.5 Y
NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICIONES

CAPACIDAD CALORIFICA A PRESION CAL/G-MOL-K	0.312500E	2
CALOR LATENTE DE VAPORIZACION CAL/G	0.409350E	4
ENTALPIA CAL/G-MOL	0.000000E	0
DE BIEN 10/PIE	0.000000E	0
VISCOSIDAD CENTIPOISES	0.001000E	2
CONDUCTIVIDAD TERMICA BTU/HR-PIE ² -F/PIE	0.013700E	2
PRESION DE VAPOR MMHG	0.636000E	2
TENSION SUPERFICIAL DINAS/CM	0.310000E	2

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40 41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 80
 05
 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40 41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 80
 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40 41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 80
 VISCOSIDAD CC 01



MEM de Mexico, S. A. 0000-C
 MEM de Mexico, S. A. 0000-C
 MEM de Mexico, S. A. 0000-C

41

PRIMERA TARJETA:
 JPROP : VISCOSIDAD
 ICOND : CC (TABLA A F-CTE.)
 NCOMP : 01

SEGUNDA TARJETA:
 T : 32.0 °F
 P : 760.0 MMHG
 TRE : 32.0 °F
 OU : 13.0 (FMMHG)

TERCERA TARJETA
 INDEA : 05 (AIRE)

CUARTA TARJETA
 TF : 180.0 °F
 TINC : 2.0 °F

AIRE

GENERACION DE TABLA

TEMPERATURA INICIAL-K = 273.00
TEMPERATURA FINAL-K = 355.22
INCREMENTO DE TEMPERATURA-K = 1.11
PRESION DE CALCULO-ATM = 1.00

TEMPERATURA-K VISCOSIDAD-CENTIPOISES

273.00	0.170869E	-1
274.11	0.171216E	-1
275.22	0.171563E	-1
276.33	0.171909E	-1
277.44	0.172255E	-1
278.55	0.172600E	-1
279.67	0.172944E	-1
280.78	0.173288E	-1
281.89	0.173630E	-1
283.00	0.173972E	-1
284.11	0.174314E	-1
285.22	0.174655E	-1
286.33	0.174995E	-1
287.44	0.175334E	-1
288.55	0.175673E	-1
289.67	0.176011E	-1
290.78	0.176349E	-1
291.89	0.176686E	-1
293.00	0.177022E	-1
294.11	0.177357E	-1
295.22	0.177692E	-1
296.33	0.178027E	-1
297.44	0.178360E	-1
298.55	0.178693E	-1
299.67	0.179026E	-1
300.78	0.179358E	-1
301.89	0.179690E	-1
303.00	0.180020E	-1
304.11	0.180350E	-1
305.22	0.180679E	-1
306.33	0.181008E	-1
307.44	0.181336E	-1
308.55	0.181664E	-1
309.67	0.181991E	-1
310.78	0.182317E	-1
311.89	0.182643E	-1
313.00	0.182968E	-1
314.11	0.183293E	-1
315.22	0.183617E	-1
316.33	0.183941E	-1
317.44	0.184264E	-1
318.55	0.184586E	-1
319.67	0.184908E	-1
320.78	0.185229E	-1
321.89	0.185550E	-1
323.00	0.185870E	-1
324.11	0.186190E	-1
325.22	0.186509E	-1
326.33	0.186827E	-1
327.44	0.187145E	-1
328.55	0.187463E	-1
329.67	0.187780E	-1
330.78	0.188096E	-1
331.89	0.188412E	-1
333.00	0.188727E	-1
334.11	0.189042E	-1
335.22	0.189356E	-1
336.33	0.189670E	-1
337.44	0.189983E	-1
338.55	0.190296E	-1
339.67	0.190608E	-1
340.78	0.190920E	-1
341.89	0.191231E	-1
343.00	0.191542E	-1
344.11	0.191852E	-1
345.22	0.192162E	-1
346.33	0.192471E	-1
347.44	0.192780E	-1
348.55	0.193088E	-1
349.67	0.193396E	-1
350.78	0.193703E	-1
351.89	0.194010E	-1
353.00	0.194316E	-1
354.11	0.194622E	-1
355.22	0.194927E	-1
356.33	0.195232E	-1

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.

Es deseable indicar las actividades orientadas a la modificación y complementación del programa implementado, enseguida se cumple tal cometido, para concluir, finalmente, las ideas expuestas.

MODIFICACIONES AL SISTEMA.

El presente trabajo es solamente el inicio de uno más completo por tanto, es claro que se deben hacer las modificaciones correspondientes en cuanto se obtengan las condiciones para complementarlo.

Se tratará en esta sección de las modificaciones susceptibles al sistema implementado, actualmente, y a continuación se designará la ruta a seguir para implementar el resto del programa original.

A) ESTADO ACTUAL.

A.1) MODIFICACIONES EN EL BANCO DE DATOS:

a) ADICION DE NUEVOS COMPUESTOS:

La adición de nuevos compuestos no tiene ninguna influencia sobre el banco de datos, pues se está utilizando los datos de un solo compuesto en el programa (33); mientras que el resto se guarda en disco.

El orden de perforación de los datos nuevos, debe ser respetado, rigurosamente, de acuerdo a la descripción del apéndice B.

En el programa auxiliar (Apéndice C) se anotan las modificaciones siguientes:

DØ 50 INDEX = 1,55 por DØ 50 INDEX = 1, N

donde N = 55 + NCA y NCA= número de compuestos añadidos.

b) Adición de propiedades:

Ya que el banco de datos disponibles ha sido reducido a un arreglo de 33 elementos, que corresponden a valores característicos del compuesto en cuestión, al añadir nuevas propiedades a evaluar se deben introducir, si es necesario, nuevos datos para calcularlas.

La variación en las instrucciones, por tal motivo, son las siguientes:

b.1) Perforese el valor del parámetro introducido en cada uno de los juegos de datos que corresponden a cada compuesto, guardando riguroso orden. Si en algún determinado compuesto no existiese algún particular parámetro, llénese el lugar con 0.0 y procedase a perforar el siguiente parámetro.

b.2) En la relación del banco de datos con el programa las modificaciones son las siguientes:

~~COMMON~~ / AUX / ARR (33) por

~~COMMON~~ / AUX / ARR (33 + NPA)

En la subrutina EXTRAE se cambia la instrucción:

IP (L,M) = (L-1) * 33 + M por

IP (L,M) = (L-1) * K + M

En la subrutina DISPON:

DØ 60 J = 1,33 por

DØ 60 J = 1, K

En el programa auxiliar (apéndice C):

```
DIMENSION BUFF ( 33 ) por  
DIMENSION BUFF ( K )
```

```
D  $\neq$  50 J = 1,33 por
```

```
D  $\neq$  50 J = 1, K
```

En la subrutina del programa auxiliar, CARGA:

```
IP ( L,M ) = ( L-1 ) * 33 + M por
```

```
IP ( L,M ) = ( L-1 ) * K + M
```

donde $K = 33 + NPA$ y $NPA =$ número de parámetros añadidos.

Nota: K debe ser un número no una variable a menos que se es
pecifique el valor de esta.

A.2) Modificaciones en el programa:

a) Nuevos compuestos:

En subrutina $\$MAR$ se cambian las siguientes instrucciones:

```
IF ( INDEX. GT . 1.  $\$R$ . LE.55 )  $\$G$   $\$T$  555 por
```

```
IF ( INDEX. GT . 1.  $\$R$ . LE.N )  $\$G$   $\$T$  555
```

donde $N = 55 + NCA$ (un número no una variable)

$NCA =$ Número de compuestos añadidos.

```
555  $\$G$   $\$T$  ( 1, -----,55 ), INDEX por
```

```
555  $\$G$   $\$T$  ( 1, -----,55 I, J, -----, N ), INDEX
```

donde I, J, K, -----, N son los números ligados a los nuevos
compuestos, ejemplo:

```
I WRITE ( 12 ) "TESTONIS "
```

```
 $\$G$   $\$T$  100
```

I, J, K, ---- N deben ser números a partir de 56

b) Nuevas propiedades:

El arreglo interior de la subrutina depende de la propiedad a evaluar, como módulo se puede manejar a través de los bloques - - SELECP ó TABLA ó ambos, según el caso.

En general, las instrucciones que se deben modificar son:

a) En el BLOCK DATA se introducen las constantes alfanuméricas características de cada propiedad anteriormente a la constante alfanumérica "AL", que es la opción a calcular todas las propiedades. Por consiguiente debemos cambiar el COMMON / TX / LXAU (9) por COMMON / TX / LXAU (L) donde $L = 9 + NPA$ y NPA = número de propiedades añadidas.

Por ejemplo: Si se desea evaluar PRESIÓN OSMÓTICA, la constante alfanumérica ligada a la propiedad sería: P~~OS~~, RQ etc., las instrucciones serían:

```
COMMON / TX / LXAU (10)
DATA LXAU / "CA", - - - - "POS", "AL" /
```

Así mismo se introducirían en COMMON las variables que se deseen manejar en la nueva subrutina.

b) En la subrutina SELECP y/o TABLA se cambian las instrucciones de elección y asignación según el número de propiedades incluidas para elección individual y/o global en la opción todas, adjudiándole el formato correspondiente.

Finalmente, es indudable que hay correlaciones que ofrecen aproximaciones mayores en los cálculos de una determinada propiedad; aunque, generalmente éstas se restringen a intervalos limitados o a número de compuestos relativamente escasos. Su introducción será acompañada por las correspondientes proposiciones lógicas.

cas en la subrutina operada ó bien en nuevas subrutinas con las -
indicaciones arriba expresadas.

B Implementación del resto del programa.

Implementar el resto del programa, equivale a introducir 14 -
nuevas subrutinas: 9 para evaluación de propiedades termodinámicas en mezclas y 6 auxiliares de la opción MEZCLAS.

Agregarlas al programa ya implementado significaría; rebasar la capacidad de memoria, actualmente disponible, debido al tamaño del mismo.

Tal problema, probablemente, se puede resolver recurriendo a la técnica de OVERLAY disponible en la ECLIPSE S/130.

El OVERLAY se puede usar cuando la memoria no es lo suficientemente grande, para acomodar un programa entero. Al utilizarlo, solamente el programa principal y las subrutinas que no se especifican en OVERLAY, permanecen en la memoria, permanentemente; mientras que el resto de las subrutinas son acomodadas en disco, a las cuales se puede recurrir en el momento deseado. De esta manera se puede reducir el espacio de memoria a solamente aquellas subrutinas que se están, realmente, utilizando.

La ordenación de los OVERLAY cubrirá la menor área, tanto en disco como en la memoria, adecuando las instrucciones de relocalización. Tal técnica ofrece el recurso de la memoria virtual; esto es, la utilización de las subrutinas, realmente necesarias al tiempo de ejecución.

Disponiendo de tal recurso, entonces prosigue:

1° Determinar las subrutinas mas utilizadas.

Esto es con el fin de que permanezcan en memoria permanentemente.

- 2° Se abre el archivo de OVERLAY
- 3° Se nombra cada subrutina por un nombre de OVERLAY
- 4° Se indican las instrucciones de OVERLAY
- 5° Se relocalizan los OVERLAY.

Una vez que se dispone de la estructura en la forma de OVERLAY lo precedente es la modificación de las subrutinas mismas, según I.1 a I.10 y II.1 a II.4 del capítulo anterior, para la opción - - MEZCLAS.

