



**Universidad Nacional Autónoma de México**

---

**FACULTAD DE CIENCIAS QUIMICAS**

**ESTUDIO DE COMPORTAMIENTO DE  
REACTORES EN PLANTAS DE AZUFRE  
POR EL METODO DE MINIMIZACION  
DE ENERGIA LIBRE.**

**T E S I S**

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

**OSCAR CRUZ KATO**

**MEXICO, D. F. 1979**



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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

CLAS TESIS 1979  
AÑO M. Z. 90  
FORMA \_\_\_\_\_  
PREO \_\_\_\_\_  
• \_\_\_\_\_



A MIS PADRES:

A QUIENES LES DEBO TODO

A EVI Y SARI

CON CARÍÑO

A MARIA DEL CARMEN

CON AMOR

A MIS MAESTROS Y

AMIGOS

JURADO:

PRESIDENTE: PROF. ING. JUAN MANUEL LOMELIN GALLARDO

VOCAL: PROF. ING. ALEJANDRO ANAYA DURAND

SECRETARIO: PROF. ING. ANTONIO FRIAS MENDOZA

1er. SUPLENTE: PROF. ING. CARITINO MORENO PADILLA

2do. SUPLENTE: PROF. ING. ENRIQUE BRAVO MEDINA

SITIO DONDE SE DESARROLLO EL TEMA:

INSTITUTO MEXICANO DEL PETROLEO

SUSTENTANTE:

OSCAR CRUZ KATO

ASESOR DEL TEMA:

ING. ANTONIO FRIAS MENDOZA.

# I N D I C E

	Página
<u>CAPITULO I</u>	
INTRODUCCION	1
<u>CAPITULO II</u>	
GENERALIDADES	4
<u>CAPITULO III</u>	
METODO DE MINIMIZACION DE ENERGIA LIBRE	10
<u>CAPITULO IV</u>	
APLICACION DEL METODO A SISTEMAS:	
a).- $\text{CH}_4 + 5\text{H}_2\text{O}$	
b).- $1/2 \text{N}_2\text{H}_4 + 1/2 \text{O}_2$	23
<u>CAPITULO V</u>	
COMPORTAMIENTO DE REACTORES EN PLANTAS DE AZUFRE POR EL METODO DE MINIMIZACION DE ENERGIA LIBRE	62
<u>CAPITULO VI</u>	
CONCLUSIONES	151
<u>CAPITULO VII;</u>	
BIBLIOGRAFIA	154

## CAPITULO I

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

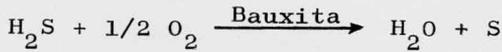
En los últimos años, nuevas reservas de Gas Natural han sido localizados en el mundo y especialmente aquí en el su<sup>re</sup>ste de la República Mexicana, lo cual ha aumentado el inte<sup>re</sup>s en desarrollar nuevos procesos que maximicen la recupera<sup>ci</sup>ón de Azufre, a partir de los gases residuales que provienen del proceso del endulzamiento del gas natural (Proceso Girbo<sup>tol</sup>), que contienen como compuestos al ácido sulfhídrico, mercaptanos, bióxido de carbono, etc. El proceso original de la recuperación del azufre a partir del ácido sulfhídrico está ba<sup>sa</sup>do en la oxidación directa de éste, con una mezcla de aire.- La reacción es la siguiente:



Esta reacción puede llevarse a cabo bajo una gran va<sup>ri</sup>edad de condiciones, así como con muchos agentes oxidantes diferentes, en fase gaseosa la reacción se efectúa a altas tem<sup>per</sup>aturas, mientras que en fase líquida puede llevarse a cabo a bajas temperaturas (1).

La comercialización de este proceso fue desarrollada por Claus en 1890, la cual consistía en la oxidación del ácido sulfhídrico con aire, en presencia de un catalizador de bauxita

o fierro, esta reacción se llevaba a cabo en un reactor sencillo, del cual se obtenían resultados aceptables. La reacción del proceso Claus original es la siguiente:

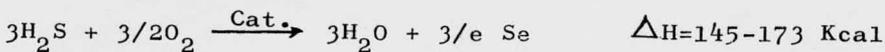


El primer avance significativo hecho al proceso Claus, fué desarrollado por I.G. Farbenindustrie en 1937, el cual consistía en lo siguiente:

En lugar de oxidar totalmente el ácido sulfhídrico con una mezcla de aire, una tercera parte del ácido sulfhídrico era oxidada completamente a dióxido de azufre en una cámara de combustión; el dióxido de azufre formado se alimentaba a un reactor, donde se mezclaba con las 2/3 partes restantes del ácido sulfhídrico, en presencia de un catalizador de bauxita en un nivel de temperatura de 700—750°F a la cual se llevaba a cabo la reacción.

El motivo de esta modificación fue hecha en base a los calores de reacción, ya que la reacción de oxidación directamente es altamente exotérmica, lo cual afecta la eficiencia de la reacción, ya que favorece la formación de sulfuro carbonilo (COS) y disulfuro de carbono (CS<sub>2</sub>), los cuales inhiben la formación de azufre elemental; en seguida se ilustran los calores de reacción involucrados en las diferentes reacciones:

Proceso Claus Original

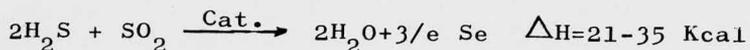


Proceso Claus Modificado (Farbenindustrie)

1er. paso. Cámara de Combustión.



2do. Paso. Convertidor Catalítico.



Como se puede observar el calor desprendido en el -- proceso Claus modificado es significativo en comparación al -- Proceso Claus Original, el cual permite un mejor control de -- temperaturas en el reactor, lo cual incrementa la conversión y de este modo una mejor recuperación de azufre.

En todos los procesos desarrollados hasta la fecha, -- el reactor catalítico es uno de los equipos más importantes a -- considerar, ya que el buen funcionamiento de éste, repercute -- en una alta recuperación de azufre y por lo consiguiente la -- economía del proceso.

## CAPITULO II

### GENERALIDADES

El principal objetivo de esta tesis, es la aplicación del método de Minimización de Energía Libre en el comportamiento de reactores en plantas de Azufre.

En toda reacción química, la conversión es uno de los factores importantes a considerar y por lo tanto en este estudio es uno de los puntos a tratar.

En teoría la conversión de una reacción química puede conocerse, ya sea evaluándola por medio de la cinética de la reacción o por distribución de los componentes en el equilibrio.

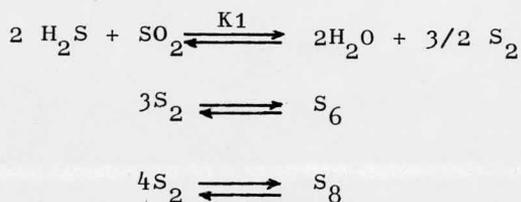
En este caso particular, como se desconoce la cinética de la reacción de los procesos de desulfuración, ya que es muy compleja el enfoque se hará desde un punto de vista de distribución de componentes en el equilibrio químico. Esto es utilizando el método de minimización de energía libre, en el cual no es necesario conocer la cinética de reacción, ni tampoco la estequiometría de la reacción.

La conversión en el equilibrio, es aquella que se alcanza cuando todos los componentes de una mezcla química se encuentra en equilibrio termodinámico. Existen varios métodos

para evaluar la distribución en el equilibrio, en seguida se enuncian dos de ellos:

- 1.- Método de Constantes de Equilibrio.
- 2.- Método de Minimización de Energía Libre.

Por el método de constantes de equilibrio a sistemas de desulfuración, Gamson y Elkins (1) desarrollaron modelos de comportamiento que representan teóricamente la distribución de los componentes del siguiente sistema propuesto por los autores:



Los resultados obtenidos fueron satisfactorios comparados con los experimentales, este trabajo ha marcado la pauta en los últimos años en el diseño de reactores, ya que suministra criterios de espacio-velocidad a una conversión dada. Este enfoque ya fue aplicado por la simulación de una Planta Recuperadora de Azufre, con resultados satisfactorios (6).

En este trabajo se trata de obtener el comportamiento de un reactor por método de minimización de energía libre en el sistema de reacción de un proceso de Desulfuración.

Cuando la función de Gibbs se usa para describir el-

sistema termodinámico, la condición para el equilibrio la ha -  
definido Callen (7) de la siguiente manera:

"El estado de equilibrio minimiza la función de Gibbs  
sobre los múltiples estados, a presión y temperatura constante"

El método de minimización de energía libre, trata de-  
encontrar la distribución de las especies, en el equilibrio den-  
tro de un sistema, especificadas la presión y temperatura.

Los dos métodos (constantes de Equilibrio y Minimiza-  
ción de Energía Libre), persiguen los mismos objetivos, pero --  
existe una ventaja de uno con respecto al otro, que es la si---  
guiente:

En el método de constantes de equilibrio es necesario  
conocer la estequiometría de la reacción, para plantear la ex--  
presión de la constante de equilibrio en función de las fugaci-  
dades de sus componentes de una reacción gaseosa:

$$K = \phi_i \hat{P}$$

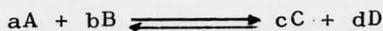
$\phi_i$  = Coeficiente de fugacidad

$\hat{P}$  = Presión Parcial

Para sistemas de baja presión o cercanas a la atmosfé-  
ricas  $\phi_i \longrightarrow 1$  por lo tanto la expresión de la constante de-  
equilibrio queda de la siguiente manera:

$$K = \hat{P}$$

Para un sistema de reacción dado, la constante de --  
equilibrio es de la siguiente forma:



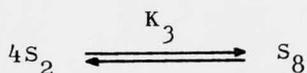
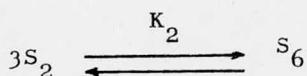
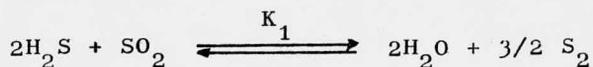
$$K = \frac{P_C^c P_D^d}{P_A^a P_B^b}$$

En cambio con el método de minimización de energía - libre, no es necesario conocer la estequiometría de la reac--- ción, ya que con solo conocer las moles que se alimentan a un sistema de reacción y la energía libre de los componentes que se suponen existen en el equilibrio a una presión y temperatura - conocida, se puede lograr encontrar la distribución de los componentes en el equilibrio, sin embargo si alguno de los compo- nentes propuestos no existe en el equilibrio, el método tiene un arreglo tal que, el sistema de ecuaciones lineales genera-- das por las reacciones propuestas, las aproxima a cero, cuando la energía libre del sistema es minimizado y por lo tanto el - equilibrio es alcanzado.

La aplicación de este método, para analizar el com-- portamiento de los reactores en plantas de Azufre, será de bas tante utilidad, ya que se podrá observar el efecto que causa - la presencia del sulfuro de carbonilo y del disulfuro de carbono.  
no.