Probada la consistencia de las subrutinas de mezclas, con las hasta ahora implementadas, no asegura su funcionalidad; debido a que es necesario aportar juegos de datos y propiedades de compuestos puros, por medio de arreglos para cada variable, hasta de 10 - elementos por arreglo.

Afortunadamente, la estructura de las subrutinas de mezclas -- permite:

- a) Reunir los datos de las constantes características e introducirlo en el arreglo específico para cada compuesto.
- b) Evaluar las propiedades características y agruparlas en los arreglos correspondientes para posteriormente, evaluar la - propiedad de la mezcla teniendo los datos requeridos. Tal requerimiento puede ser satisfecho, al colocar adecuadamente los llamados a las subrutinas EXTRAE y de evaluación de las propiedades de los compuestos puros, respectivamente, a fin de, una vez reunidos evaluar la propiedad de la MEZCLA.

CONCLUSIONES

Se reconoce que las aplicaciones de la computación en la mayoría de las ciencias, como en la ingeniería, son extensas y diversas. Las instituciones educativas a nivel profesional, como la FES-C, se preocupan de que tal herramienta sea asequible. No obstante, tal disponibilidad requiere constante evolución, para lo cual se desarrollan trabajos cada día más complejos que, sin embargo, forman a su vez material básico de posteriores desarrollos.

El objetivo final, desarrollar un programa para evaluación de propiedades termodinámicas ha sido satisfecho. La capacidad corriente de la computadora ECLIPSE S/130 han limitado el trabajo que inicialmente fue propuesto; sin embargo, en la actualidad es posible evaluar las propiedades de compuestos puros a Temperatura y Presión constante ó variando cualquiera de ellas y manteniendo la otra constante. Por otra parte, ahora es posible acumular grupos de datos mayores que los 55 inicialmente manejados y tal acumulación solo depende de la capacidad del disco donde se graban éstos.

Al alumno e investigador se le proporciona una herramienta poderosa, la cual debe permanecer en constante evolución y lo que es más importante: ser utilizada.

Al término del presente, la sensación de ser un poco más arquitecto que artesano, debería invadir al lector; pues el hacer uso de esta herramienta, indefectiblemente lo llevará a elevar la precisión de sus resultados y profundizar en sus consideraciones antes que preocuparse por la rutina del cálculo. Si es docente encontrará un buen auxiliar pedagógico.

A P E N D I C E A

1 DGC FONTRAM IV REV 05.20ES

```
1 COMMON/ARCH/I
2 COMMON/MTX/ICOMP,X(10),ICOND,INDICE(10)
3 COMMON/TX/LXAR(9)
4 COMMON/AUX/ARR(33)
5 COMMON/SIV/VLP(A)
6 COMMON/EST/T,P,EDD,TRE,INDEX
7 COMMON/MT/IF,TINC,PF,PINC,KEDO
8 CALL FOPEN(10,"TMO")
9 CALL FOPEN(12,"SY9OUT")
10 LI=44
11 CALL OPEN (11,"YES19.DT",P,IE,20)
12 READ (10,49) JPROP, ICOND, NCOMP
13 49 FORMAT (A2,22X,A2,3X,I2)
14 IF (NCOMP.GT.0.OR.NCOMP.LE.10) GO TO 48
15 CALL FPROP (I)
16 GO TO 950
17 48 READ (10,51) T,P,TRE,OU
18 51 FORMAT (4F10.4)
19 IF (ICOND.EQ."AA") GO TO 10
20 IF (ICOND.EQ."HH") GO TO 50
21 IF (ICOND.EQ."CC") GO TO 10
22 IF (ICOND.EQ."DD") GO TO 10
23 IF (ICOND.EQ."EE") GO TO 10
24 IF (ICOND.EQ."FF") GO TO 10
25 IF (ICOND.EQ."GG") GO TO 50
26 IF (ICOND.EQ."HH") GO TO 50
27 IF (ICOND.EQ."QQ") GO TO 50
28 IF (ICOND.EQ."UU") GO TO 50
29 CALL ERROR (5)
30 GO TO 950
31 10 READ (10,52) INDEX
32 52 FORMAT (I2)
33 CALL OMAR(INDEX)
34 CALL DISPON(INDEX)
35 IF (ICOND.EQ."AA") GO TO 29
36 IF (ICOND.EQ."DD" OR ICOND.EQ."FF") GO TO 31
37 READ (10,59) IF,TINC
38 59 FORMAT (2F10.3)
39 GO TO 29
40 31 READ (10,59) PF,PINC
41 29 IF (OU.EQ.0.0) GO TO 901
42 CALL RIDEU(OU)
43 901 CALL ROSA(PV)
44 PV=PV/760.
45 IF (PV.GT.P) GO TO 81
46 EDD=0.
47 GO TO 84
48 81 EDD=1.
49 84 IF (ICOND.EQ."AA") GO TO 152
50 CALL REFLECP (JPROP)
51 GO TO 950
52 152 IF (ICOND.EQ."EE" OR ICOND.EQ."FF") GO TO 57
53 CALL TARI A (JPROP)
54 GO TO 950
55 57 WRITE (10) "YA NO EXISTE LA OPCION GRAFICA EN ESTE PROGRAMA"
56 GO TO 950
57 50 READ (10,44) KEDO
58 84 FORMAT (I2)
59 IF (KEDO.EQ."LI") GO TO 102
60 EDD=1.
61 GO TO 21
62 102 EDD=0.
63 21 DO 88 I=1,NCOMP
64 READ (12,53) INDEX, X(I)
65 53 FORMAT (I2,2X,F6.4)
66 INDICE(I)=INDEX
```


7 DCC FORTRAN IV REV 05.20ES

```
7  
7 CCCC  
7 SUBROUTINE PARA CALCULAR EL CALOR LATENTE DE VAPORIZACION EN BTU/LB  
7 POR EL METODO DE PROCIPIO Y JEN-SH  
7  
7 SUBROUTINE CALV(HV)  
7 COMMON/EST/T,P,EDD,TRE,INDEX  
7 COMMON/ALX/ARR(33)  
7 TC=ARR(6)  
7 TPE=ARR(11)  
7 PC=ARR(7)  
7 IF (T.GE.TC) GO TO 25  
7 HV=(2.034*TPE*LOG(PC)*(1.-1./PC))/(1.-TPE/TC)*((1.-T/TC)/(1.-TPE/  
7 TC))**0.38  
7 GO TO 20  
7 25 WRITE(12,201)  
7 201 FORMAT(10X,'CALOR LATENTE:LA TEMPERATURA ES MAYOR QUE LA TEMPERATU  
7 RA CRITICA')  
7 20 RETURN  
7 END
```

PROGRAM IS RELOCATABLE .TITL CALV
IFORT/B/L/P CAPC.RR/B

```

C
C
C SUBROUTINA PARA CALCULAR EL CP DE UN COMPUESTO EN CAL/G-MOL-K ME-
C DIANTE LA ECUACION DEL POLINOMIO
C
C SUBROUTINE CAPC(CP)
COMMON/aux/arr(33)
COMMON/est/T,P,LD0,TR,INDEX
RM=ARR(3)
YC=ARR(6)
PC=ARR(7)
W=ARR(32)
IF(ED0.EQ.1.) GO TO 100
C
C
C CALCULO DEL CP DEL COMPUESTO LIQUIDO
C
C
C T=T-273.1
C A=ARR(16)
C B=ARR(17)
C C=ARR(31)
C IF(A.EQ.0.) GO TO 13
C CP=A+B*T+C*T*T
C T=T+273.1
C GO TO 20
13 CALL ERROR (9)
RETURN
C
C
C CALCULO DEL CP DEL COMPUESTO GASEOSO
100 A=ARR(10)
B=ARR(11)
C=ARR(12)
D=ARR(13)
CP0=((D*T+C)*T+H)*T+A
C
C
C CORRECCION POR PRESSION
C
C TR=T/YC
C PR=P/PC
C FAC=PR*((0.660-0.92*W)*TR**(-2)+(0.831+3.0*W)*TR**(-3.)+(0.145+
C 1.6*W)*TR**(-4.)+(0.526*W*TR**(-9.)))
C CP=CP0-((1.987/RM)*FAC)
20 RETURN
END

```

PROGRAM IS RELOCATABLE .TITL CAPC
IFORT/D/L/P CONT,RR/R

```

C
C
C SUBROUTINE PARA CALCULAR LA CONDUCTIVIDAD TERMICA EN BTU/HR-PIE-F
SUBROUTINE CONT(CT)
COMMON/FSY/T,P,FDO,TRE,INDEX
COMMON/AMX/ARR(33)
RM=ARR(3)
TPE=ARR(4)
DPE=ARR(5)
TC=ARR(6)
PC=ARR(7)
THT/TC
IF (FDO.EQ.1.) GO TO 700

CALCULO DE LA CONDUCTIVIDAD TERMICA DEL LIQUIDO
PLE=2.03+TPE*ALOG(PC)*(1.-1./PC)/(1.-TPE/TC)
CALL CAPC(CP)
IF (ARR(2).NE.0.) GO TO 98
IF (ARR(25).EQ.0.) GO TO 98

CALCULO DE LA CONDUCTIVIDAD TERMICA
DE LIQUIDOS ORGANICOS
POR EL METODO DE RUMHINS-KINGREFA
TCR=TC*1.8
THR=TPE*1.8
DE20=ARR(25)
CALL DEF(D)
CP=CP/RM
HV=PI.F*RM
DB=(HV/THR)+1.987*ALOG(10(492./THR))
M=ARR(33)
IF (DE20=0.99706) M,.88,.89
84 USE
GO TO 99
88 M=1
99 CT=((66.0-4.83*M)/(1000.*DS))*(0.55/(T+1.8/TCR))*M*(CP*(D+1.33
1)/DM**0.33333)
RETURN

CALCULO DE LA CONDUCTIVIDAD TERMICA
DE LIQUIDOS INORGANICOS POR EL
METODO CORRECCION DE PALMER
98 CT=41.2*CP*((DR/DM)**1.333)*(TPE/PLE)*(0.55/TH)
RETURN

CALCULO DE LA CONDUCTIVIDAD TERMICA DEL GAS
POR EL METODO CORRECCION DE EUCKEN
700 CALL CAPC(CP)
CP=CP/RM
CALL VTS(V)
CT=2.42*V*(CP+(2.48/R**1))
IF (P.GT.10.0) GO TO 11
RETURN

CORRECCION POR PRESION DEL GAS POR EL METODO DE STEEL Y THOMAS
11 CALL DEF(D)
DE0/A2 37
DENCBARR(M)
DENMB/DENC
ZC=ARR(9)
IF (DENR.LE.0.1) GO TO 12
GAM=(TC*0.146666)*M**0.5/(PC**0.44666)
IF (DENR.GE.0.5) GO TO 20
CT=(14.8*(10.**(-M))*(EXP(-0.535*DENR)-1.))/((ZC**5)*GAM**4)+CT)
RETURN
20 IF (DENR.GT.2.0) GO TO 18
CT=(13.1*(10.**(-M))*(EXP(0.67*DENR)-1.069))/((ZC**5)*GAM**4)+CT)
RETURN
30 IF (DENR.GT.2.0) GO TO 40
CT=(2.97*(10.**(-M))*(EXP(1.155*DENR)+2.016))/((ZC**5)*GAM**4)+CT)
RETURN
40 CT=1.0
WRITE (12,50)
50 FORMAT(15X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA NO SE CALCULO DENTRO",/,15X,"A
15X," DE LAS ALTAS CONDICIONES DE PRESION.",/)
GO TO 113
12 WRITE (12,15)
15 FORMAT(15X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA NO SE CORREGIO",/,15X,"POR QUE
15X," LA UNION PUES NO SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",/)
113 RETURN
END

```

1 D.C. 11-TRAB IV REV 1. 1968

```
1 SUBROUTINE PARA CALCULAR LA DENSIDAD DE UN COMPUESTO EN LBS/PIE3
2
3 SUBROUTINE DEN (D)
4 COMMON ZEST/I,P,COO,TRE,INDEX
5 COMMON ZMIX/ZARR(33)
6 REAL*8(3)
7 IF (EPO.EQ.1.) GO TO 101
8
9 CALCULO DE LA DENSIDAD DEL COMPUESTO LIQUIDO POR MEDIO DE LA COMPRE-
10 LACION MODIFICADA DE GOLDHAMMER.
11
12 TPE=ARR(4)
13 TCE=ARR(6)
14 DCE=ARR(30)
15 YRET=TC
16 DVE=DP/(0.0206*TPE)
17 AFS=(1/TPE)-1.
18 DVE=(10.0+AFS)*DVB
19 IF (T.GE.TC) GO TO 25
20 D=OV+VIX*((1.-TW)*0.3)
21 D=0.6237
22 GO TO 20
23
24 WRITE(12,26)
25 FORMAT(15X,"DENSIDAD: LA TEMPERATURA DE CALCULO ES MAYOR",/,15X,"
26 QUE LA TEMPERATURA CRITICA DEL COMPUESTO",/)
27 RETURN
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60
61
62
63
64
65
66
67
68
69
70
71
72
73
74
75
76
77
78
79
80
81
82
83
84
85
86
87
88
89
90
91
92
93
94
95
96
97
98
99
100
101
102
103
104
105
106
107
108
109
110
111
112
113
114
115
116
117
118
119
120
121
122
123
124
125
126
127
128
129
130
131
132
133
134
135
136
137
138
139
140
141
142
143
144
145
146
147
148
149
150
151
152
153
154
155
156
157
158
159
160
161
162
163
164
165
166
167
168
169
170
171
172
173
174
175
176
177
178
179
180
181
182
183
184
185
186
187
188
189
190
191
192
193
194
195
196
197
198
199
200
201
202
203
204
205
206
207
208
209
210
211
212
213
214
215
216
217
218
219
220
221
222
223
224
225
226
227
228
229
230
231
232
233
234
235
236
237
238
239
240
241
242
243
244
245
246
247
248
249
250
251
252
253
254
255
256
257
258
259
260
261
262
263
264
265
266
267
268
269
270
271
272
273
274
275
276
277
278
279
280
281
282
283
284
285
286
287
288
289
290
291
292
293
294
295
296
297
298
299
300
301
302
303
304
305
306
307
308
309
310
311
312
313
314
315
316
317
318
319
320
321
322
323
324
325
326
327
328
329
330
331
332
333
334
335
336
337
338
339
340
341
342
343
344
345
346
347
348
349
350
351
352
353
354
355
356
357
358
359
360
361
362
363
364
365
366
367
368
369
370
371
372
373
374
375
376
377
378
379
380
381
382
383
384
385
386
387
388
389
390
391
392
393
394
395
396
397
398
399
400
401
402
403
404
405
406
407
408
409
410
411
412
413
414
415
416
417
418
419
420
421
422
423
424
425
426
427
428
429
430
431
432
433
434
435
436
437
438
439
440
441
442
443
444
445
446
447
448
449
450
451
452
453
454
455
456
457
458
459
460
461
462
463
464
465
466
467
468
469
470
471
472
473
474
475
476
477
478
479
480
481
482
483
484
485
486
487
488
489
490
491
492
493
494
495
496
497
498
499
500
501
502
503
504
505
506
507
508
509
510
511
512
513
514
515
516
517
518
519
520
521
522
523
524
525
526
527
528
529
530
531
532
533
534
535
536
537
538
539
540
541
542
543
544
545
546
547
548
549
550
551
552
553
554
555
556
557
558
559
560
561
562
563
564
565
566
567
568
569
570
571
572
573
574
575
576
577
578
579
580
581
582
583
584
585
586
587
588
589
590
591
592
593
594
595
596
597
598
599
600
601
602
603
604
605
606
607
608
609
610
611
612
613
614
615
616
617
618
619
620
621
622
623
624
625
626
627
628
629
630
631
632
633
634
635
636
637
638
639
640
641
642
643
644
645
646
647
648
649
650
651
652
653
654
655
656
657
658
659
660
661
662
663
664
665
666
667
668
669
670
671
672
673
674
675
676
677
678
679
680
681
682
683
684
685
686
687
688
689
690
691
692
693
694
695
696
697
698
699
700
701
702
703
704
705
706
707
708
709
710
711
712
713
714
715
716
717
718
719
720
721
722
723
724
725
726
727
728
729
730
731
732
733
734
735
736
737
738
739
740
741
742
743
744
745
746
747
748
749
750
751
752
753
754
755
756
757
758
759
760
761
762
763
764
765
766
767
768
769
770
771
772
773
774
775
776
777
778
779
780
781
782
783
784
785
786
787
788
789
790
791
792
793
794
795
796
797
798
799
800
801
802
803
804
805
806
807
808
809
810
811
812
813
814
815
816
817
818
819
820
821
822
823
824
825
826
827
828
829
830
831
832
833
834
835
836
837
838
839
840
841
842
843
844
845
846
847
848
849
850
851
852
853
854
855
856
857
858
859
860
861
862
863
864
865
866
867
868
869
870
871
872
873
874
875
876
877
878
879
880
881
882
883
884
885
886
887
888
889
890
891
892
893
894
895
896
897
898
899
900
901
902
903
904
905
906
907
908
909
910
911
912
913
914
915
916
917
918
919
920
921
922
923
924
925
926
927
928
929
930
931
932
933
934
935
936
937
938
939
940
941
942
943
944
945
946
947
948
949
950
951
952
953
954
955
956
957
958
959
960
961
962
963
964
965
966
967
968
969
970
971
972
973
974
975
976
977
978
979
980
981
982
983
984
985
986
987
988
989
990
991
992
993
994
995
996
997
998
999
1000
1001
1002
1003
1004
1005
1006
1007
1008
1009
1010
1011
1012
1013
1014
1015
1016
1017
1018
1019
1020
1021
1022
1023
1024
1025
1026
1027
1028
1029
1030
1031
1032
1033
1034
1035
1036
1037
1038
1039
1040
1041
1042
1043
1044
1045
1046
1047
1048
1049
1050
1051
1052
1053
1054
1055
1056
1057
1058
1059
1060
1061
1062
1063
1064
1065
1066
1067
1068
1069
1070
1071
1072
1073
1074
1075
1076
1077
1078
1079
1080
1081
1082
1083
1084
1085
1086
1087
1088
1089
1090
1091
1092
1093
1094
1095
1096
1097
1098
1099
1100
1101
1102
1103
1104
1105
1106
1107
1108
1109
1110
1111
1112
1113
1114
1115
1116
1117
1118
1119
1120
1121
1122
1123
1124
1125
1126
1127
1128
1129
1130
1131
1132
1133
1134
1135
1136
1137
1138
1139
1140
1141
1142
1143
1144
1145
1146
1147
1148
1149
1150
1151
1152
1153
1154
1155
1156
1157
1158
1159
1160
1161
1162
1163
1164
1165
1166
1167
1168
1169
1170
1171
1172
1173
1174
1175
1176
1177
1178
1179
1180
1181
1182
1183
1184
1185
1186
1187
1188
1189
1190
1191
1192
1193
1194
1195
1196
1197
1198
1199
1200
1201
1202
1203
1204
1205
1206
1207
1208
1209
1210
1211
1212
1213
1214
1215
1216
1217
1218
1219
1220
1221
1222
1223
1224
1225
1226
1227
1228
1229
1230
1231
1232
1233
1234
1235
1236
1237
1238
1239
1240
1241
1242
1243
1244
1245
1246
1247
1248
1249
1250
1251
1252
1253
1254
1255
1256
1257
1258
1259
1260
1261
1262
1263
1264
1265
1266
1267
1268
1269
1270
1271
1272
1273
1274
1275
1276
1277
1278
1279
1280
1281
1282
1283
1284
1285
1286
1287
1288
1289
1290
1291
1292
1293
1294
1295
1296
1297
1298
1299
1300
1301
1302
1303
1304
1305
1306
1307
1308
1309
1310
1311
1312
1313
1314
1315
1316
1317
1318
1319
1320
1321
1322
1323
1324
1325
1326
1327
1328
1329
1330
1331
1332
1333
1334
1335
1336
1337
1338
1339
1340
1341
1342
1343
1344
1345
1346
1347
1348
1349
1350
1351
1352
1353
1354
1355
1356
1357
1358
1359
1360
1361
1362
1363
1364
1365
1366
1367
1368
1369
1370
1371
1372
1373
1374
1375
1376
1377
1378
1379
1380
1381
1382
1383
1384
1385
1386
1387
1388
1389
1390
1391
1392
1393
1394
1395
1396
1397
1398
1399
1400
1401
1402
1403
1404
1405
1406
1407
1408
1409
1410
1411
1412
1413
1414
1415
1416
1417
1418
1419
1420
1421
1422
1423
1424
1425
1426
1427
1428
1429
1430
1431
1432
1433
1434
1435
1436
1437
1438
1439
1440
1441
1442
1443
1444
1445
1446
1447
1448
1449
1450
1451
1452
1453
1454
1455
1456
1457
1458
1459
1460
1461
1462
1463
1464
1465
1466
1467
1468
1469
1470
1471
1472
1473
1474
1475
1476
1477
1478
1479
1480
1481
1482
1483
1484
1485
1486
1487
1488
1489
1490
1491
1492
1493
1494
1495
1496
1497
1498
1499
1500
1501
1502
1503
1504
1505
1506
1507
1508
1509
1510
1511
1512
1513
1514
1515
1516
1517
1518
1519
1520
1521
1522
1523
1524
1525
1526
1527
1528
1529
1530
1531
1532
1533
1534
1535
1536
1537
1538
1539
1540
1541
1542
1543
1544
1545
1546
1547
1548
1549
1550
1551
1552
1553
1554
1555