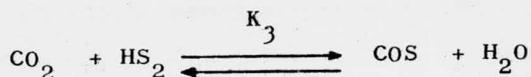
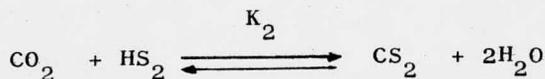
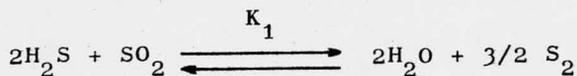
En el trabajo de Gamson y Elkins (1), fueron reportado

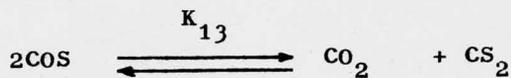
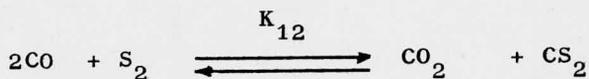
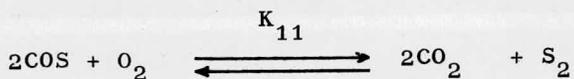
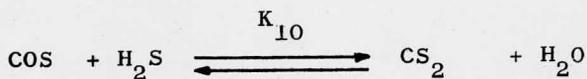
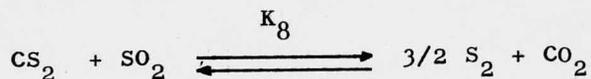
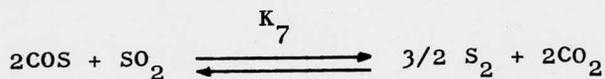
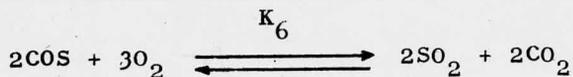
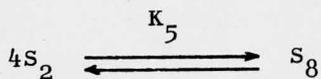
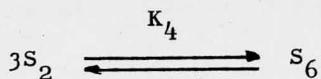
das pequeñas cantidades de dichos compuestos, los cuales no llegaban a tener un efecto significativo, cuando el sistema de --- reacción alcanzaba el equilibrio y fué una de las razones por la cual los autores al proponer el sistema de reacción, que regiría el comportamiento del sistema en el equilibrio, no las tomaron en cuenta. Las principales reacciones en el trabajo desarrollado por Gamson y Elkins fueron las siguientes:



Como se puede observar, en ninguna de las reacciones se detecta la presencia del sulfuro de carbonilo y disulfuro de carbono.

En este trabajo se tratará de tomar en cuenta las posibles reacciones que se llevan a cabo en el proceso Claus (5), y que son las siguientes:





CAPITULO IIIMETODOS DE MINIMIZACION DE ENERGIA LIBRE

## 3.1. Introducción.

En casi todos los instantes en la cual una reacción química se lleva a cabo, así sea sobre el papel, en la planta piloto o en operación, es deseable conocer la distribución de productos que es esperada en el equilibrio termodinámico.

El producto en el equilibrio puede representar el máximo obtenible o esto puede representar una distribución -- que se inhibe por el uso de catalizadores selectivos o pequeños tiempos de contacto.

Las principales aplicaciones al solucionar problemas involucrando equilibrio químico pueden ser simplemente -- condicionado a:

Encontrar las composiciones, las cuales satisfacen el balance de masa, a una presión total especificada y que -- también satisfacen todos los equilibrios simultáneos involucrados en la reacción.

En el pasado, la práctica ha sido examinar varios -- equilibrios (a una temperatura dada) y probar un grupo de -- ecuaciones simultáneas no lineales, las constantes de equilibrio, la presión total y el balance de materia.

Han sido desarrollados varios métodos de constantes de equilibrio, como por ejemplo, el método NACA (8) y el método de Brinkley (10), probablemente siendo el último el mejor conocido, que son aplicables a sistemas complejos. Estos métodos por muy eficaces que sean tienen ciertas dificultades como: suposición de condiciones iniciales y convergencia. Para solucionar este tipo de problemas fue propuesto el método de Minimización de Energía Libre por White, Johnson y Dantzing - en 1958 (3), que ha resultado de gran utilidad para solucionar problemas complejos, en la cual se desconoce la estequiometría de la reacción.

### 3.2. Método de Minimización de Energía Libre.

Con el procedimiento de minimización de energía libre, el equilibrio individual no es considerado como tal. Mas bien, las posibles especies son anotadas y la distribución de esas especies son perfectamente establecidas, usando una técnica matemática que minimiza la energía libre del sistema.

Básicamente el procedimiento del método de Minimización de Energía Libre es el siguiente:

- 1.- Expresiones de energía libre para el sistema se desarrollan.
- 2.- Se propone una expresión para la energía libre de una mezcla de composición supuesta.

- 3.- La energía libre de la mezcla en equilibrio (de composición desconocida) se expresa en términos de la mezcla conocida y de incrementos desconocidos, la cual representa el cambio necesario para llevar la composición inicial supuesta a la composición final en el equilibrio. La expresión usada involucra los dos primeros términos de una serie de Taylor y esto se expresa como una aproximación cuadrática. Las magnitudes de estos cambios desconocidos para encontrar los valores de las composiciones de las especies en equilibrio, se encuentran.
- 4.- La función expandida de la aproximación cuadrática es minimizada en su energía libre, la cual está sujeta a las restricciones del balance de masa, usando la técnica de los multiplicadores de Lagrange (los multiplicadores de Lagrange son simplemente variables artificiales, las cuales son usadas en problemas de maximización o minimización, para evitar la necesidad de solucionar expresiones explícitas simultáneas de una función dada y esto restringe la función).
- 5.- Como resultado de las manipulaciones de las técnicas matemáticas involucradas (series de Taylor y multiplicadores de Lagrange), un sistema de  $m + p + 1$  ecuaciones simultáneas lineales es obtenido, donde  $m$  es el número de elementos y  $p$  es el número de especies condensadas (note que el número de especies gaseosas no entra directamente). Cuando se resuelve el producto del sistema tiene una nueva composición que

representa a la primera aproximación de composición que da el mínimo de energía libre.

6.- El procedimiento se repite, hasta que la nueva composición es la misma a la anterior. En este punto la energía libre del sistema es mínima.

### 3.3. Desarrollo matemático del método de minimización

La energía libre total de una mezcla de gases y especies químicas condensadas puede expresarse como:

$$F(X) = \sum_{i=1}^n f_i^g + \sum_{h=1}^p f_h^c \quad \dots\dots\dots 3.1$$

donde:

$f_i^g$  = Energía libre de la  $i$ ésima especie gaseosa

$f_h^c$  = Energía Libre de la  $h$ ésima especie condensada

La energía libre contribuida por un producto gaseoso es dada por la siguiente expresión:

$$f_i^g = x_i^g ( c_i^g + \ln x_i^g / \bar{x} ) \quad \dots\dots\dots 3.2$$

donde:

$$c_i^g = ( F/RT )_i^g + \ln P \quad \dots\dots\dots 3.3$$

de donde:

$(F/RT)_i^g$  = función de la energía libre molar estan--

dar para la iésima especie gaseosa.

$x_i^g$  = número de moles de la iésima especie gaseosa.

$$\bar{x} = \sum_{i=1}^n x_i \quad i = 1, 2, 3, \dots, n$$

R = constante de los gases

P = presión total del sistema en atmósferas

(notar que el término energía libre usado en la expresión 3.3 es realmente la energía libre dividida por RT, siguiendo la práctica de White, Johnson y Dantzing (3), y así de este modo la expresión quede adimensional:

Para productos condensados los efectos de presión y de mezcla son excluidos, tal que la expresión de contribución de energía libre es la siguiente:

$$f_h^c = x_h^c \cdot c_h^c \quad \dots\dots\dots 3.4$$

donde

$$c_h^c = (F/RT)_h^c \quad \dots\dots\dots 3.5$$

$x_h^c$  = número de moles de la hésima especie condensada

En las expresiones de energía libre de las expresiones 3.3 y 3.5 (F/RT), se definen de la siguiente manera:

$$(F/RT) = \frac{(\Delta H_{f298}^o + H_{298}^T)_i}{RT} - (S^T/R)$$

o

$$(F/RT) = \frac{1}{R} \left( \frac{F - H_{298}}{T} \right)_i + \frac{\Delta H_{f,298,i}^{\circ}}{RT}$$

Donde

$\Delta H_{f,298}^{\circ}$  = entalpía de formación estándar a 298°K

$S^T$  = entropía a la temperatura T

$\Delta H_{298}^T$  = diferencia de entalpías entre 298°K y T

$\left( \frac{F - H_{298}}{T} \right)$  = función de la energía libre (Tablas termodinámicas) (4)

Para la determinación de la composición en el equilibrio, se requiere fijar un número de moles (no negativas), la cual minimice la energía libre total del sistema  $F(X)$ . De alguna manera este número de moles debe satisfacer las consideraciones del balance de masa tal que:

$$\sum_{i=1}^n a_{ij}^g x_i^g + \sum_{h=1}^p a_{hj}^c x_h^c = b_j \quad (j=1,2,\dots,m) \dots 3.6$$

donde

$a_{ij}$ ,  $a_{hj}$  = número de átomos del jésimo elemento de la iésima especie gaseosa o hésima especie condensada.

$b_j$  = número total de pesos atómicos de los jésimos átomos.

se establece lo siguiente:

$Y^g = ( y_1^g, y_2^g, \dots, y_n^g )$  son las condiciones iniciales para el número de moles de las especies gaseosas (  $x_1^g, x_2^g, \dots, x_n^g$  ).

$Y^c = ( y_1^c, y_2^c, \dots, y_p^c )$  son las condiciones iniciales para el número de moles de las especies condensadas (  $x_1^c, x_2^c, \dots, x_p^c$  ).

$$Y = ( Y^g, Y^c )$$

Ahora seleccionar  $Y$  tal que esta satisfaga las restricciones - del balance de masa y que también la prueba en el número de moles sea positiva.

La energía libre para la mezcla es:

$$Y = \sum_{i=1}^n y_i^g c_i^g + \ln y_i^g / \bar{y} + \sum_{h=1}^p c_h^c y_h^c \dots \dots \dots 3.7$$

Donde:

$$\bar{y} = \sum_{i=1}^n y_i^g \dots \dots \dots 3.8$$

$$\Delta_i^g = x_i^g - y_i^g$$

$$\Delta = \bar{x} - \bar{y}$$

$$\Delta_h^c = x_h^c - y_h^c$$

Una expresión  $Q(X)$  es obtenida, como una aproximación para  $F(X)$ , la mínima energía libre, usando expansiones de Taylor,

acerca de las condiciones iniciales  $Y$ . Usando esta técnica de expansión y substituyendo en valores de las derivadas parciales  $\partial F / x_i^g$  y  $\partial F / x_h^c$ , la siguiente expresión puede obtenerse:

$$Q(X) = F(X) = \sum_{i=1}^n (c_i^g + \ln y_i^g / \bar{y}) \Delta_i^g + \sum_{h=1}^p c_h^c \Delta_h^c + 1/2 \sum_{i=1}^n y_i^g \left[ \frac{\Delta_i^g}{y_i^g} - \frac{\Delta^g}{\bar{y}} \right]$$

..... 3.9

a fin de encontrar la primera mejor aproximación a la solución deseada,  $Q(X)$  se minimiza sujeta a las restricciones del balance de masa, ecuación 3.6. Primero, como se quiera, esto es necesario a definir una función  $G(X)$  de la siguiente manera:

$$G(X) = Q(X) + \sum_j \pi_j (b_j - \sum_{i=1}^n a_{ij}^g x_i^g - \sum_{h=1}^p a_{hj}^c x_h^c) \dots 3.10$$

Donde las  $\pi_j$ 's son los multiplicadores de Lagrange. Entonces se prueba la siguiente condición para minimización de la función  $G$ .

$$\partial G(X) / \partial x_i^g = \partial G(X) / \partial x_h^c = 0$$

El cambio de energía libre con un cambio en el número de moles de las especies gaseosas, se puede expresar:

$$\frac{\partial G(X)}{\partial x} = \left[ c_1^g + \ln (y_1^g / \bar{y}) \right] + \left[ x_1^g / y_1^g - \bar{x} / \bar{y} \right] - \sum_j \pi_j a_{1j}^g = 0$$

..... 3.11

Similarmente el cambio de energía libre, con un cambio en el número de moles de las especies condensadas es el siguiente:

$$\frac{\partial G(X)}{\partial x_h^c} = c_h^c - \sum_j \pi_j a_{hj}^c = 0 \quad \dots\dots\dots 3.12$$