1556
1557
1558
1559
1560
1561
1562
1563
1564
1565
1566
1567
1568
1569
1570
1571
1572
1573
1574
1575
1576
1577
1578
1579
1580
1581
1582
1583
1584
1585
1586
1587
1588
1589
1590
1591
1592
1593
1594
1595
1596
1597
1598
1599
1600
1601
1602
1603
1604
1605
1606
1607
1608
1609
1610
1611
1612
1613
1614
1615
1616
1617
1618
1619
1620
1621
1622
1623
1624
1625
1626
1627
1628
1629
1630
1631
1632
1633
1634
1635
1636
1637
1638
1639
1640
1641
1642
1643
1644
1645
1646
1647
1648
1649
1650
1651
1652
1653
1654
1655
1656
1657
1658
1659
1660
1661
1662
1663
1664
1665
1666
1667
1668
1669
1670
1671
1672
1673
1674
1675
1676
1677
1678
1679
1680
1681
1682
1683
1684
1685
1686
1687
1688
1689
1690
1691
1692
1693
1694
1695
1696
1697
1698
1699
1700
1701
1702
1703
1704
1705
1706
1707
1708
1709
1710
1711
1712
1713
1714
1715
1716
1717
1718
1719
1720
1721
1722
1723
1724
1725
1726
1727
1728
1729
1730
1731
1732
1733
1734
1735
1736
1737
1738
1739
1740
1741
1742
1743
1744
1745
1746
1747
1748
1749
1750
1751
1752
1753
1754
1755
1756
1757
1758
1759
1760
1761
1762
1763
1764
1765
1766
1767
1768
1769
1770
1771
1772
1773
1774
1775
1776
1777
1778
1779
1780
1781
1782
1783
1784
1785
1786
1787
1788
1789
1790
1791
1792
1793
1794
1795
1796
1797
1798
1799
1800
1801
1802
1803
1804
1805
1806
1807
1808
1809
1810
1811
1812
1813
1814
1815
1816
1817
1818
1819
1820
1821
1822
1823
1824
1825
1826
1827
1828
1829
1830
1831
1832
1833
1834
1835
1836
1837
1838
1839
1840
1841
1842
1843
1844
1845
1846
1847
1848
1849
1850
1851
1852
1853
1854
1855
1856
1857
1858
1859
1860
1861
1862
1863
1864
1865
1866
1867
1868
1869
1870
1871
1872
1873
1874
1875
1876
1877
1878
1879
1880
1881
1882
1883
1884
1885
1886
1887
1888
1889
1890
1891
1892
1893
1894
1895
1896
1897
1898
1899
1900
1901
1902
1903
1904
1905
1906
1907
1908
1909
1910
1911
1912
1913
1914
1915
1916
1917
1918
1919
1920
1921
1922
1923
1924
1925
1926
1927
1928
1929
1930
1931
1932
1933
1934
1935
1936
1937
1938
1939
1940
1941
1942
1943
1944
1945
1946
1947
1948
1949
1950
1951
1952
1953
1954
1955
1956
1957
1958
1959
1960
1961
1962
1963
1964
1965
1966
1967
1968
1969
1970
1971
1972
1973
1974
1975
1976
1977
1978
1979
1980
1981
1982
1983
1984
1985
1986
1987
1988
1989
1990
1991
1992
1993
1994
1995
1996
1997
1998
1999
2000
2001
2002
2003
2004
2005
2006
2007
2008
2009
2010
2011
2012
2013
2014
2015
2016
2017
2018
2019
2020
2021
2022
2023
2024
2025
2026
2027
2028
2029
2030
2031
2032
2033
2034
2035
2036
2037
2038
2039
2040
2041
2042
2043
2044
2045
2046
2047
2048
2049
2050
2051
2052
2053
2054
2055
2056
2057
2058
2059
2060
2061
2062
2063
2064
2065
2066
2067
2068
2069
2070
2071
2072
2073
2074
2075
2076
2077
2078
2079
2080
2081
2082
2083
2084
2085
2086
2087
2088
2089
2090
2091
2092
2093
2094
2095
2096
2097
2098
2099
2100
2101
2102
2103
2104
2105
2106
2107
2108
2109
2110
2111
2112
2113
2114
2115
2116
2117
2118
2119
2120
2121
2122
2123
2124
2125
2126
2127
2128
2129
2130
2131
2132
2133
2134
2135
2136
2137
2138
2139
2140
2141
2142
2143
2144
2145
2146
2147
2148
2149
2150
2151
2152
2153
2154
2155
2156
2157
2158
2159
2160
2161
2162
2163
2164
2165
2166
2167
2168
2169
2170
2171
2172
2173
2174
2175
2176
2177
2178
2179
2180
2181
2182
2183
2184
2185
2186
2187
2188
2189
2190
2191
2192
2193
2194
2195
2196
2197
2198
2199
2200
2201
2202
2203
2204
2205
2206
2207
2208
2209
2210
2211
2212
2213
2214
2215
2216
2217
2218
2219
2220
2221
2222
2223
2224
2225
2226
2227
2228
2229
2230
2231
2232
2233
2234
2235
2236
2237
2238
2239
2240
2241
2242
2243
2244
2245
2246
2247
2248
2249
2250
2251
2252
2253
2254
2255
2256
2257
2258
2259
2260
2261
2262
2263
2264
2265
2266
2267
2268
2269
2270
2271
2272
2273
2274
2275
2276
2277
2278
2279
2280
2281
2282
2283
2284
2285
2286
2287
2288
2289
2290
2291
2292
2293
2294
2295
2296
2297
2298
2299
2300
2301
2302
2303
2304
2305
2306
2307
2308
2309
2310
2311
2312
2313
2314
2315
2316
2317
2318
2319
2320
2321
2322
2323
2324
2325
2326
2327
2328
2329
2330
2331
2332
2333
2334
2335
2336
2337
2338
2339
2340
2341
2342
2343
2344
2345
2346
2347
2348
2349
2350
2351
2352
2353
2354
2355
2356
2357
2358
2359
2360
2361
2362
2363
2364
2365
2366
2367
2368
2369
2370
2371
2372
2373
2374
2375
2376
2377
2378
2379
2380
2381
2382
2383
2384
2385
2386
2387
2388
2389
2390
2391
2392
2393
2394
2395
2396
2397
2398
2399
2400
2401
2402
2403
2404
2405
2406
2407
2408
2409
2410
2411
2412
2413
2414
2415
2416
2417
2418
2419
2420
2421
2422
2423
2424
2425
2426
2427
2428
2429
2430
2431
2432
2433
2434
2435
2436
2437
2438
2439
2440
2441
2442
2443
2444
2445
2446
2447
2448
2449
2450
2451
2452
2453
2454
2455
2456
2457
2458
2459
2460
2461
2462
2463
2464
2465
2466
2467
2468
2469
2470
2471
2472
2473
2474
2475
2476
2477
2478
2479
2480
2481
2482
2483
2484
2485
2486
2487
2488
2489
2490
2491
2492
2493
2494
2495
2496
2497
2498
2499
2500
2501
2502
2503
2504
2505
2506
2507
2508
2509
2510
2511
2512
2513
2514
2515
2516
2517
2518
2519
2520
2521
2522
2523
2524
2525
2526
2527
2528
2529
2530
2531
2532
2533
2534
2535
2536
2537
2538
2539
2540
2541
2542
2543
2544
2545
2546
2547
2548
2549
2550
2551
2552
2553
2554
2555
2556
2557
2558
2559
2560
2561
2562
2563
2564
2565
2566
2567
2568
2569
2570
2571
2572
2573
2574
2575
2576
2577
2578
2579
2580
2581
2582
2583
2584
2585
2586
2587
2588
2589
2590
2591
2592
2593
2594
2595
2596
2597
2598
2599
2600
2601
2602
2603
2604
2605
2606
2607
2608
2609
2610
2611
2612
2613
2614
2615
2616
2617
2618
2619
2620
2621
2622
2623
2624
2625
2626
2627
2628
2629
```

```

C
C
C
SUBROUTINE PARA CALCULAR LA ENTALPIA DE UN COMPUESTO EN CAL/G-MOL
MEDIANTE LA INTEGRACION DEL POLINOMIO.
C
SUBROUTINE ENTALP (H)
COMMON/EST/T,P,EDD,TRE,INDEX
COMMON/AUX/ARR(33)
TC=ARR(6)
PC=ARR(7)
ZC=ARR(9)
TR=T/TC
PREP/PC
IF (ZC-0.24) 9,9,19
9  NZ=1
GO TO 69
19 IF (ZC-0.26) 29,29,39
29 NZ=2
GO TO 69
39 IF (ZC-0.28) 49,49,59
49 NZ=3
GO TO 69
59 NZ=4
69 IF (PR-0.01) 5,15,15
5 WRITE (13,6)
6 FORMAT(15X,"ENTALPIA:LA PRESION REDUCIDA ES MENOR QUE 0.01 Y NO",/
1,25X,"SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",/)
GO TO 25
15 IF (PR-30.0) 35,35,45
15 WRITE (13,16)
16 FORMAT(15X,"ENTALPIA:LA PRESION REDUCIDA ES MAYOR QUE 30.0 Y NO",/
1,25X,"SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",/)
GO TO 25
35 IF (EDD.EQ.1.) GO TO 100
C
C
C
CALCULO DE LA ENTALPIA DEL COMPUESTO LIQUIDO
T=T-273.1
TRE=TRE-273.1
H=(ARR(16)*(T-TRE))+(ARR(17)*(T**2/2-TRE**2/2))+(ARR(31)*(T**3/3-T
1RE**3/3))
TRE=TRE+273.1
T=T+273.1
C
C
C
CORRECCION POR PRESION
IF (TR-0.5) 55,65,65
55 WRITE (12,137)
137 FORMAT(15X,"ENTALPIA:LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MENOR QUE 0.5 Y",
2,25X,"NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICIONES",/)
GO TO 25
65 IF (TR-1.0) 75,14,14
14 WRITE (12,54)
54 FORMAT(15X,"ENTALPIA:LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MAYOR O IGUAL A 1
10",25X,"Y NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A",25X,"ESTA
25 CONDICIONES",/)
GO TO 25
75 GO TO (85,95,105,115),NZ
85 A=-0.08640243*(PR-4.2)-12.93889*(TR-0.77)+10.81311*((TR-0.77)**2)-
10.1587094*(PR-4.2)*(TR-0.77)+0.7466842*ALOG(PR)+3.17422*ALOG(PR)*A
2ALOG(TR)+2.43056*ALOG(PR)*((ALOG(TR))**2)+12.72429
GO TO 201
95 A=-0.1074635*(PR-4.2)-15.80132*(TR-0.77)-15.18611*((TR-0.77)**2)-
10.147657*(PR-4.2)*(TR-0.77)+0.7800774*ALOG(PR)+3.154058*ALOG(PR)*
2ALOG(TR)+2.98853*ALOG(PR)*((ALOG(TR))**2)+12.28618
GO TO 201