Ahora resolver para  $x_i^g$  en ecuación 3.11

$$x_i^g = - y_i^g \left[ c_i^g + \ln y_i^g / \bar{y} \right] + y_i^g (\bar{x} / \bar{y}) + \sum_{j=1}^m (\pi_j a_{ij}^g) y_i^g \quad \dots\dots 3.13$$

Resumiendo sobre i en la ecuación 3.13, da lo siguiente:

$$\sum_{j=1}^m \pi_j \sum_{i=1}^n a_{ij}^g y_i^g = \sum_{i=1}^n y_i^g \left[ c_i^g + \ln y_i^g / \bar{y} \right] \quad \dots\dots\dots 3.14$$

Ahora establecer la siguiente expresión:

$$r_{JK} = r_{KJ} = \sum_{i=1}^n ( a_{ij}^g \cdot a_{IK}^g ) y_i^g \quad j, k = 1, 2, \dots, m \quad \dots 3.15$$

Donde m es el número de elementos diferentes. Se substituye la ecuación 3.13 de la ecuación 3.6. Esto da m ecuaciones, lo - - cual junto con las ecuaciones 3.12 y 3.14, da m + p + 1 ecuaciones lineales, en las que se desconoce  $\pi_1, \pi_2 \dots \pi_m$  y  $x_1^c, x_2^c, \dots, x_p^c$  y  $\bar{x}^g / \bar{y}^g$ . Las expresiones son las siguientes:

$$\begin{aligned} \alpha_1 ( \bar{x} / \bar{y} ) + a_{11}^c x_1^c + a_{21}^c x_2^c + \dots\dots\dots + a_{p1}^c x_p^c + r_{11} \pi_1 + r_{12} \pi_2 + \dots \\ + r_{1m} \pi_m = b_1 + \sum_i a_{i1}^g f_i^g \\ \alpha_2 ( \bar{x} / \bar{y} ) + a_{12}^c x_1^c + a_{22}^c x_2^c + \dots\dots\dots + a_{p2}^c x_p^c + r_{21} \pi_1 + \dots \\ r_{22} \pi_2 + r_{2m} \pi_m = b_2 + \sum_i a_{i2}^g f_i^g \quad \dots\dots\dots 3.16 \end{aligned}$$

⋮  
⋮  
⋮

$$\alpha_m (\bar{x} / \bar{y}) + a_{1m}^c x_1^c + a_{2m}^c x_2^c + \dots + a_{pm}^c x_p^c + r_{m1} \pi_1 + \dots$$

$$r_{m2} \pi_2 + r_{mm} \pi_m = b_m + \sum_i a_{im} f_i^g$$

Rearreglando la expresión 3.16, da lo siguiente:

$$\alpha_1 \pi_1 + \alpha_2 \pi_2 + \dots + \alpha_m \pi_m = \sum_i f_i^g$$

$$A_{11}^c \pi_1 + A_{12} \pi_2 + \dots + A_{1m} \pi_m = c_1^c$$

$$A_{21}^c \pi_1 + A_{22}^c \pi_2 + \dots + A_{2m} \pi_m = c_2^c$$

.

.

.

$$A_{p1}^c \pi_1 + A_{p2} \pi_2 + \dots + A_{pm}^c \pi_m = c_p^c$$

Donde:

$$\alpha_j = \sum_{i=1}^n a_{ij}^g y_i^g$$

La solución a este conjunto de ecuaciones, da la nueva aproximación para las especies condensadas  $x_h^c$  directamente. Para encontrar el nuevo valor de  $x_i^g$  es necesario substituir el valor de las  $\alpha_j$  S,  $\bar{x}/\bar{y}$  y  $y_i^g$  S en la ecuación 3.13. Este camino, a probar  $x_i^g$  y  $x_h^c$ , para encontrar el valor que representará una nueva aproximación a el valor deseado. El procedimiento se repite, usando los valores de  $x_i$ , que se encuentran como respuesta del primer cálculo como un nuevo valor de  $y_i$ , hasta que la diferencia entre las subsecuentes iteraciones son pequeños, lo

suficiente como para satisfacer el criterio de convergencia, - establecido arbitrariamente.

Es posible que el nuevo número de moles calculados  $x_i^g$  y  $x_h^c$ , - incluyen algunos números negativos, si esto ocurre, estos valores no son incluidos en la próxima iteración, ya que no tiene-ningún significado, iterar con moles negativas.

### 3.4. Criterio de convergencia

Para evitarse el problema de iterar con moles negativas, que son generadas por el sistema de ecuaciones, es necesario establecer un buen criterio de convergencia. El método que por lo general se emplea en este tipo de problemas es el si---guiente:

Este método consiste en reducir artificialmente la diferencia-de composiciones entre las  $x_i$ 's,  $y_i$ 's, por medio de factores - de relajación los cuales son seleccionados arbitrariamente.

La expresión que genera la nueva  $y_i'$ , es la siguiente:

$$y_i' = y_i + \lambda ( x_i - y_i ) \dots\dots\dots 3.18$$

donde:

$\lambda$  : factor de relajación

$y_i$  : composición supuesta

$x_i$  : composición calculada

Para la selección del factor de relajamiento, esta se hace de una manera arbitraria, tal que la solución esté entre los límites de la convergencia. Otra manera de selección del factor de relajamiento, es escoger los valores más negativos de las especies (gaseosas o condensadas) y calcular la diferencia entre la  $x_i$  y  $y_i$ , para obtener el valor de  $\lambda'$ , tal que la  $y_i'$  es cero. La expresión es la siguiente:

$$\lambda = \frac{-y_i}{x_i - y_i}$$

donde:

$\lambda$  : fracción de  $\lambda'$  (usualmente .99)

Con este tipo de criterio, se obliga a que todas las  $Y_i$ s sean positivas.

El mismo valor de  $\lambda$  se usa para ajustar todo el número de moles, para mantener el balance de masa en el sistema.

El procedimiento es el mismo, cuando éste se aplica a fases -- condensadas, con la excepción que las especies condensadas que persisten en hacerse negativas, deberán ser removidas del sistema, para evitarse problemas de convergencia. Similarmente esto ocurre también con las especies gaseosas, en la cual composiciones muy pequeñas, afectan el método de cálculo.

### 3.5. Criterio de prueba para la inclusión de especies condensadas.

Existe un criterio de prueba, para corroborar si una especie condensada, debería ser incluida en el sistema de minimización de energía libre. La prueba es la siguiente, para la  $H$ -ésima especie condensada:

$$(F/RT)_{11} - \sum_j \Pi_j a_{hj}^c < 0 \quad \dots\dots\dots 3.19$$

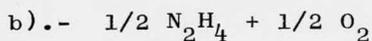
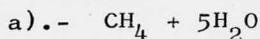
Nota: las  $\Pi_j$ s son las generadas por el sistema, cuya solución ha sido convergida.

Si la expresión 3.19 se cumple, entonces es necesario considerar la  $H$ -ésima especie condensada, en el sistema de minimización de energía libre.

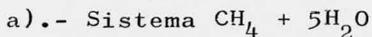
Cabe hacer notar que existen dos métodos para el desarrollo de la determinación numérica de la composición en el equilibrio - para mezclas complejas, basados en la minimización de energía libre:

- 1.- Método Steepest Descent (3)
- 2.- Método de Programación lineal (9)

En este capítulo la minimización de energía libre fue desarrollada por el método Steepest Descent, por obtener una mejor adaptación del modelo matemático al programa de computadora.

CAPITULO IVAPLICACION DEL METODO A SISTEMAS

En este capítulo, se tratará de darle un nuevo enfoque a los sistemas en equilibrio termodinámico, esto es aplicando el método de minimización de energía libre.

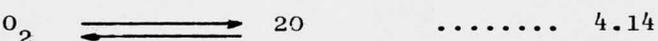
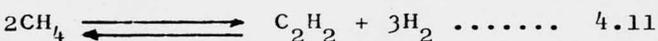
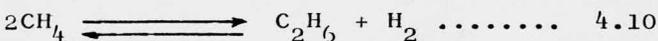
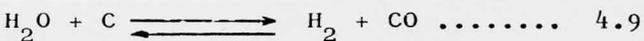
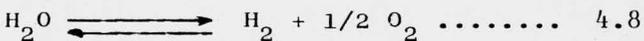
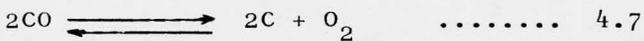
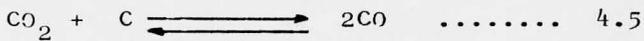
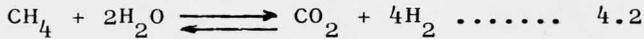


Para este caso particular, se hará una comparación entre el método clásico de constantes de equilibrio y el método de minimización de energía libre. Esta comparación, se hace con el fin de observar que tan confiable es la aplicación del método de minimización de energía libre a sistemas en equilibrio, con respecto al método clásico.

## 4.1a Método Clásico de constantes de equilibrio.

Dodge (12), evaluó la composición en el equilibrio por el método clásico, para este sistema en particular, reaccionando 1 mol de  $\text{CH}_4$  con 5 moles de  $\text{H}_2\text{O}$ , a una temperatura de  $600^\circ\text{C}$  y 1 atmósfera de presión. Como primera etapa en su estudio, él postuló las posibles reacciones que se ven involucra

das en el equilibrio y que son las siguientes:



Obviamente, el número de equilibrios es potencialmente grande, para este sistema originalmente sencillo. Dodge ataca este problema, notando que algunas reacciones son meramente combinacio

nes de otras, como por ejemplo, las siguientes reacciones:

$$4.2 = 4.1 + 4.4$$

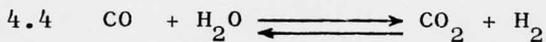
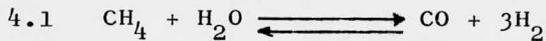
$$4.7 = 4.6 - 4.5$$

$$4.9 = 4.8 - 1/2 \ 4.7$$

$$4.1 = 4.3 + 4.9$$

Como resultado de estas relaciones, se eliminan las reacciones 4.2, 4.3, 4.7, 4.9 y por una reorganización de ciertas especies que están presentes en extremadamente pequeñas cantidades, a las condiciones a la cual se lleva a cabo el equilibrio, también no son tomadas en cuenta las reacciones 4.5, 4.6, 4.8, -- 4.10, 4.11, 4.12, 4.13 y 4.14. Considerándose solo las reacciones 4.1 y 4.4 como las más importantes en el equilibrio.

Sistema de reacción a estudiar:



Este sistema de reacción es semejante a:



y el equilibrio termodinámico de estas reacciones se puede analizar de la siguiente manera:

Se asume que se alimentan 1 mol de A y  $r_B$  moles de B.