```

```

105 A=-0.1364774*(PR-4.664)-10.56975*(TR-0.79749)-7.812724*((TR-0.7974
19)**2)-0.1602482*(TR-0.79749)*(PR-4.664)+1.136851*ALOG(PR)+4.46347
22*ALOG(PR)*ALOG(TR)+4.525831*ALOG(PR)*(ALOG(TR))**2+10.860045
GO TO 201
115 A=-0.09572107*(PR-4.21)-9.501235*(TR-0.77)-17.30387*((TR-0.77)**2)-
10.3194707*(PR-4.21)*(TR-0.77)+1.368092*ALOG(PR)+4.227096*ALOG(PR)*A
2*ALOG(TR)+3.181639*ALOG(PR)*(ALOG(TR))**2+9.707447
201 H=H-A*TC
25 RETURN

```

CALCULO DE LA ENTALPIA DEL COMPUESTO GASEOSO.

```

100 A=ARR(10)
H=ARR(11)
C=ARR(12)
D=ARR(13)
H=(A*(T-14E))+(B*(T**2/2-TRE**2/2))+(C*(T**3/3-TRE**3/3))+
1(D*(T**4/4-TRE**4/4))

```

CORRECCION DE LA ENTALPIA POR PRESION

```

GO TO(119,129,139),NZ
119 IF (TR-1.7)159,169,169
159 WRITE(12,26)
26 FORMAT(15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MENOR QUR 0.8 Y",
1,25X,"NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICIONES",
2,/)
GO TO 509
169 IF (TR-1.7)179,179,169
189 WRITE(12,36)
36 FORMAT(15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MAYOR A 1.7 Y NO",
1,25X,"SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",
2,/)
GO TO 509
179 C1=TR/(0.003147*EXP(6.0759*TR)-61.12*(TR-1.0)*EXP(-19.933*(TR-1.))
1+1.9936*EXP((-0.911*(10.*(TR-0.88))**10)))
C2=EXP(17.671-17.63*TR)+0.17-1.1738*EXP(-17.193*(ABS(TR-1.05)))
C3=EXP(52.268-49.188*TR)+20.248*(EXP(-920.5*(TR-1.1)**2))
C4=0.0032456*(EXP(3.2917*TR))-(EXP(17.3*TR-30.6))
C5=1.9772*EXP(-2.1839*TR)
C6=0.000336*EXP(1.61*TR)-0.0000054*(TR**11.5)
AM=1./(-0.023+1.0743*((TR-0.4146)**1.8103))
X=515.-250.*TR
GO TO 20
129 IF (TR-0.75)199,209,209
199 WRITE(12,46)
46 FORMAT(15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MENOR QUE 0.75 Y",
1,25X,"NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICIONE",
2,/)
GO TO 509
209 IF (TR-2.0) 219,219,229
229 WRITE(12,56)
56 FORMAT(15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MAYOR A 2.0 Y NO",
1,25X,"SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",
2,/)
GO TO 509
219 C1=0.87*EXP(9.345*(1.-TR))+0.023955*EXP(1.2405*TR)
C2=0.047148*EXP(39.35*(1.-TR))+0.142
C3=3918.*EXP(122.*(1.-TR))+2.0
C4=1.1948*TR-0.20726*(TR**2)-0.90649
C5=3.*EXP(-2.252*TR)
C6=0.004277*(TR-0.895)*EXP((-0.946*((TR-0.895)**2)))
AM=1./(-0.0853+1.5078*((TR-0.5952)**1.7336))
X=-60.*TR+170.
GO TO 20
139 IF (TR-0.9)239,249,249
239 WRITE(12,76)
76 FORMAT(15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MENOR QUE 0.9 Y",
1,25X,"NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICIONE",
2,/)

```

```

GO TO 509
249 IF (TR=0.0) 259,259,269
269 WRITE(12,86)
86 FORMAT(15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MAYOR A 4.0 Y NO
17.25X,"SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",/)
GO TO 509
259 C1=140.*EXP(-5.7*TR)/(TR-0.811+0.01
C2=(0.35*EXP(-26.2*(TR-1.)))/(TR)+0.31
C3=17.25*EXP(-16.7*(TR-1.))+2.75
C4=0.844*(TR-2.)-0.0216*((TR-2.)*2)+0.0610*((TR-2.)*3)-0.0404*((
TR-2.)*4)+0.6564
IF (TR=0.0) 279,279
C5=-0.0697*(TR-2.)+0.0734*((TR-2.)*2)-0.0537*((TR-2.)*5)+0.0125
GO TO 71
88 C5=0.
71 CA=0.00301*(TR-0.8)*EXP(-0.87*((TR-0.8)**2))
AM=1./(0.1052+1.2004*((TR-0.4429)**2.135))
XA=5+(0.5*((TR-4.))**2)
GO TO 20
IF (TR=0.8) 279,50,50
279 WRITE(12,96)
96 FORMAT(15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MENOR QUE 0.8 Y
17.25X,"NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICIONE
25X,/)
GO TO 509
50 IF (TR=0.0) 299,299,309
309 IF (TR=25.0) 60,60,319
319 WRITE(12,106)
106 FORMAT(15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MAYOR A 25.0 Y NO
17.25X,"SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",/)
GO TO 509
299 C1=146.*EXP(-5.16*TR)+0.017
C2=0.62*EXP(-18.4*(TR-1.))+0.05
C3=EXP((38.8)/(TR)-34.2)
C4=0.989*((TR-0.75)**1.63)*EXP(-0.3175*(TR-0.75))
C5=0.215*EXP(-0.1045*((TR)**4.935))
C6=0.0564*((TR-0.5)**4.67)*EXP(-2.869*(TR-0.5))
AM=(1.-0.0001499*(TR**9.17)*EXP(-1.297*TR))/(0.1879+1.0826*((TR-0.
165)**1.1726))
XA=15-0.314*(TR-8.0)**3
GO TO 20
60 A=0.053*TR-0.00341*(TR**2)+0.13*PR-0.00176*(PR**2)-0.02725*TR*PR+
10.00012A*TR*(PR**2.)+0.000538*(TR**2)*PR+0.0000634*(TR**3)+0.00002
25A*(PR**3)-0.207A
H=H-A*(TC)
GO TO 25
20 AB1=-C2-C4-C5*PR+C2*((1./3.1416)*ATAN(C3-(C3*PR))+0.50)**2)
B=(AM*PR*(1.-(PR)/X))/(EXP(-C1*(PR**2))*A*A+C4+C5*PR+C6*(TR**2))
H=H-B*TC
509 RETURN
END

```

PROGRAM IS RELOCATABLE .TITL ENTALP
IFORT/B/L/P FCOMP,RH/B

C
C
C

SUBROUTINA PARA CALCULAR EL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD MEDIANTE EL
 EMPLEO DE LA ECUACION DE ESTADO DE REDLICH-KHONG MODIFICADA.

SUBROUTINE FCOMP (Z)
 COMMON/ALX/ARR(33)
 COMMON/EST/T,P,EDU,TR,INDEX

Y1=0.035
 A2=14137.6
 A3=1397.124
 A4=1.078
 ASE1=3.440
 Y2=0.00260913
 H2=1.19125
 H3=1.77486
 H4=0.434418
 H5=0.144342
 H6=0.00704650
 H7=616.430
 H8=1.00122
 H9=0.0112141
 H10=0.0495574
 H11=0.000442593
 H12=0.0602766
 C1=0.825714
 C2=0.00736587
 C3=0.00255204
 C4=0.00115729
 C5=0.101212
 C6=2.46546
 C7=0.220411
 C8=0.0161963
 D1=-0.04666626
 D2=-0.11386032
 D3=-0.174451266
 D4=0.47298767
 D5=12.55135462
 D6=-12.55831122

C
C

COMPUESTOS PIROS

TC=ARR(6)
 PC=ARR(7)
 WSARR(32)
 PR=PC
 TR=TC
 A=0.086440350*PR/TR
 B=0.4274402327*PR/(TR**2.5)
 H=A-B*6-H
 C=A*H
 Z1=0.2
 10 I=I+1
 Z1=0.01+Z1
 A=71.5*Z1**2+H*Z1
 IF (I.GE.150) GO TO 20
 TRK=Z1
 IF (PR.GT.2.) GO TO 25

C
C

CALCULO DE LA FUNCION DE DESVIACION

HOL=7000.*(1.-TR)**2+770.*(1.02-PR)**2
 IF (HOL.LE.60.) GO TO 30
 SOL=0.
 GO TO 35

```

30 ROL=D1*(TR*TR*PR*PR*EXP(-POL)
35 DZ=ROL+W*(-0.464419+0.424568*TR*TR)*(PR/(TR**4+PR**4))+W*(D3+D4*TR
1)*(PR*PR/((1.+TR)**4+PR**4))+D2+W*(D5+D6*TR)*(PR**3/((1.+TR)**4+
2PR**4))
7=ZRK+D7
20 RETURN
25 Z2=-Y1*PR**3/(1.0+A2*(TR-1.0)**2+A3*(PR-A4-A5*(TR-1.))**4)+Y2*PR*(
1*TR-B2-B3*PR+H4*PR*TR*TR)*(1.-B5*PR+B6*TR*PR)/(1.+B7*(TR-B8-B9*PR-H
210*PR*TR)**4)+B11*TR**3*PR**3/(TR**4+H12*PR**4)
73=TR*PR*(TR-1.-0.049*PR)*(C1+C2*PR-C3*TR*PR+C4*TR)/(TR**4+C5*(TR=
1C6-C7*PR+C8*TR*PR)**4)
DZ=Z2+W*Z3
7=ZRK+DZ
RETURN
END

```

```

PROGRAM IS RELOCATABLE .TITL FCOMP
IFORT/B/L/P ROSA.RB/B

```

1 DGC FORTRAN IV REV 05.2068

```
1 C
2 C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA PRESION DE VAPOR
3 C
4 C SUBROUTINE ROSA(PV)
5 C COMMON/FSY/T,P,EDO,TR,INDEX
6 C COMMON/ADJ/ARR(33)
7 C TPE=ARR(4)
8 C TC=ARR(6)
9 C PC=ARR(7)
10 C TPER=TPE/TC
11 C NM=ARR(3)
12 C TR=TC
13 C
14 C
15 C CALCULO DE LA PRESION DE VAPOR EN EL INTERVALO DE 10 A 1500 MMHG
16 C POR LA ECUACION SEMIREDUcida DE MILLER.
17 C
18 C CLV=ARR(26)
19 C THV=ARR(27)
20 C HV=CLV*RM
21 C C=HV/(2.303*1.987*TC*((1.-THV/TC)**0.38))
22 C D=1.44779*(TPER**2-1.)/TPER+(0.60706*(TPER**3-4.))/TPER
23 C E=C*(TR**2.)*(0.60706*TR-1.44779)-(D*TR)-0.98045/TR
24 C PV=10**F
25 C PV=PV*760.
26 C IF (PV.GT.1500.) GO TO 59
27 C RETURN
28 C
29 C
30 C CALCULO DE LA PRESION DE VAPOR SUPERIOR A LOS 1500 MMHG POR MEDIO
31 C DE LA CORRELACION DE RIEDEL-PLANK-MYLLER.
32 C
33 C 59 H=TPER*((ALOG10(PC))/(1.-TPER))
34 C C=0.2271+0.4525*H
35 C GE=(H/C-(1.+TPER))/((1.-TPER)**2)
36 C A=(C/TR)*(1.-(TR**2))+[GE*(1.0-TR)**3]
37 C PVR=10.0**A
38 C PV=PVR*PC
39 C PV=PV*760.
40 C RETURN
41 C END
```

PROGRAM IS RELOCATABLE .TITL ROSA
IFORT/H/L/P TENS,RB/B

1 DGC FORTRAN IV REV 05.2069

```
1 C
2 C SURFOTINA PARA CALCULAR LA TENSION SUPERFICIAL MEDIANTE LA EXPRE-
3 C SION DE MITTAL-SAMIAL.
4 C
5 C SUBROUTINE TENS (TS)
6 C COMMON/EST/Y,P,COO,TRE,INDEX
7 C COMMON/ARX/ARR(33)
8 C A=ARR(28)
9 C R=ARR(29)
10 C IF (A.EQ.0.0) GO TO 131
11 C U=B*T
12 C IF (U.GE.A) GO TO 150
13 C TS=(A-(R*T))**1.2
14 C GO TO 20
15 C 131 CALL ERROR (11)
16 C GO TO 20
17 C 150 WRITE (12,16)
18 C 16 FORMAT (15X,"TENSION SUPERFICIAL: NO SE CALCULO DEBIDO",/,15X,"A L
19 C 1AS ALTAS CONDICIONES DE TEMPERATURA",/)
20 C RETURN
21 C END
```

PROGRAM IS RELOCATABLE .TITL TENS
IFORT/B/L/P VIS,RH/B

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60
61
62
63
64
65
66
67
68
69
70
71
72
73
74
75
76
77
78
79
80
81
82
83
84
85
86
87
88
89
90
91
92
93
94
95
96
97
98
99
100
101
102
103
104
105
106
107
108
109
110
111
112
113
114
115
116
117
118
119
120
121
122
123
124
125
126
127
128
129
130
131
132
133
134
135
136
137
138
139
140
141
142
143
144
145
146
147
148
149
150
151
152
153
154
155
156
157
158
159
160
161
162
163
164
165
166
167
168
169
170
171
172
173
174
175
176
177
178
179
180
181
182
183
184
185
186
187
188
189
190
191
192
193
194
195
196
197
198
199
200

SUBROUTINE PARA CALCULAR LA VISCOSIDAD DE UN COMPUESTO EN CENTIPOISES.