Donde:

$$N_A = \text{número de moles de A reaccionando por reacción} \\ 4.15$$

$$N_C = \text{número de moles de C reaccionando por reacción} \\ 4.16$$

El equilibrio con respecto a ambas reacciones, será propuesto de la siguiente manera:

$$(1 - N_A) \text{ moles de A}$$

$$\left( r_B - \frac{b}{a} N_A - \frac{b}{c} N_C \right) \text{ moles de B}$$

$$\left( \frac{c}{a} N_A - N_C \right) \text{ moles de C}$$

$$\left( \frac{d}{a} N_A + \frac{d}{c} N_C \right) \text{ moles de D}$$

$$\frac{e}{c} N_C \text{ moles de E}$$

$$\text{Número total de moles, } N = 1 + r_B + N_A \frac{c + d - b - a}{a} + \dots \\ N_C \frac{d + e - b - c}{c}$$

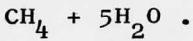
Asumiendo que el comportamiento de este sistema gaseoso, es parecido al de un gas ideal, nosotros tenemos que para la reacción 4.15, su equilibrio se expresa de la siguiente forma:

$$K_P^{-\sum n} = \frac{\left( \frac{c}{a} N_A - N_C \right)^c \left( \frac{d}{a} N_A + \frac{d}{c} N_C \right)^d}{\left( 1 - N_A \right)^a \left( r_B - \frac{b}{a} N_A - \frac{b}{c} N_C \right)^b} N^{-\sum n} \dots\dots\dots 4.17$$

y de manera análoga, el equilibrio para la reacción 4.16 es:

$$K_p = \frac{\left(\frac{e}{c} N_c\right)^e \left(\frac{d}{a} N_A + \frac{d'}{e} N_c\right)^{d'}}{\left(\frac{c}{a} N_A - N_c\right)^c \left(r_B - \frac{b}{a} N_A - \frac{b}{c} N_c\right)^{b'} N^{-\sum n}} \dots\dots\dots 4.18$$

Cálculo de la composición en el equilibrio para el sistema



Calores de combustión a 25°C, a formar agua líquida (cal/mol).

$$\text{H}_2 , \Delta H = - 68,313$$

$$\text{CO} , \Delta H = - 67,623$$

$$\text{C} , \Delta H = - 94,240$$

$$\text{CH}_4 , \Delta H = - 212,790$$

Entropía a 25°C y estado de gas ideal (cal/mol°K).

$$\text{H}_2 , S = 31.23$$

$$\text{CO} , S = 47.32$$

$$\text{CO}_2 , S = 51.10$$

$$\text{H}_2\text{O} , S = 45.17$$

$$\text{CH}_4 , S = 44.46$$

Calores específicos como función de la temperatura a 1 atm, -- (cal/ mol°K).

$$H_2, C_p = 6.947 - 0.200X 10^{-3}T + 4.803X 10^{-7}T^2$$

$$CO, C_p = 6.342 + 1.836X 10^{-3}T - 2.801X 10^{-7}T^2$$

$$H_2O, C_p = 7.187 + 2.373X 10^{-3}T + 2.084X 10^{-7}T^2$$

$$CO_2, C_p = 6.396 + 10.193 X 10^{-3}T - 35.193 X 10^{-7}T^2$$

$$CH_4, C_p = 3.38 + 0.017903T - 4.188 X 10^{-6}T^2$$

La expresión para el cambio de energía libre de la ecuación - 4.1 es la siguiente:

$$\Delta F^\circ = 45118 - 16.616T \ln T + 9.52 X 10^{-3}T^2 - 8.57 X 10^{-7}T^3 + 54.4T$$

y para la reacción 4.4 :

$$\Delta F^\circ = -9985 + 0.186T \ln T - 2.892 X 10^{-3}T^2 + 4.945 X 10^{-7}T^3 \dots + 10.51T$$

$$A T = 873 (t=600^\circ C), \Delta F_1^\circ = 1060 \quad K_{p1} = 0.54$$

$$\Delta F_4^\circ = 1585 \quad K_{p4} = 2.49$$

En las ecuaciones 4.17 y 4.18

$$a = b = c = b' = e = d' = 1$$

$$d = 3, \quad N = 5$$

$$\sum n \text{ para ecuación } 4.17 = 2$$

$$\sum n \text{ para ecuación } 4.18 = 0$$

$$N = 6 + 2N_A$$

Substituyendo en ecuaciones 4.17 y 4.18,

$$\frac{(N_A - N_C)(3N_A + N_C)^3}{(1 - N_A)(5 - N_A - N_C)(6 + 2N_A)^2} = 0.54 \quad \dots\dots 4.19$$

$$\frac{N_C(3N_A + N_C)}{(N_A - N_C)(5 - N_A - N_C)} = 2.49 \quad \dots\dots 4.20$$

Resolviendo las ecuaciones 4.19 y 4.20 por prueba y error, se obtiene lo siguiente:

$$N_A = 0.911$$

$$N_C = 0.653$$

Por lo tanto, el 91 por ciento del metano se descompondrá en el sistema de reacción.

$$\text{Moles de CH}_4 = 1 - N_A = 0.089$$

$$\text{Moles de CO} = \left( \frac{c}{a} - N_C \right) = 0.258$$

$$\text{Moles de H}_2 = \left( \frac{d}{a}N_A + \frac{d'}{c}N_C \right) = 3.386$$

$$\text{Moles de CO}_2 = \left( \frac{4}{c}N_C \right) = 0.653$$

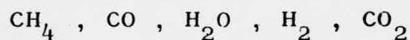
$$\text{Moles de H}_2\text{O} = \left( r_B - \frac{b}{a}N_A - \frac{b'}{c}N_C \right) = 3.436$$

TABLA DE RESULTADOS DEL SISTEMA EN EQUILIBRIO METANO - AGUA

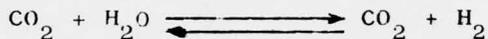
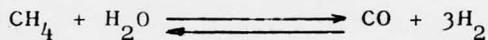
COMPUESTO	COMPOSICION (moles)	POR CIENTO
CH <sub>4</sub>	0.089	1.14
H <sub>2</sub>	3.386	43.29
H <sub>2</sub> O	3.436	43.92
CO	0.258	3.30
CO <sub>2</sub>	0.653	8.35
	-----	-----
	7.822	100.00

## 4.1b Método de Minimización de Energía Libre.

Con este método, los equilibrios individuales no son considerados como tales, ya que las especies químicas son establecidas como supuestas en el equilibrio. Se considerarán -- las cinco especies originalmente establecidas por Dodge y que, son las siguientes:



Reacciones principales propuestas para este estudio:



Condiciones:

$$T = 873^{\circ}\text{K}$$

$$P = 1 \text{ Atm}$$

Alimentación:

5 moles de  $\text{H}_2\text{O}$  + mol de  $\text{CH}_4$

TABLA DE  $A_{i,j}$  PARA EL SISTEMA DE REACCION

<u>i</u>	<u>Especie</u>	<u>j = 1</u> <u>C</u>	<u>j = 2</u> <u>H</u>	<u>j = 3</u> <u>O</u>
1	$\text{CH}_4$	1	4	0
2	$\text{H}_2$	0	2	0
3	$\text{H}_2\text{O}$	0	2	1
4	CO	1	0	1
5	$\text{CO}_2$	1	0	2
<hr/>				
1	C(s)	1	0	0

Como se puede observar, en la tabla anterior la posible inclusión del C(s) es tentativa, ya que existe la posibilidad que haya formación de C(s), a las condiciones que se lleva a cabo la reacción. Para este primer cálculo desarrollando el método de minimización de energía libre, se supondrá que no existe -- formación de C(s) y posteriormente se comprobará con los resultados obtenidos del sistema en equilibrio, que la suposición -

era correcta.

TABLA DE ENERGÍA LIBRE A P y T y COMPOSICION SUPUESTA

<u>i</u>	<u>Especie</u>	<u>-(F/RT)<sub>i</sub></u>	<u>y<sub>i</sub></u>
1	CH <sub>4</sub>	34.892	0.0857
2	H <sub>2</sub>	17.161	3.1945
3	H <sub>2</sub> O	57.743	3.2303
4	CO	40.463	0.2320
5	CO <sub>2</sub>	82.024	<u>0.6246</u>
		$\bar{y} = \sum_{i=1}^n y_i =$	7.3671
1	C(s)	1.348	

Para un sistema compuesto inicialmente de 5 moles de H<sub>2</sub>O y 1 mol de CH<sub>4</sub>, se tiene, que el número total de pesos atómicos del j-esimo elemento (G<sub>j</sub>), ajustados sobre 100 gramos como base son:

$$G_1 = 0.9423 \text{ (carbono)}$$

$$G_2 = 13.1922 \text{ (hidrógeno)}$$

$$G_3 = 4.7115 \text{ (oxígeno)}$$

TABLA DE VALORES DE  $\ln y_i / \bar{y}$  (S(I))

Especie	$y_i$	$y_i / \bar{y}$	$\ln y_i / \bar{y}$
CH <sub>4</sub>	0.0857	0.0116	-4.4539
H <sub>2</sub>	3.1945	0.4336	-0.8356
H <sub>2</sub> O	3.2303	0.4385	-0.8244
CO	0.2320	0.0315	-3.4580
CO <sub>2</sub>	0.6246	0.0848	-2.4677

Cálculo de  $\alpha_j$        $\alpha_j = \sum_{i=1}^n a_{ij}^g y_i^g$  (ALFA(j))

$$\alpha_1 = (.0857)(1) + (0.2320)(1) + (0.6246)(1) = 0.9423 \quad \text{Carbono}$$

$$\alpha_2 = (0.0857)(4) + (3.1945)(2) + (3.2303)(2) = 13.924 \quad \text{Hidrógeno}$$

$$\alpha_3 = (3.2303)(1) + (0.2320)(1) + (.6246)(2) = 4.7115 \quad \text{Oxígeno}$$

Cálculo de  $r_{kj}$        $r_{ij} = \sum_{k=1}^n (a_{ij}^g a_{ik}^g) y_i^g$

$$r_{11} = (1)(1)(.0857) + (1)(1)(.2320) + (1)(1)(.6246) = .9423$$

$$r_{12} = r_{21} = (4)(.857) = .3428$$

$$r_{13} = r_{31} = (2)(.6246)(1)(.232) = 1.4812$$

$$r_{23} = r_{32} = (2)(3.2303) = 6.4606$$

$$r_{22} = (16)(.0857) + (4)(3.1945) + (4)(3.2303) = 27.0704$$

$$r_{33} = (4)(.6246) + (1)(.2320) + (1)(3.2303) = 5.9607$$

Distribución de  $r_{jk}$

	j=1	j=2	j=3
	C	H	O
C	0.9423	0.3428	1.4812
H	0.3428	27.0704	6.4606
O	1.4812	6.4606	5.9607

$$\text{Cálculo de } G_j + \sum_i a_{ij} f_i \quad (T(j)) = G(j) + \text{SAF}$$

Donde:

$$f_i^g = x_i^g (c_i^g + \ln x_i^g / \bar{x})$$

$$c_i^g = (F/RT)_i + \ln P \quad P = 1 \text{ Atm}$$

Cálculo de  $f_i$

$$f_1 = 0.0857 ( -34.892 - 4.4539 ) = -3.3719$$

$$f_2 = 3.1945 ( -17.161 - 0.8356 ) = -57.4901$$

$$f_3 = 3.2303 ( -57.743 - 0.8244 ) = -189.1903$$

$$f_4 = 0.2320 ( -40.463 - 3.4580 ) = -10.1897$$

$$f_5 = 0.6246 ( -82.024 - 2.4677 ) = -52.7735$$

Una vez evaluadas las  $f_i$ , se procede a calcular las  $T(j)$ s:

$$T_1 = -3.3719 - 10.1897 - 52.7735 = -65.3938$$

$$\begin{aligned} T_2 &= (4)(-3.3719) + (2)(-57.4901) + (2)(-189.1903) \dots \\ &= -493.6483 \end{aligned}$$

$$T_3 = -189.1903 - 10.1897 + (2)(-52.7735) = -300.698$$

Cálculo de  $F(Y)$ .  $T(M + 1)$

Donde:

$$F(Y) = \sum_{i=1}^n y_i f_i^g$$

$$\begin{aligned} F(Y) &= -3.3719 - 57.4901 - 189.1904 - 10.1896 - 52.7735 = \dots \\ &= -313.0156 \end{aligned}$$