SUBROUTINE VIS (V)
COMMON/STV/VLP(6)
COMMON/EST/T,P,EOO,TRE,INDEX
COMMON/AUX/ARR(33)
IF (EOO.EQ.1.) GO TO 300

CALCULO DE LA VISCOSIDAD DEL COMPUESTO LIQUIDO POR EL METODO DE GUZMAN-ANDRADE

R=1.987
A=ARR(20)
H=ARR(21)
IF (A.EQ.0.) GO TO 11
V=EXP(B/(R*T))
IF (P.GT.1.) GO TO 50
GO TO 1
11 CALL ERROR (10)
1 RETURN

CALCULO DE LA VISCOSIDAD DEL COMPUESTO GASEOSO A TEMPERATURAS MENORES DE LA CRITICA.

300 V=ARR(22)
IF (T.GE.TC) GO TO 10
E=ARR(23)
V=V*(T/273.1)**E
IF (P.GT.1.) GO TO 50
RETURN

CALCULO DE LA VISCOSIDAD DEL COMPUESTO GASEOSO POR EL METODO DE SUTHERLAND A TEMPERATURAS SUPERIORES A LA CRITICA.

10 CBARR(24)
HM=ARR(3)
TC=ARR(6)
PC=ARR(7)
IF (C.EQ.0.0) GO TO 21
V=((273.1+C)/(T+C))*((T/273.1)**1.5)*VO
IF (P.GT.1.) GO TO 50
GO TO 20
21 CALL ERROR (11)
RETURN

CORRECCION POR PRESION POR EL METODO BASADO EN LA VISCOSIDAD DIFUSIONAL.

50 CALL DEN (D)
DENC=ARR(8)*62.37
DENR=D/DENC
IF (DENR.GT.0.05) GO TO 15
WRITE(12,111)

111 FORMAT(15X, "VISCOSIDAD LA DENSIDAD REDUCIDA ES MENOR A 0.05", /, 15X
1, "Y NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICIONES.",
2/)

GO TO 20
15 XI=(TC**0.166666)/(HM**0.5*(PC**0.66666))
POL=ARR(1)
IF (POL.EQ.0.) GO TO 40

COMPUESTOS NO POLARES

VCP=0.10230+0.023364*DENR+0.059533*(DENR**2.)-0.040756*(DENR**3.)+

```

)
) 10.0091327*(DENR**4.)
) R=ALOCIO (VCP)/0.25
) V=(710.**AR)+V*XI-10.**(-4))/XI
) GO TO 20
)
) C
) C
) COMPUESTOS POLARES.
)
) 40 DO 8000 I=1,6
) IF (DENR.LE.VLP(I)) GO TO 30
) GO TO 13
) 8000 CONTINUE
) GO TO 20
) 30 GO TO (2,3,4,5,6,7),I
) 2 V=(16.56*(10.**(-5))*(DENR**1.111))+V*XI)/XI
) GO TO 20
) 3 V=(V*XI+0.607*(10.**(-5))*((9.045*DENR+0.63)**1.739))/XI
) GO TO 20
) 4 S=0.6434-0.1005*DENR
) U=10.**S
) V=(V*XI+(10.**(-U)))/XI
) GO TO 20
) 5 S=0.6439-0.1005*DENR-(4.75*(10.**(-4))*((DENR**3.-10.65)**2.))
) V=(V*XI+(10.**(-U)))/XI
) GO TO 20
) 6 V=(0.00900+V*XI)/XI
) GO TO 20
) 7 V=(0.0250+V*XI)/XI
) GO TO 20
) 13 V=1.0
) WRITE (12,66)
) 88 FORMAT(15X,"VISCOSIDAD: NO SE CORRIGIO POR PRESION DERIDO",/,15X,"
) 1A QUE ES MUY ALTA, PRODUCIENONSE GRANDES DESVIACIONES.",/)
) 20 RETURN
) END

```

```

PROGRAM IS RELOCATABLE .TITL VIS
IFORT/B/L/P SIDEH,RR/R

```

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60
61
62
63
64
65
66
67
68
69
70
71
72
73
74
75
76
77
78
79
80
81
82
83
84
85
86
87
88
89
90
91
92
93
94
95
96
97
98
99
100

SUBROUTINA PARA EFECTUAR EL CAMBIO DE UNIDADES.

SUBROUTINE SIDEN (001)
COMMON/ST/T,P,END,TRF,INDEX
COMMON/RT/TF,TING,PF,PINC,KEDD
NOUN=0U
I=NOU

IF (I.LY.1.OR.I.GT.20) GO TO HAA
GO TO (1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20),I

1 P=PF/760.
PF=PF/760.
PINC=PINC/760.
GO TO 4000

2 P=PF/33.93
PF=PF/33.93
PINC=PINC/33.93
GO TO 4000

3 P=PF/1.033
PF=PF/1.033
PINC=PINC/1.033
GO TO 4000

4 P=PF/14.7
PF=PF/14.7
PINC=PINC/14.7
GO TO 4000

5 P=PF/14.7*144.
PF=PF/14.7*144.
PINC=PINC/14.7*144.
GO TO 4000

6 T=I+273.
TRF=TRF+273.
TF=TF+273.
GO TO 4000

7 T=I+273.
TRF=TRF+273.
TF=TF+273.
P=PF/760.
PF=PF/760.
PINC=PINC/760.
GO TO 4000

8 T=I+273.
TRF=TRF+273.
TF=TF+273.
P=PF/33.93
PF=PF/33.93
PINC=PINC/33.93
GO TO 4000

9 T=I+273.
TRF=TRF+273.
TF=TF+273.
P=PF/1.033
PF=PF/1.033
PINC=PINC/1.033
GO TO 4000

10 T=I+273.
TRF=TRF+273.
TF=TF+273.
P=PF/14.7
PF=PF/14.7
PINC=PINC/14.7
GO TO 4000

11 T=I+273.
TRF=TRF+273.
TF=TF+273.
P=PF/14.7*144.
PF=PF/14.7*144.
PINC=PINC/14.7*144.
GO TO 4000


```

C
C
C      SUBROUTINA PARA ESCRIBIR EL TIPO DE ERROR COMETIDO
SUBROUTINE ERROR (I)
GO TO (1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11),I
1 WRITE (12,101)
GO TO 20
2 WRITE (12,102)
GO TO 20
3 WRITE (12,103)
GO TO 20
4 WRITE (12,104)
GO TO 20
5 WRITE (12,105)
GO TO 20
6 WRITE (12,106)
GO TO 20
7 WRITE (12,107)
GO TO 20
8 WRITE (12,108)
GO TO 20
9 WRITE (12,109)
GO TO 20
10 WRITE (12,110)
GO TO 20
11 WRITE (12,111)
101 FORMAT (10X,"ERROR: NO FUE PERFORADO DEBIDAMENTE EL NUMERO DE COMP
ESTOS O SU NUMERO ES MAYOR A 10")
102 FORMAT (10X,"ERROR: PROPIEDAD NO ENCONTRADA")
103 FORMAT (10X,"ERROR: COMPUESTO NO IDENTIFICADO")
104 FORMAT (10X,"ERROR: UNIDADES FUERA DE OPCION EN EL SISTEMA")
105 FORMAT (10X,"ERROR: FORMA DE CALCULO DE PROPIEDADES NO ENCONTRADA")
106 FORMAT (10X,"ERROR: LA SUMA DE LAS FRACCIONES MOL ES DIFERENTE DE
11,0")
107 FORMAT (10X,"ERROR: EL PROGRAMA SOLO ESTIMA ESTA PROPIEDAD PARA ME
17 CLAS BINARIAS")
108 FORMAT (10X,"ERROR: PARA EL ESTADO LIQUIDO NO HAY OPCION PARA LA G
ENERACION DE TABLAS POR INCREMENTO DE PRESION")
109 FORMAT (10X,"ERROR: NO SE DISPONE DE LAS CONSTANTES DEL CP DE LIQ
UIDO EN EL RANCO DE DATOS")
110 FORMAT (10X,"ERROR: NO SE DISPONE DE LAS CONSTANTES DE LA VISCOSID
AD EN EL RANCO DE DATOS")
111 FORMAT (10X,"ERROR: NO SE DISPONE DE LOS PARAMETROS CONSTANTES
NEQUERIDOS EN EL RANCO DE DATOS")
20 RETURN
END

```

PROGRAM IS RELOCATABLE
IFORT/B/L/P SELECP,RR/B .YITL ERROR

1 DFC FORTRAN 19 FEB 05, 2009

```
1 C
2 C SUBROUTINE PARA SELECCIONAR LA PROPIEDAD DE LOS COMPUESTOS Puros
3 C
4 C SUBROUTINE SELECP (JPROP)
5 C COM=ID/TX/1 XAU(9)
6 C DE 1000 151,9
7 C IF (JPROP.EQ.LXAU(I)) GO TO 1100
8 C 1000 CONTINUE
9 C CALL EROR (2)
10 C GO TO (1,2,3,4,5,6,7,8,9),I
11 C 1 CALL CAPC (CP)
12 C WRITE (12,11) CP
13 C 11 FORMAT(10X,"CAPACIDAD CALORIFICA A P=CTE CAL/G-MOL-K",10X,F10.6,/)
14 C GO TO 2000
15 C 2 CALL CALV (HV)
16 C WRITE (12,22) HV
17 C 22 FORMAT(10X,"CALOR LATENTE DE VAPORIZACION HTU/LB",14X,E13.6,/)
18 C GO TO 2000
19 C 3 CALL FETALP (H)
20 C WRITE (12,33) H
21 C 33 FORMAT(10X,"ENTALPIA CAL/G-MOL",32X,E13.6,/)
22 C GO TO 2000
23 C 4 CALL DEN (D)
24 C WRITE (12,44) D
25 C 44 FORMAT(10X,"DENSIDAD LB/PIE3",34X,F8.5,/)
26 C GO TO 2000
27 C 5 CALL VIS (V)
28 C WRITE (12,55) V
29 C 55 FORMAT(10X,"VISCOSIDAD CENTIPOISES",28X,F8.5,/)
30 C GO TO 2000
31 C 6 CALL CONY (CT)
32 C WRITE (12,66) CT
33 C 66 FORMAT(10X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA HTU/HR-PIE2-F/PIE",11X,F8.5,/)
34 C GO TO 2000
35 C 7 CALL ROSA (PV)
36 C WRITE (12,77) PV
37 C 77 FORMAT(10X,"PRESION DE VAPOR MMHG",29X,F13.6,/)
38 C GO TO 2000
39 C 8 CALL TENS (TS)
40 C WRITE (12,88) TS
41 C 88 FORMAT(10X,"TENSION SUPERFICIAL DINAS/CM",22X,E13.6,/)
42 C GO TO 2000
43 C 9 CALL CAPC (CP)
44 C CALL CALV (HV)
45 C CALL FETALP (H)
46 C CALL DEN (D)
47 C CALL VIS (V)
48 C CALL CONY (CT)
49 C CALL ROSA (PV)
50 C CALL TENS (TS)
51 C WRITE (12,99) CP,HV,H,D,V,CT,PV,TS
52 C 99 FORMAT(10X,"CAPACIDAD CALORIFICA A P=CTE CAL/G-MOL-K",10X,E13.6,/,
53 C 110X,"CALOR LATENTE DE VAPORIZACION HTU/LB",14X,E13.6,/,10X,"ENTAL
54 C 2PIA CAL/G-MOL",32X,E13.6,/,10X,"DENSIDAD LB/PIE3",34X,E13.6,/,10X,
55 C 3"VISCOSIDAD CENTIPOISES",28X,E13.6,/,10X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA HT
56 C 4U/HR-PIE2-F/PIE",11X,E13.6,/,10X,"PRESION DE VAPOR MMHG",29X,E13.6
57 C 5,/,10X,"TENSION SUPERFICIAL DINAS/CM",22X,E13.6,/)
58 C 2000 RETURN
59 C END
```