Con los valores calculados anteriormente, se plantea un sistema de  $m + p + 1$  ecuaciones simultáneas lineales:

$$0.9423(\bar{x}/\bar{y}) + 0.9423 \Pi_1 + 0.3428 \Pi_2 + 1.4812 \Pi_3 = -65.3938$$

$$13.1924(\bar{x}/\bar{y}) + 0.3428 \Pi_1 + 27.0704 \Pi_2 + 6.4606 \Pi_3 = -493.6483$$

$$4.7115(\bar{x}/\bar{y}) + 1.4812 \Pi_1 + 6.4606 \Pi_2 + 5.9607 \Pi_3 = -300.698$$

$$0.9423 \Pi_1 + 13.1924 \Pi_2 + 4.7115 \Pi_3 = -313.0156$$

Resolviendo este sistema de ecuaciones, se obtiene:

$$\Pi_1 = -3.347$$

$$\Pi_2 = -8.998$$

$$\Pi_3 = -40.571$$

$$(\bar{x}/\bar{y}) = 1.0001$$

Substituyendo estos valores en la siguiente ecuación, se obtienen las composiciones que son generadas al minimizar la energía libre del sistema.

$$x_i^g = -y_i^g \cdot \left[ c_i^g + \ln y_i^g / \bar{y} \right] + y_i^g (\bar{x}/\bar{y}) + \sum_{j=1}^m (\Pi_j a_{ij}^g) y_i^g$$

Factorizando  $y_i$  :

$$x_i^g = y_i^g \cdot \left[ -c_i^g - \ln y_i^g / \bar{y} + (\bar{x}/\bar{y}) + \sum_{j=1}^m (\Pi_j a_{ij}^g) \right]$$

Cálculo de las nuevas composiciones para cada una de las especies en el equilibrio.

$$\text{CH}_4 \quad x_1 = 0.0857 \left[ 34.892 + 4.4539 - 1.0001 - 3.347 \dots - 8.998(4) \right] = 0.863$$

$$\text{H}_2 \quad x_2 = 3.1945 \left[ 17.161 + .8356 + 1.0001 (2)(-8.998) \right] \\ = 3.1967$$

$$\text{H}_2\text{O} \quad x_3 = 0.2303 \left[ 57.743 + .8244 + 1.0001 (2)(8.998) \dots 40.571 \right] = 3.2319$$

$$\text{CO} \quad x_4 = 0.232 \left[ 40.463 + 3.458 + 1.0001 - 3.347 - \dots - 40.571 \right] = 0.2327$$

$$\text{CO}_2 \quad x_5 = 0.6246 \left[ 82.024 + 2.4677 + 1.0001 - 3.347 \dots \right. \\ \left. + (2)(-40.571) \right] = 0.6263$$

Como se puede observar, las nuevas composiciones generadas por el sistema de minimización de energía libre, son muy semejantes a las  $y_i$ s supuestas, a continuación se muestra una tabla de valores comparativos.

TABLA COMPARATIVA DE COMPOSICIONES (  $y_i$  )

	$y_i$ supuesta	$y_i$ calculada	Abs ( $y_s - y_c$ )
	-----	-----	-----
CH <sub>4</sub>	0.0857	0.0863	0.0006
H <sub>2</sub>	3.1945	3.1967	0.0022
H <sub>2</sub> O	3.2303	3.2319	0.0016
CO	0.2320	0.2327	0.0007
CO <sub>2</sub>	0.6246	0.6263	0.0017

Prueba para la posible inclusión del C(s) en el sistema original.

Se supone que a las condiciones que se lleva a cabo el equilibrio, existe la posibilidad que haya formación de carbón sólido. A continuación se hará un análisis para comprobar que su inclusión en el sistema original no era necesaria.

Si  $(F/RT)_H - \sum_j \Pi_j a_{Hj}^c < 0$  se incluye

Los valores de  $\Pi_j a_{Hj}^c$ , son tomados del sistema en equilibrio

Para este caso:

$$\Pi_1 a_{11} = - 3.347$$

$$(-1.348) - (- 3.347) < 0$$

1.990 < 0 Esta desigualdad no se cumple, por lo cual la suposición original de no incluir la en el sistema de reacción fué correcta.

De la tabla anterior se puede observar que las composiciones su puestas al inicio del cálculo fueron correctas.

4.1c. En este inciso se presentan los resultados obtenidos de un programa de computadora, el cual tiene implementado el método de minimización de energía libre, aplicado al sistema de -- reacción Metano-Agua. Con los resultados del programa de computadora se hará, una comparación de resultados con respecto a - los obtenidos por Dogde.

TABLA COMPARATIVA DE RESULTADOS

Especie	Composiciones por Método Clásico de Constantes de -- Equilibrio	Composiciones por Método de Minimiza ción de Energía -- Libre
CH <sub>4</sub>	0.091	0.0859
H <sub>2</sub>	3.390	3.1939

H <sub>2</sub> O	3.428	3.2306
CO	0.246	0.2320
CO <sub>2</sub>	0.663	0.6245
	<hr/>	<hr/>
	7.818	7.3669

Como se puede observar, los resultados obtenidos por el método de minimización de energía libre son muy parecidos a los obtenidos por el método clásico de constantes de equilibrio, el cual le da una confiabilidad que es muy aceptable. El método de Minimización de energía libre tiene una ventaja sobre el método clásico, que es el de poder encontrar el equilibrio en sistemas complejos, cuando no se conoce la estequiometría de la reacción.

El programa que ha continuación se presentará, fue ejecutado en una computadora Univac 1100.

Criterio de Convergencia para el sistema Metano-Agua.

Se tuvieron problemas de convergencia, al ejecutar el programa para encontrar el equilibrio del sistema en equilibrio Metano-Agua. El artículo original (2) propone el siguiente criterio:

$$Y(I)' = Y(I) + \lambda(YC(I) - Y(I))$$

Donde:

Y(I)': Composición nueva

Y(I): Composición supuesta

YC(I): Composición calculada

$\lambda$  : Factor de relajación  $0 < \lambda < 1$

Usando este criterio, la convergencia no se lograba alcanzar y el equilibrio se disparaba a una zona en la cual no se encuentra solución. Analizando este problema, se propuso el siguiente criterio:

$$Y(I)' = \text{Abs}(YC(I))$$

Con este criterio el programa alcanzó la convergencia deseada y por lo tanto el equilibrio fué encontrado.

No se puede generalizar este criterio, ya que hay zonas en la cual la convergencia no es alcanzada, como es el caso de los programas de computadora aplicados a los reactores en el proceso Claus.

4.2a. Minimización de Energía Libre para el sistema Hidrazina-Oxígeno.

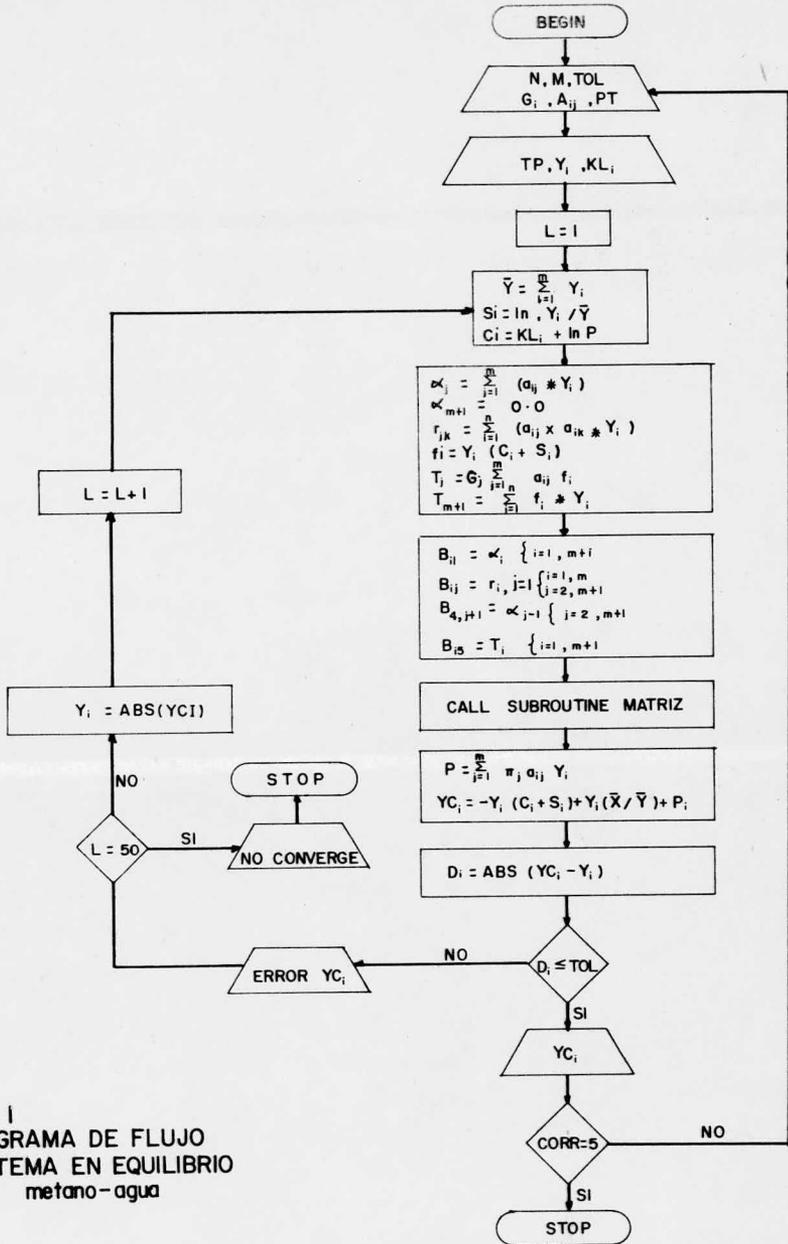


Fig. 1  
 DIAGRAMA DE FLUJO  
 SISTEMA EN EQUILIBRIO  
 metano-agua



```

62: 5 ALFA(J)=ALFA(J)+A(I,J)*Y(I)
63: ALFA(M+1)=0.0
64: DO 6 J=1,M
65: DO 6 K=1,M
66: N(J,K)=0.0
67: DO 6 I=1,N
68: 6 F(J,K)=R(J,K)+A(I,J)*A(I,K)*Y(I)
69: DO 7 I=1,M
70: 7 F(I)=Y(I)*(C(I)+S(I))
71: DO 8 J=1,M
72: T(J)=0.0
73: S=FEU,0
74: DO 9 I=1,N
75: 9 S=FE+R+K(I,J)*F(I)
76: 6 T(J)=G(J)+S=H
77: T(M+1)=0.0
78: DO 10 I=1,M
79: 10 T(M+1)=T(M+1)+F(I)
80: M=M+1
81: DO 11 I=1,M,M
82: 11 C(I+1)=ALFA(I)
83: DO 12 J=1,M
84: DO 12 I=1,M
85: 12 C(I,J+1)=R(I,J)
86: DO 13 J=1,M
87: 13 C(4,J+1)=ALFA(J)
88: DO 14 I=1,M,M
89: 14 C(1,5)=T(1)
90: CALL MATRIZ(G,X,Y,P)
91: DO 15 I=1,M
92: P(I)=0.0
93: DO 15 J=1,M
94: 15 P(I)=P(I)+P(I)*A(I,J)*Y(I)
95: DO 16 I=1,M
96: YC(I)=-Y(I)+(C(I)+S(I))+Y(I)*XYT+P(I)
97: 16 D(I)=ABS(YC(I)-Y(I))
98: MCF=2
99: I=1
100: J=2
101: 17 IF(D(I).GE.D(J))GO TO 18
102: I=J
103: 17 IF(MC.EQ.5)GO TO 32
104: MC=MC+1
105: J=J+1
106: GO TO 17
107: 16 IF(MC.EQ.5)GO TO 32
108: MC=MC+1
109: J=J+1
110: GO TO 17
111: 32 IF(D(I).LE.TOL)GO TO 19
112: IF(L.EQ.50)GO TO 23
113: WRITE(6,35)L,Y,YT
114: 35 FORMAT(/32X,12,4X,0(2X,F9.4))
115: DO 24 I=1,M
116: 24 Y(I)=ABS(YC(I))
117: L=L+1
118: GO TO 25
119: 25 PRINT 26
120: 26 FORMAT(52X,'NO CONVERGE,TERMINACION LAS ITERACIONES L',/,52X,'SE DE
121: *LENE EL PROGRAMA')
122: 122: IF(LOR.EQ.CORN)GO TO 27

```

```

1291 GO TO 31
1292 19 GO TO 1E11#
1293 25 FCN(1)=E(1)/T*100
1294 PRINT 34
1295 34 FOPEN(1)=4X,'COMPOSICION DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO'//4X,'*CO
1296 *P(LSIC)*3X,'*FLUJO MOLAR'*3X,'*PORCENTO MOL*'
1297 GO TO 1E11#
1298 45 F(1)=G(1)/H(1)*Y(1)*FCN(1)
1299 47 F(2)=G(2)/H(2)*Y(2)*FCN(1)
1300 50 IF(100-2*G(2)*FCN(1) GO TO 47
1301 GO TO 31
1302 27 51#
1303 END
1304 *****
1305 SUBROUTINE TPE1,SUBTIVE
1306 DIMENSION A(2,2),X(2)
1307 DIMENSION A(2,2),V(10),Z(10)
1308 I=1
1309 DO 10 I=1,2
1310 A(I,I)=1
1311 I=1
1312 DO 10 I=1,2
1313 A(I,I)=1
1314 I=1
1315 DO 10 I=1,2
1316 A(I,I)=1
1317 I=1
1318 DO 10 I=1,2
1319 A(I,I)=1
1320 I=1
1321 DO 10 I=1,2
1322 A(I,I)=1
1323 I=1
1324 DO 10 I=1,2
1325 A(I,I)=1
1326 I=1
1327 DO 10 I=1,2
1328 A(I,I)=1
1329 I=1
1330 DO 10 I=1,2
1331 A(I,I)=1
1332 I=1
1333 DO 10 I=1,2
1334 A(I,I)=1
1335 I=1
1336 DO 10 I=1,2
1337 A(I,I)=1
1338 I=1
1339 DO 10 I=1,2
1340 A(I,I)=1
1341 I=1
1342 DO 10 I=1,2
1343 A(I,I)=1
1344 I=1
1345 DO 10 I=1,2
1346 A(I,I)=1
1347 I=1
1348 DO 10 I=1,2
1349 A(I,I)=1
1350 I=1
1351 DO 10 I=1,2
1352 A(I,I)=1
1353 I=1
1354 DO 10 I=1,2
1355 A(I,I)=1
1356 I=1
1357 DO 10 I=1,2
1358 A(I,I)=1
1359 I=1
1360 DO 10 I=1,2
1361 A(I,I)=1
1362 I=1
1363 DO 10 I=1,2
1364 A(I,I)=1
1365 I=1
1366 DO 10 I=1,2
1367 A(I,I)=1
1368 I=1
1369 DO 10 I=1,2
1370 A(I,I)=1
1371 I=1
1372 DO 10 I=1,2
1373 A(I,I)=1
1374 I=1
1375 DO 10 I=1,2
1376 A(I,I)=1
1377 I=1
1378 DO 10 I=1,2
1379 A(I,I)=1
1380 I=1
1381 DO 10 I=1,2
1382 A(I,I)=1
1383 I=1
1384 DO 10 I=1,2
1385 A(I,I)=1
1386 I=1
1387 DO 10 I=1,2
1388 A(I,I)=1
1389 I=1
1390 DO 10 I=1,2
1391 A(I,I)=1
1392 I=1
1393 DO 10 I=1,2
1394 A(I,I)=1
1395 I=1
1396 DO 10 I=1,2
1397 A(I,I)=1
1398 I=1
1399 DO 10 I=1,2
1400 A(I,I)=1
1401 I=1
1402 DO 10 I=1,2
1403 A(I,I)=1
1404 I=1
1405 DO 10 I=1,2
1406 A(I,I)=1
1407 I=1
1408 DO 10 I=1,2
1409 A(I,I)=1
1410 I=1
1411 DO 10 I=1,2
1412 A(I,I)=1
1413 I=1
1414 DO 10 I=1,2
1415 A(I,I)=1
1416 I=1
1417 DO 10 I=1,2
1418 A(I,I)=1
1419 I=1
1420 DO 10 I=1,2
1421 A(I,I)=1
1422 I=1
1423 DO 10 I=1,2
1424 A(I,I)=1
1425 I=1
1426 DO 10 I=1,2
1427 A(I,I)=1
1428 I=1
1429 DO 10 I=1,2
1430 A(I,I)=1
1431 I=1
1432 DO 10 I=1,2
1433 A(I,I)=1
1434 I=1
1435 DO 10 I=1,2
1436 A(I,I)=1
1437 I=1
1438 DO 10 I=1,2
1439 A(I,I)=1
1440 I=1
1441 DO 10 I=1,2
1442 A(I,I)=1
1443 I=1
1444 DO 10 I=1,2
1445 A(I,I)=1
1446 I=1
1447 DO 10 I=1,2
1448 A(I,I)=1
1449 I=1
1450 DO 10 I=1,2
1451 A(I,I)=1
1452 I=1
1453 DO 10 I=1,2
1454 A(I,I)=1
1455 I=1
1456 DO 10 I=1,2
1457 A(I,I)=1
1458 I=1
1459 DO 10 I=1,2
1460 A(I,I)=1
1461 I=1
1462 DO 10 I=1,2
1463 A(I,I)=1
1464 I=1
1465 DO 10 I=1,2
1466 A(I,I)=1
1467 I=1
1468 DO 10 I=1,2
1469 A(I,I)=1
1470 I=1
1471 DO 10 I=1,2
1472 A(I,I)=1
1473 I=1
1474 DO 10 I=1,2
1475 A(I,I)=1
1476 I=1
1477 DO 10 I=1,2
1478 A(I,I)=1
1479 I=1
1480 DO 10 I=1,2
1481 A(I,I)=1
1482 I=1
1483 DO 10 I=1,2
1484 A(I,I)=1
1485 I=1
1486 DO 10 I=1,2
1487 A(I,I)=1
1488 I=1
1489 DO 10 I=1,2
1490 A(I,I)=1
1491 I=1
1492 DO 10 I=1,2
1493 A(I,I)=1
1494 I=1
1495 DO 10 I=1,2
1496 A(I,I)=1
1497 I=1
1498 DO 10 I=1,2
1499 A(I,I)=1
1500 I=1
1501 DO 10 I=1,2
1502 A(I,I)=1
1503 I=1
1504 DO 10 I=1,2
1505 A(I,I)=1
1506 I=1
1507 DO 10 I=1,2
1508 A(I,I)=1
1509 I=1
1510 DO 10 I=1,2
1511 A(I,I)=1
1512 I=1
1513 DO 10 I=1,2
1514 A(I,I)=1
1515 I=1
1516 DO 10 I=1,2
1517 A(I,I)=1
1518 I=1
1519 DO 10 I=1,2
1520 A(I,I)=1
1521 I=1
1522 DO 10 I=1,2
1523 A(I,I)=1
1524 I=1
1525 DO 10 I=1,2
1526 A(I,I)=1
1527 I=1
1528 DO 10 I=1,2
1529 A(I,I)=1
1530 I=1
1531 DO 10 I=1,2
1532 A(I,I)=1
1533 I=1
1534 DO 10 I=1,2
1535 A(I,I)=1
1536 I=1
1537 DO 10 I=1,2
1538 A(I,I)=1
1539 I=1
1540 DO 10 I=1,2
1541 A(I,I)=1
1542 I=1
1543 DO 10 I=1,2
1544 A(I,I)=1
1545 I=1
1546 DO 10 I=1,2
1547 A(I,I)=1
1548 I=1
1549 DO 10 I=1,2
1550 A(I,I)=1
1551 I=1
1552 DO 10 I=1,2
1553 A(I,I)=1
1554 I=1
1555 DO 10 I=1,2
1556 A(I,I)=1
1557 I=1
1558 DO 10 I=1,2
1559 A(I,I)=1
1560 I=1
1561 DO 10 I=1,2
1562 A(I,I)=1
1563 I=1
1564 DO 10 I=1,2
1565 A(I,I)=1
1566 I=1
1567 DO 10 I=1,2
1568 A(I,I)=1
1569 I=1
1570 DO 10 I=1,2
1571 A(I,I)=1
1572 I=1
1573 DO 10 I=1,2
1574 A(I,I)=1
1575 I=1
1576 DO 10 I=1,2
1577 A(I,I)=1
1578 I=1
1579 DO 10 I=1,2
1580 A(I,I)=1
1581 I=1
1582 DO 10 I=1,2
1583 A(I,I)=1
1584 I=1
1585 DO 10 I=1,2
1586 A(I,I)=1
1587 I=1
1588 DO 10 I=1,2
1589 A(I,I)=1
1590 I=1
1591 DO 10 I=1,2
1592 A(I,I)=1
1593 I=1
1594 DO 10 I=1,2
1595 A(I,I)=1
1596 I=1
1597 DO 10 I=1,2
1598 A(I,I)=1
1599 I=1
1600 DO 10 I=1,2
1601 A(I,I)=1
1602 I=1
1603 DO 10 I=1,2
1604 A(I,I)=1
1605 I=1
1606 DO 10 I=1,2
1607 A(I,I)=1
1608 I=1
1609 DO 10 I=1,2
1610 A(I,I)=1
1611 I=1
1612 DO 10 I=1,2
1613 A(I,I)=1
1614 I=1
1615 DO 10 I=1,2
1616 A(I,I)=1
1617 I=1
1618 DO 10 I=1,2
1619 A(I,I)=1
1620 I=1
1621 DO 10 I=1,2
1622 A(I,I)=1
1623 I=1
1624 DO 10 I=1,2
1625 A(I,I)=1
1626 I=1
1627 DO 10 I=1,2
1628 A(I,I)=1
1629 I=1
1630 DO 10 I=1,2
1631 A(I,I)=1
1632 I=1
1633 DO 10 I=1,2
1634 A(I,I)=1
1635 I=1
1636 DO 10 I=1,2
1637 A(I,I)=1
1638 I=1
1639 DO 10 I=1,2
1640 A(I,I)=1
1641 I=1
1642 DO 10 I=1,2
1643 A(I,I)=1
1644 I=1
1645 DO 10 I=1,2
1646 A(I,I)=1
1647 I=1
1648 DO 10 I=1,2
1649 A(I,I)=1
1650 I=1
1651 DO 10 I=1,2
1652 A(I,I)=1
1653 I=1
1654 DO 10 I=1,2
1655 A(I,I)=1
1656 I=1
1657 DO 10 I=1,2
1658 A(I,I)=1
1659 I=1
1660 DO 10 I=1,2
1661 A(I,I)=1
1662 I=1
1663 DO 10 I=1,2
1664 A(I,I)=1
1665 I=1
1666 DO 10 I=1,2
1667 A(I,I)=1
1668 I=1
1669 DO 10 I=1,2
1670 A(I,I)=1
1671 I=1
1672 DO 10 I=1,2
1673 A(I,I)=1
1674 I=1
1675 DO 10 I=1,2
1676 A(I,I)=1
1677 I=1
1678 DO 10 I=1,2
1679 A(I,I)=1
1680 I=1
1681 DO 10 I=1,2
1682 A(I,I)=1
1683 I=1
1684 DO 10 I=1,2
1685 A(I,I)=1
1686 I=1
1687 DO 10 I=1,2
1688 A(I,I)=1
1689 I=1
1690 DO 10 I=1,2
1691 A(I,I)=1
1692 I=1
1693 DO 10 I=1,2
1694 A(I,I)=1
1695 I=1
1696 DO 10 I=1,2
1697 A(I,I)=1
1698 I=1
1699 DO 10 I=1,2
1700 A(I,I)=1
1701 I=1
1702 DO 10 I=1,2
1703 A(I,I)=1
1704 I=1
1705 DO 10 I=1,2
1706 A(I,I)=1
1707 I=1
1708 DO 10 I=1,2
1709 A(I,I)=1
1710 I=1
1711 DO 10 I=1,2
1712 A(I,I)=1
1713 I=1
1714 DO 10 I=1,2
1715 A(I,I)=1
1716 I=1
1717 DO 10 I=1,2
1718 A(I,I)=1
1719 I=1
1720 DO 10 I=1,2
1721 A(I,I)=1
1722 I=1
1723 DO 10 I=1,2
1724 A(I,I)=1
1725 I=1
1726 DO 10 I=1,2
1727 A(I,I)=1
1728 I=1
1729 DO 10 I=1,2
1730 A(I,I)=1
1731 I=1
1732 DO 10 I=1,2
1733 A(I,I)=1
1734 I=1
1735 DO 10 I=1,2
1736 A(I,I)=1
1737 I=1
1738 DO 10 I=1,2
1739 A(I,I)=1
1740 I=1
1741 DO 10 I=1,2
1742 A(I,I)=1
1743 I=1
1744 DO 10 I=1,2
1745 A(I,I)=1
1746 I=1
1747 DO 10 I=1,2
1748 A(I,I)=1
1749 I=1
1750 DO 10 I=1,2
1751 A(I,I)=1
1752 I=1
1753 DO 10 I=1,2
1754 A(I,I)=1
1755 I=1
1756 DO 10 I=1,2
1757 A(I,I)=1
1758 I=1
1759 DO 10 I=1,2
1760 A(I,I)=1
1761 I=1
1762 DO 10 I=1,2
1763 A(I,I)=1
1764 I=1
1765 DO 10 I=1,2
1766 A(I,I)=1
1767 I=1
1768 DO 10 I=1,2
1769 A(I,I)=1
1770 I=1
1771 DO 10 I=1,2
1772 A(I,I)=1
1773 I=1
1774 DO 10 I=1,2
1775 A(I,I)=1
1776 I=1
1777 DO 10 I=1,2
1778 A(I,I)=1
1779 I=1
1780 DO 10 I=1,2
1781 A(I,I)=1
1782 I=1
1783 DO 10 I=1,2
1784 A(I,I)=1
1785 I=1
1786 DO 10 I=1,2
1787 A(I,I)=1
1788 I=1
1789 DO 10 I=1,2
1790 A(I,I)=1
1791 I=1
1792 DO 10 I=1,2
1793 A(I,I)=1
1794 I=1
1795 DO 10 I=1,2
1796 A(I,I)=1
1797 I=1
1798 DO 10 I=1,2
1799 A(I,I)=1
1800 I=1
1801 DO 10 I=1,2
1802 A(I,I)=1
1803 I=1
1804 DO 10 I=1,2
1805 A(I,I)=1
1806 I=1
1807 DO 10 I=1,2
1808 A(I,I)=1
1809 I=1
1810 DO 10 I=1,2
1811 A(I,I)=1
1812 I=1
1813 DO 10 I=1,2
1814 A(I,I)=1
1815 I=1
1816 DO 10 I=1,2
1817 A(I,I)=1
1818 I=1
1819 DO 10 I=1,2
1820 A(I,I)=1
1821 I=1
1822 DO 10 I=1,2
1823 A(I,I)=1
1824 I=1
1825 DO 10 I=1,2
1826 A(I,I)=1
1827 I=1
1828 DO 10 I=1,2
1829 A(I,I)=1
1830 I=1
1831 DO 10 I=1,2
1832 A(I,I)=1
1833 I=1
1834 DO 10 I=1,2
1835 A(I,I)=1
1836 I=1
1837 DO 10 I=1,2
1838 A(I,I)=1
1839 I=1
1840 DO 10 I=1,2
1841 A(I,I)=1
1842 I=1
1843 DO 10 I=1,2
1844 A(I,I)=1
1845 I=1
1846 DO 10 I=1,2
1847 A(I,I)=1
1848 I=1
1849 DO 10 I=1,2
1850 A(I,I)=1
1851 I=1
1852 DO 10 I=1,2
1853 A(I,I)=1
1854 I=1
1855 DO 10 I=1,2
1856 A(I,I)=1
1857 I=1
1858 DO 10 I=1,2
1859 A(I,I)=1
1860 I=1
1861 DO 10 I=1,2
1862 A(I,I)=1
1863 I=1
1864 DO 10 I=1,2
1865 A(I,I)=1
1866 I=1
1867 DO 10 I=1,2
1868 A(I,I)=1
1869 I=1
1870 DO 10 I=1,2
1871 A(I,I)=1
1872 I=1
1873 DO 10 I=1,2
1874 A(I,I)=1
1875 I=1
1876 DO 10 I=1,2
1877 A(I,I)=1
1878 I=1
1879 DO 10 I=1,2
1880 A(I,I)=1
1881 I=1
1882 DO 10 I=1,2
1883 A(I,I)=1
1884 I=1
1885 DO 10 I=1,2
1886 A(I,I)=1
1887 I=1
1888 DO 10 I=1,2
1889 A(I,I)=1
1890 I=1
1891 DO 10 I=1,2
1892 A(I,I)=1
1893 I=1
1894 DO 10 I=1,2
1895 A(I,I)=1
1896 I=1
1897 DO 10 I=1,2
1898 A(I,I)=1
1899 I=1
1900 DO 10 I=1,2
1901 A(I,I)=1
1902 I=1
1903 DO 10 I=1,2
1904 A(I,I)=1
1905 I=1
1906 DO 10 I=1,2
1907 A(I,I)=1
1908 I=1
1909 DO 10 I=1,2
1910 A(I,I)=1
1911 I=1
1912 DO 10 I=1,2
1913 A(I,I)=1
1914 I=1
1915 DO 10 I=1,2
1916 A(I,I)=1
1917 I=1
1918 DO 10 I=1,2
1919 A(I,I)=1
1920 I=1
1921 DO 10 I=1,2
1922 A(I,I)=1
1923 I=1
1924 DO 10 I=1,2
1925 A(I,I)=1
1926 I=1
1927 DO 10 I=1,2
1928 A(I,I)=1
1929 I=1
1930 DO 10 I=1,2
1931 A(I,I)=1
1932 I=1
1933 DO 10 I=1,2
1934 A(I,I)=1
1935 I=1
1936 DO 10 I=1,2
1937 A(I,I)=1
1938 I=1
1939 DO 10 I=1,2
1940 A(I,I)=1
1941 I=1
1942 DO 10 I=1,2
1943 A(I,I)=1
1944 I=1
1945 DO 10 I=1,2
1946 A(I,I)=1
1947 I=1
1948 DO 10 I=1,2
1949 A(I,I)=1
1950 I=1
1951 DO 10 I=1,2
1952 A(I,I)=1
1953 I=1
1954 DO 10 I=1,2
1955 A(I,I)=1
1956 I=1
1957 DO 10 I=1,2
1958 A(I,I)=1
1959 I=1
1960 DO 10 I=1,2
1961 A(I,I)=1
1962 I=1
1963 DO 10 I=1,2
1964 A(I,I)=1
1965 I=1
1966 DO 10 I=1,2
1967 A(I,I)=1
1968 I=1
1969 DO 10 I=1,2
1970 A(I,I)=1
1971 I=1
1972 DO 10 I=1,2
1973 A(I,I)=1
1974 I=1
1975 DO 10 I=1,2
1976 A(I,I)=1
1977 I=1
1978 DO 10 I=1,2
1979 A(I,I)=1
1980 I=1
1981 DO 10 I=1,2
1982 A(I,I)=1
1983 I=1
1984 DO 10 I=1,2
1985 A(I,I)=1
1986 I=1
1987 DO 10 I=1,2
1988 A(I,I)=1
1989 I=1
1990 DO 10 I=1,2
1991 A(I,I)=1
1992 I=1
1993 DO 10 I=1,2
1994 A(I,I)=1
1995 I=1
1996 DO 10 I=1,2
1997 A(I,I)=1
1998 I=1
1999 DO 10 I=1,2
2000 A(I,I)=1