PROGRAM IS RELOCATABLE

IFORT/B/L/P TARLA,RR/B

.TITL SELECP

```

C
C
SUBROUTINE TABLA (JPROP)
COMMON/STY/T,P,EDD,TRF,INDEX
COMMON/MIX/INCOMP,X(10),ICOND,INDICE(10)
COMMON/MT/TF,TTINC,PF,PINC,KEDO
COMMON/IX/LXAU(9)
IF (ICOND.EQ."00") GO TO 100

GENERACION DE TABLA POR VARIACION DE LA TEMPERATURA.

WRITE (12,110) T,TF,TTINC,P
110 FORMAT(46X,"GENERACION DE TABLA",/,46X,"*****",5X,"**
1 5X,"*****",///,43X,"TEMPERATURA INICIAL-K =",4X,F7.2,/,43X,"T
TEMPERATURA FINAL-K =",6X,F7.2,/,43X,"INCREMENTO DE TEMPERATURA-
SK =",5X,F5.2,/,43X,"PRESION DE CALCULO-ATM =",5X,F7.2,///)
TST=TTINC
DO 3000 I=1,9
IF (JPROP.EQ.LXAU(I)) GO TO 3300
3000 CONTINUE
CALL FPROP (2)
RETURN
3300 GO TO (1,2,3,4,5,6,7,8,9),I
1 WRITE (12,120)
120 FORMAT(15X,"TEMPERATURA-K",10X,"CAPACIDAD CALORIFICA CAL/G-MOL-K",
1 //)
31 TST=TTINC
CALL CAPC (CP)
WRITE (12,71) T, CP
71 FORMAT (15X,F7.2,15X,F13.6)
IF (T.LE.TF) GO TO 31
RETURN
2 WRITE (12,52)
52 FORMAT (15X,"TEMPERATURA-K",4X,"CALOR LATENTE DE VAP.-BTU/LB",//)
32 TST=TTINC
CALL CALV (HV)
WRITE (12,71) T, HV
IF (T.LE.TF) GO TO 32
RETURN
3 WRITE (12,53)
53 FORMAT (15X,"TEMPERATURA-K",9X,"ENTALPIA-CAL/G-MOL",//)
33 TST=TTINC
CALL ENTALP (H)
WRITE (12,71) T, H
IF (T.LE.TF) GO TO 33
RETURN
4 WRITE (12,54)
54 FORMAT (15X,"TEMPERATURA-K",4X,"DENSIDAD-LB/PIE-3",//)
34 TST=TTINC
CALL DEN (D)
WRITE (12,71) T, D
IF (T.LE.TF) GO TO 34
RETURN
5 WRITE (12,55)
55 FORMAT (15X,"TEMPERATURA-K",6X,"VISCOSIDAD-CENTIPOISES",//)
35 TST=TTINC
CALL VIS (V)
WRITE (12,71) T, V
IF (T.LE.TF) GO TO 35
RETURN
6 WRITE (12,56)
56 FORMAT (15X,"TEMPERATURA-K",2X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA-BTU/HR-PIE-F
1 //)
36 TST=TTINC
CALL COND (CT)

```

```

WRITE (12,71) T, CT
IF (CT.LE.70) GO TO 36
RETURN
7 717 (12,57)
57 FORMAT (35X,"TEMPERATURA-K",7X,"PRESION DE VAPOR-MMHG",//)
37 T=T+TINC
CALL ROSA(PV)
WRITE (12,71) T, PV
IF (T.LE.TF) GO TO 37
RETURN
8 817 (12,58)
58 FORMAT (35X,"TEMPERATURA-K",2X,"TENSION SUPERFICIAL-DINAS/CM",//)
38 T=T+TINC
CALL TENS(TS)
WRITE (12,71) T, TS
IF (T.LE.TF) GO TO 38
RETURN
9 917 (12,59)
59 FORMAT (3X,"TEMP-K",3X,"CAPACIDAD",4X,"ENTALPIA",4X,"CALOR LATEN="
1,3X,"DENSIDAD",5X,"VISCOSIDAD",3X,"CONDUCTIVID",6X,"PRESION DE V",5X
2,"TENSION SU",7,12X,"CALORIFICA",3X,"CAL/G-MOL",3X,"TE DE VAPOR",
34X,"HR/PIE-F",5X,"CENTIGRADES",2X,"DAD-TERMICA",4X,"VAPOR-MMHG",5X
4,"PERFICIAL",7,12X,"CAL-GMOL-K",17X,"RIZACION",31X,"BTU/HR-PIE-F",
519X,"DINAS/CM",7,40X,"BTU/LB",//)
39 T=T+TINC
CALL CAPC (CP)
CALL ENTALP (H)
CALL CALV (HV)
CALL DEFL (D)
CALL VIS (V)
CALL CONT (CT)
CALL ROSA(PV)
CALL TENS (TS)
WRITE (12,72) T, CP, H, HV, D, V, CT, PV, TS
72 FORMAT (2X,F8.3,5(1X,E12.6),3(2X,E12.6))
FORMATO ORIGINAL MODIFICADO,VERIFICAR VALIDEZ DEL NUEVO.
IF (T.LE.TF) GO TO 79
RETURN
GENERACION DE LA TABLA POR VARIACION DE PRESION.
100 IF (EQD.EQ.1) GO TO 200
CALL ENROD (8)
RETURN
200 WRITE (12,70) P, PF, PINC, T
70 FORMAT (35X,"GENERACION DE TABLA POR VARIACION DE PRESION",///,43X
1,"PRESION INICIAL-ATM",2X,F7.2,/,43X,"PRESION FINAL-ATM",2X,
2,F7.2,/,43X,"INCREMENTO DE PRESION-ATM",2X,F7.2,/,43X,"TEMPERATU
3,"RA DE CALCULO-K",2X,F7.2,//)
REP=PINC
DO 4000 I=1,9
IF (IPROP.EQ.1)XAND(I)) GO TO 2222
CONTINUE
4000 CALL IPROR (2)
RETURN
2222 IF (1.EQ.2.OR.1.EQ.7.OR.1.EQ.8) GO TO 888
IF (1.EQ.3.OR.1.EQ.4.OR.1.EQ.5.OR.1.EQ.6) GO TO 666
IF (1.EQ.9) GO TO 777
GO TO 4000
666 I=I-1
GO TO 4000
777 I=I-3
4000 GO TO (11,12,13,14,15,16),I
11 WRITE (12,51)
51 FORMAT (36X,"PRESION-ATM",13X,"CP-BTU/G-MOL-K",//)
1111 REP=PINC

```

```

CALL CAPC (CP)
WRITE (12,71) P, CP
IF (P.LE.PF) GO TO 3131
RETURN
12 WRITE (12,152)
152 FORMAT (3A,"PRESION-ATM",11X,"ENTALPIA-CAL/G-MOL",//)
3232 PERFORM
CALL ENTALP (H)
WRITE (12,71) P, H
IF (P.LE.PF) GO TO 3232
RETURN
13 WRITE (12,153)
153 FORMAT (3A,"PRESION-ATM",10X,"DENSIDAD-LB/PIE-3",//)
333 PERFORM
CALL DEN (D)
WRITE (12,71) P, D
IF (P.LE.PF) GO TO 333
RETURN
14 WRITE (12,154)
154 FORMAT (3A,"PRESION-ATM",9X,"VISCOSIDAD-CENTIMOISES",//)
3434 PERFORM
CALL VIS (V)
WRITE (12,71) P, V
IF (P.LE.PF) GO TO 3434
RETURN
15 WRITE (12,155)
155 FORMAT (3A,"PRESION-ATM",5X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA-HTU/HR-PIE-F",
177)
3535 PERFORM
CALL CONT (CT)
WRITE (12,71) P, CT
IF (P.LE.PF) GO TO 3535
RETURN
16 WRITE (12,156)
156 FORMAT (13A,"PRESION",3X,"CAPACIDAD",7X,"ENTALPIA",8X,"DENSIDAD",A
1X,"VISCOSIDAD",6X,"CONDUCTIVIDAD",7,12X,"ATM",6X,"CALORIFICA",3A,"CA
L/G-MOL",7X,"LB/PIE-3",8X,"CENTIMOISES",4X,"LOAD TERMICA",7,21X,"CA
L/G-MOL-A",5A,"HTU/HR-PIE-F",//)
3636 PERFORM
CALL CAPC (CP)
CALL ENTALP (H)
CALL DEN (D)
CALL VIS (V)
CALL CONT (CT)
WRITE (12,172) P, CP, H, D, V, CT
172 FORMAT (10X,F7.3,3X,E12.6,4X,E12.6,3X,E12.6,6X,E12.6,3X,E12.6
IF (P.LE.PF) GO TO 3636
RETURN
END