```



CALCULO DE LAS CONCENTRACIONES EN EL EQUILIBRIO DEL SISTEMA METANO-AGUA  
 POR EL METODO DE MINIMIZACION DE ENERGIA LIBRE

DATOS DEL SISTEMA:

NUMERO DE COMPUESTOS (N) = 5  
 NOMBRE DE LOS COMPONENTES: METANO, HIDROGENO, AGUA, MONOXIDO DE CARBONO Y DIOXIDO DE CARBONO  
 NUMERO DE ELEMENTOS QUE CONSTITUYEN LOS COMPONENTES (M) = 3  
 NOMBRE DE LOS ELEMENTOS: CARBONO, HIDROGENO Y OXIGENO  
 PRESION TOTAL DEL SISTEMA (ATMOSFERAS) = 1.00  
 TEMPERATURA DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO (GRADOS KELVIN) = 873.000

COMPOSICIONES SUPUESTAS AL COMIENZO DEL CALCULO (Y(I))

COMPUESTO	FLUJO MOLAR
CH <sub>4</sub>	.18570
H <sub>2</sub>	7.19450
H <sub>2</sub> O	8.23030
CO	.93200
CO <sub>2</sub>	.05460

TABLA DE ELEMENTOS POR COMPUESTO (A(I,J))

	C	H	O
CH <sub>4</sub>	1.0	4.0	.0
H <sub>2</sub>	.0	2.0	.0
H <sub>2</sub> O	.0	2.0	1.0
CO	1.0	.0	1.0
CO <sub>2</sub>	1.0	.0	2.0

NUMERO TOTAL DE PESOS ATOMICOS DEL J-ESIMO ATOMO (G(J))

C	H	O
.94230	13.1940	4.71150

— TABLA DE CALCULOS ITERATIVOS —

FLUJOS MOLARES (LI-MOL/HR)

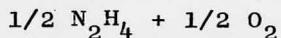
ITERACION	CH <sub>4</sub>	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	CO	CO <sub>2</sub>	TOTAL
1	.1857	7.1945	8.2303	.9320	.0546	16.5971
2	.1561	2.6102	3.6737	.5346	.2516	7.2262
3	.1034	3.0912	3.2982	.2646	.5744	7.3317
4	.0853	3.1965	3.2291	.2316	.6254	7.3679

COMPOSICION DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO

COMPUESTO	FLUJO MOLAR	PORCIENTO MOL
CH4	.0859	1.1654
H2	3.1939	43.3557
H2O	3.2306	43.8531
CO	.2320	3.1406
CO2	.6245	8.4771

Para la determinación de los gases de la combustión de una mezcla estequiométrica de Hidrazina y Oxígeno a una temperatura de  $3500^{\circ}\text{K}$  y  $51.02$  Atm. de presión, se aplicará el método de minimización de energía libre.