```

PROGRAM IS RELOCATABLE .VITL TABLA
IFORT/9/L/P ONAN,RR/B

C
C
C

SUBROUTINE PARA ESCRIBIR EL NOMBRE DEL COMPUESTO

```

SUBROUTINE QMAY (INDEX)
GO TO 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23
1, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45
2, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55), INDEX
1 WRITE (12) "ACETALDEHIDO"
GO TO 100
2 WRITE (12) "ACETILENO"
GO TO 100
3 WRITE (12) "ACETONA"
GO TO 100
4 WRITE (12) "ACIDO ACETICO"
GO TO 100
5 WRITE (12) "AIRE"
GO TO 100
6 WRITE (12) "AMONIACO"
GO TO 100
7 WRITE (12) "ANILINA"
GO TO 100
8 WRITE (12) "ARGON"
GO TO 100
9 WRITE (12) "BENCENO"
GO TO 100
10 WRITE (12) "BIOXIDO DE CARBONO"
GO TO 100
11 WRITE (12) "BROMO"
GO TO 100
12 WRITE (12) "1-3 BUTADIENO"
GO TO 100
13 WRITE (12) "N-BUTANO"
GO TO 100
14 WRITE (12) "ISOBUTANO"
GO TO 100
15 WRITE (12) "N-BUTILICO, ALCOHOL"
GO TO 100
16 WRITE (12) "ISOBUTILICO, ALCOHOL"
GO TO 100
17 WRITE (12) "1-BUTENO"
GO TO 100
18 WRITE (12) "CICLOHEXANO"
GO TO 100
19 WRITE (12) "CICLOPENTANO"
GO TO 100
20 WRITE (12) "CLORO"
GO TO 100
21 WRITE (12) "CLOROBENCENO"
GO TO 100
22 WRITE (12) "CLOROFORMO"
GO TO 100
23 WRITE (12) "CLORURO DE HIDROGENO"
GO TO 100
24 WRITE (12) "DIOXIDO DE AZUFRE"
GO TO 100
25 WRITE (12) "DIOXIDO DE NITROGENO"
GO TO 100
26 WRITE (12) "DISULFURO DE CARBONO"
GO TO 100
27 WRITE (12) "N-DODECANO"
GO TO 100
28 WRITE (12) "ESTIRENO"
GO TO 100
29 WRITE (12) "ETANO"
GO TO 100
30 WRITE (12) "ETILICO, ALCOHOL"

```


1 DGC FORTRAN IV REV 05.20ES

```
1 SUBROUTINE DISPON(INDEX)
1 COMMON/ARCH/APP(33)
1 COMMON/ARCH/LI
1 DO WHILE(JE1,33)
1 CALL EXTRAE(BUF,INDEX,J)
1 ARX(LI) = BUF
1 GO TO 60
1 RETURN
1 END
```

PROGRAM IS RELOCATABLE .TITL DISPON
IFORT/B/L/P EXTRAE.RB/B

1 DGC FORTRAN IV REV 05.20ES

```
1 SUBROUTINE EXTRAE(BUF,INDEX,J)
1 COMMON/ARCH/LI
1 IP(LI) = (LI-1)*33+4
1 IN = IP(INDEX,J)
1 CALL FSEEK(LI,IN)
1 READ(LI,3)BUF
1 3 FORMAT(15,A)
1 RETURN
1 END
```

PROGRAM IS RELOCATABLE .TITL EXTRAE
IFORT/B/L/P BLOCK.RB/B

1 DGC FORTRAN IV REV 05.20ES

2 BLOCK DATA
3 COMMON/SIV/VLP(6)
4 COMMON/IX/LXAU(9)
5 DATA VLP/0.1,0.9,2.2,0.2,0.3,0/
6 DATA LXAU/'CA','OR','EN','NE','VI','CO','PR','TE','AL'/
7 END

PROGRAM IS RELOCATABLE
IRLDR TESIS CALV CAPC CONT DEN ENTALP FCOMP ROSA TENS VIS SIBEN ENRROR SELECP
FATAL ERROR: ILLEGAL FILE NAMES

A P E N D I C E B

CLAVES DE LA SUBROUTINA: SIDEU

1. = KMMHG = Grados Kelvin y milímetros de mercurio
2. = KPIEAG = Grados Kelvin y pies de agua
3. = KKG/CM = Grados Kelvin y Kilogramos por centimetro cuadrado
4. = KPSIA = Grados Kelvin y Psias
5. = KLB/PI = Grados Kelvin y libra por pie cuadrado
6. = CATH = Grados centigrados y atmosferas
7. = CMMHG = Grados centigrados y milímetros de mercurio
8. = CPIEAG = Grados centigrados y pies de agua
9. = CKG/CM = Grados centigrados y Kilogramos por centimetro cuadrado.
10. = CPSIA = Grados centigrados y Psias
11. = CLB/PI = Grados centigrados y libras por pie cuadrado
12. = FATH = Grados Fahrenheit y atmosferas
13. = FMMHG = Grados Fahrenheit y milímetros de mercurio
14. = FPIEAG = Grados Fahrenheit y pie de agua
15. = FKG/CM = Grados Fahrenheit y Kilogramos por centimetro cuadrado
16. = FPSIA = Grados Fahrenheit y Psias
17. = FLB/PI = Grados Fahrenheit y libras por pie cuadrado
18. = KPULHG = Grados Kelvin y pulgadas de mercurio
19. = CPULHG = Grados centigrados y pulgadas de mercurio
20. = FPULHG = Grados Fahrenheit y pulgadas de mercurio

CLAVES PARA LA SUBROUTINA: JPROP

Escribir en la tarjeta:

Letras tomadas:

CAPACIDAD CALORIFICA

" CA "

VAPORIZACION, CALOR DE

" VA "

CONDUCTIVIDAD TERMICA

" CO "

DENSIDAD

" DE "

ENTALPIA

" EN "

PRESION DE VAPOR

" FR "

TENSION SUPERFICIAL

" TE "

VISCOSIDAD

" VI "

ALL

" AL "

CLAVES PARA SUBROUTINA: ICOND

- " AA " = Evaluación de propiedades para componentes puros a Temperatura y Presión dadas.
- " BB " = Evaluación de propiedades para mezclas a Temperatura, Presión y Composición dadas.
- " CC " = Generación de tabla a presión dada y variando la temperatura del componente puro.
- " DD " = Generación de tabla a una temperatura dada y variando la presión del componente puro.
- " EE " = Generación de gráfica a una Presión dada y variando la temperatura del componente puro.
- " FF " = Generación de gráfica a una temperatura dada variando la presión del componente puro.
- " GG " = Generación de tabla a una presión y composición dada, variando la temperatura de la mezcla.
- " HH " = Generación de tabla a una temperatura y composición dada, variando la presión de la mezcla.
- " QQ " = Generación de gráfica a presión y composición dada, - variando la temperatura de la mezcla
- " UU " = Generación de gráfica a temperatura y composición dada variando la presión de la mezcla.

CLAVE DE LOS DATOS:

Valor anterior	Valor actual.	Clave en el programa.	N o m b r e.
1			No utilizado, designaba la clave del compuesto.
2	1	POL	Polaridad de la molécula.
3	2	ARR (2)	Naturaleza del compuesto: orgánico ó inorgánico.
4			De 4 a 7 se utilizaban para el nombre del compuesto, actualmente ya no se utilizan
5			
6			
7			
8	3	EM	Peso molecular
9	4	TPE	Temperatura de ebullición a condiciones normales ($^{\circ}\text{K}$)
10	5	DR	Densidad relativa a temperatura ambiente (g / ml)
11	6	TC	Temperatura crítica ($^{\circ}\text{K}$)
12	7	PC	Presión crítica (atm).
13	8	DENC	Densidad crítica (g / ml)
14	9	ZC	Factor de compresibilidad crítico.
15	10	A	Constante A para la ecuación del Cp de gas.
16	11	B	Constante B para la ecuación del Cp del gas.
17	12	C	Constante C para la ecuación del Cp del gas.
18	13	D	Constante D para la ecuación del Cp del gas.
19	14	ARR (14)	Límite inferior de temperatura para la validez de las constantes del Cp ($^{\circ}\text{K}$)

Valor anterior	Valor actual	Clave en el programa	Nombre
20	15	ARR (15)	Limite superior de temperatura para la validez de las constantes del Cp ($^{\circ}$ K)
21	16	A	Constante A para calcular el Cp de liquidos.
22	17	B	Constante B para calcular el Cp de liquidos.
23	18	ARR (18)	Limite inferior de temperatura para validez de las constantes del Cp.
24	19	ARR (19)	Limite superior de temperatura para validez de las constantes del Cp.
25	20	A	Constante A para la ecuación de Guzman - Andrade.
26	21	B	Constante B para la ecuación de Guzman - Andrade.
27	22	V ρ	Valor de M_0 para la ecuación de Sutherland.
28	23	E	Valor del exponente N para la ecuación de Sutherland.
29	24	C	Constante C para ecuación de Sutherland.
30	25	DE 20	Densidad del liquido a 20° C (g / ml)
31	26	CLV	Valor del calor latente de vaporización (Cal / g)
32	27	THV	Temperatura a la cual se obtiene el calor latente anterior, en $^{\circ}$ C.
33	28	A	Constante A para la ecuación de Mitra - Sanyal.

Valor anterior	Valor actual	Clave en el programa	Nombre
34	29	A	Constante A para la ecuación de Mitra - Sanyal.
35	30	D1	Constante para calcular la densidad de líquidos
36	31	C	Constante C para calcular el Cp de líquidos.
37	32	W	Factor acentrico
38	33	H	Factor de Hidrancia para la ecuación de Rubbins - Kingrea en el cálculo de Conductividad termica en líquidos orgánicos.

APPENDICE C

DGC FORTRAN IV REV 05.20ES

```
COMMON/ARCH/LI
DIMENSION RUFF(13)
CALL FOPEN(10,"TMP")
CALL FOPEN(12,"SYSQUT")
```

PROGRAMA PARA EVALUAR PROPIEDADES TERMODINAMICAS EN LA FENZO CUANT

```
LY=44
CALL CFILW("TESTS.DT",2,IF)
IF(IF.NE.1) STOP ERROR EN CREACION
CALL OPEN(LI,"TESTS.DT",2,IE,20)
DO 50 INDEX=1,10
READ(IU)RUFF
DO 50 J=1,33
RUFF=RUFF(J)
CALL CARGA(RUFF,INDEX,J)
50 CONTINUE
STOP
END
```

```
PROGRAM IS RELOCATABLE .TITL .MAIN
IFORT/B/L/P SYSB
```

DGC FORTRAN IV REV 05.20ES

```
SUBROUTINE CARGA(RUFF,INDEX,J)
COMMON/ARCH/LI
IP(L,"")=(L-1)*33+M
IP(L,INDEX,J)
CALL FSEEK(LI,IR)
WRITE(LI,2)RUFF
2 PRINT(IX,E15.0)
RETURN
END
```

```
PROGRAM IS RELOCATABLE .TITL CARGA
```

BIBLIOGRAFIA

MANUAL DE FORTRAN IV

093 - 000134 - 00

DATA GENERAL CORPORATION

U. S. A. , FEBRERO DE 1975

OCTAVA REVISION.

LOPERENA ZUÑIGA, JULIO et. al.

DISEÑO DE UN SISTEMA PARA LA PREDICCIÓN DE
PROPIEDADES TERMODINÁMICAS Y DE TRANSPORTE
MEDIANTE COMPUTADORA.

U. N. A. M., (1974), TESIS.

SHEEWOOD, T. K. AND REID, R. C.

THE PROPERTIES OF GASES AND LIQUIDS

SECOND ED., Mc GRAW-HILL, N. Y.

U. S. A., (1966).

PERRY, J. H.

CHEMICAL ENGINEER'S HANDBOOK

FOURTH ED., Mc GRAW-HILL, N. Y.

U. S. A., (1963)

HOUGEN, O. A. AND WATSON, K. M.

CHEMICAL PROCESS PRINCIPLES

PART II, SECOND ED., WILEY

N. Y., U. S. A., (1970)

NEWTON LEWIS, GILBERT AND RANDALL, NEELE

THERMODYNAMICS

SECOND ED., MCGRAW-HILL, N. Y.

U. S. A., (1961)

REV. FOR FITZER, K. S. Y BREWER, L.