Reacción principal:



Condiciones:

$$P = 51.02 \text{ Atmósferas}$$

$$T = 3500^{\circ}\text{K}$$

Alimentación:

$$.5 \text{ moles de } \text{N}_2\text{H}_4 + .5 \text{ moles ..} \\ \text{de } \text{O}_2$$

Las posibles especies en el equilibrio son:



TABLA DE VALORES DE ENERGÍAS LIBRES Y MATRIZ ( $a_{i,j}$ )

i	especie	(F/RT)(4)	Matriz ( $a_{i,j}$ )		
			H j=1	N j=2	O j=3
1	H	-10.021	1	0	0
2	H <sub>2</sub>	-21.096	2	0	0
3	H <sub>2</sub> O	-37.986	2	0	1
4	N	- 9.846	0	1	0
5	N <sub>2</sub>	-28.653	0	2	0
6	NH	-18.918	1	1	0
7	NO	-28.032	0	1	1
8	O	-14.640	0	0	1
9	O <sub>2</sub>	-30.954	0	0	2
10	OH	-26.111	1	0	1
	$b_j$ (para este sistema)=		2	1	1

A continuación se muestra los resultados de un programa de computadora, para este sistema en particular, que fueron ejecutados en un sistema Univac 1100.

Criterio de convergencia para el sistema en equilibrio Hidrazina-Oxígeno.

Para este sistema, no se tuvieron problemas de convergencias - como en el sistema Metano-Agua. En este programa se aplicó el criterio que recomiendan los autores (3):

$$Y(I)' = Y(I) - \lambda (Y(I) - YC(I))$$

Donde:

$Y(I)'$  = Composición nueva

$Y(I)$  = Composición supuesta

$YC(I)$  = Composición calculada.

$\lambda$  = Factor de relajación = .23

La conversión fué alcanzada en 29 iteraciones y se logró alcanzar el equilibrio de esas condiciones. Con este tipo de criterio se lograron buenos resultados y que son los que se muestran en el programa.

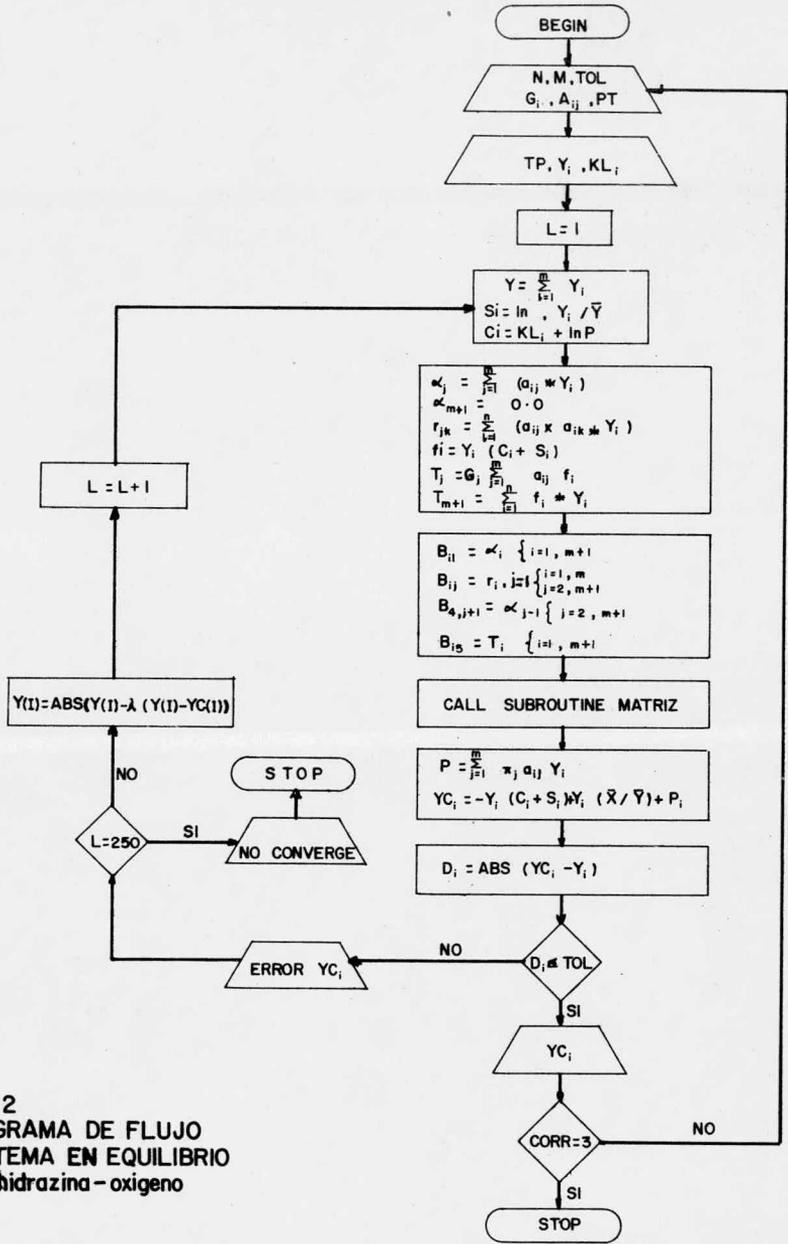


Fig. 2  
 DIAGRAMA DE FLUJO  
 SISTEMA EN EQUILIBRIO  
 hidrazina - oxígeno





```

1100 20 PRINT 'INICIO DE CONVERGENCIA'
1110 40 PRINT 'FIN DE PROGRAMACION'
1120 40 PRINT 'CORRIGIR TO 27'
1130 60 TO 31
1140 19 PRINT 'ITERACION'
1150 19 PRINT '(I)/YT*100'
1160 PRINT '0'
1170 40 PRINT '(1) COMPOSICION DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO/4IX*COM'
1180 40 PRINT 'COMPOSICION POLAR/4X*COEFICIENTE POLAR'
1190 60 TO 141
1200 40 PRINT '(47) COMPOSICION (I) PEN(I)'
1210 47 PRINT '(2) 4X*12X*9.4*11X*9.4'
1220 40 PRINT 'CORRIGIR TO 27'
1230 60 TO 31
1240 27 STOP
1250 END
1300 15 TRANSFORMACION
1310 20 PRINT 'MTRIZ (A+YT*Z)'
1320 DIMENSION A(4,5)/V(10)/Z(10)
1330 N=4
1340 M=5
1350 L=1
1360 K=1
1370 I=1
1380 5 J=1
1390 500 A(I,J)=A(I,J)/A(I,K)
1400 1/(A(I,K)) TO 2
1410 J=J+1
1420 4 TO 5
1430 2 1/(A(I,K)+A(I,J)*Z(I)) TO 2
1440 4 I=I+1
1450 J=1
1460 500 A(I,J)=A(I,K)+A(I,J)*Z(I)
1470 1/(A(I,K)) TO 3
1480 J=J+1
1490 60 TO 6
1500 3 1/(A(I,K)+A(I,J)*Z(I)) TO 3
1510 K=K+1
1520 I=K
1530 L=L+1
1540 60 TO 5
1550 4 L=L+1
1560 60 TO 6
1570 20 K=1
1580 L=K
1590 V(L)=A(L,K)
1600 11 SUM=0
1610 L=L+1
1620 10 PRUEBA
1630 P=V(L)+A(L,K)*V(L,K)
1640 SUM=SUM+P
1650 L=L+1
1660 1/(A(L,K)+P) TO 9
1670 K=K+1
1680 60 TO 10
1690 9 V(L)=(L)-SUM
1700 1/(A(L,K)+P) TO 12
1710 K=1
1720 60 TO 11
1730 12 YI=V(11)
1740 SUM=YI

```

```

150: 0.701E+01
160: 70 Z(I)=(I+1)
170: RETURN
180: END
190: *****TPF1*****
200: 10 TPF1=ENFRACC
210: 10 TPF1=SUMIVM
220: END
230: *****TPF2*****
240: 50005 =10*ME=3,PT=51.00041,TOL=0.001,CF2=.1,.1,AE=1.,2*2.,2*0.,1.,3*0.
250: 1.73*0.,1.72*1.,1.73*0.,2*0.,1.,3*0.,2*1.,2.,1.,3*0.
260: 5ARI TP=3000.,Y=10.,30.,50.,10.,50.,1.,1.,1.,1.
270: AL=10.021*-21.0960=-37.9860,-9.8460,-28.6530,-18.9180,-28.6320
280: -14.5840,-30.3940=-26.1110*END
290: 50005 =10*ME=3,PT=51.00041,TOL=0.001,CF2=.1,.1,AE=1.,2*2.,2*0.,1.,3*0.
300: 1.73*0.,1.72*1.,1.73*0.,2*0.,1.,3*0.,2*1.,2.,1.,3*0.
310: 5ARI TP=3000.,Y=10.,30.,50.,10.,50.,1.,1.,1.,1.
320: AL=10.021*-21.0960=-37.9860,-9.8460,-28.6530,-18.9180,-28.6320
330: -14.5840,-30.3940=-26.1110*END
340: 50005 =10*ME=3,PT=51.00041,TOL=0.001,CF2=.1,.1,AE=1.,2*2.,2*0.,1.,3*0.
350: 1.73*0.,1.72*1.,1.73*0.,2*0.,1.,3*0.,2*1.,2.,1.,3*0.
360: 5ARI TP=3000.,Y=15.,2.5.,15.,10.,(5.,1.,9.,1.5.,0.5.,0.5.
370: AL=10.021*-21.0960=-37.9860,-9.8460,-28.6530,-18.9180,-28.6320
380: -14.5840,-30.3940=-26.1110*END
390: *****

```

END OF THE PRINTOUT ON SEPTEMBER 10, 1978 AT 19:00:18  
 EDW:RUC:AIUS(1),FREC:SK2(3)

DATA DOCUMENTATION SERVICE  
 NATIONAL BUREAU OF STANDARDS- Gaithersburg, MD 20899

CALCULO DE LAS CONCENTRACIONES EN EL EQUILIBRIO DEL SISTEMA HIDRAZINA-OXIGENO  
 POR EL METODO DE MINIMIZACION DE ENERGIA LIBRE

UNIDAD DEL SISTEMA:

NUMERO DE COMPONENTES (C) = 10

NOMBRE DE LOS COMPONENTES: HIDROGENO ATOMICO, HIDROGENO MOLECULAR, AGUA, NITROGENO ATOMICO,  
 NITROGENO MOLECULAR, RADICAL AMINA, MONOXIDO DE NITROGENO, OXIGENO  
 ATOMICO, OXIGENO MOLECULAR Y RADICAL OXIDRILLO

NUMERO DE LOS ELEMENTOS QUE CONSTITUYEN LOS COMPONENTES (M) = 3

NOMBRE DE LOS ELEMENTOS: HIDROGENO, NITROGENO Y OXIGENO

PRESION TOTAL DEL SISTEMA (ATMOSFERAS) = 51.02

TEMPERATURA DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO (GRADOS KELVIN) = 3500.0000

COMPOSICIONES SUPLENIDAS AL COMIENZO DEL CALCULO (Y(1))

COMPUESTO FLUJO MOLAR

H	10000
H2	35000
H2O	50000
N	10000
N2	35000
NH	10000
NO	10000
O	10000
O2	10000

COMPUESTO FLUJO MOLAR

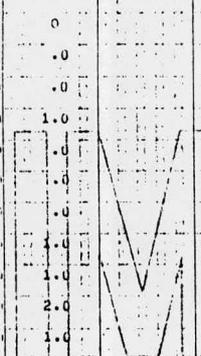
H	10000
H2	35000
H2O	50000
N	10000
N2	35000
NH	10000
NO	10000
O	10000
O2	10000

TABLA DE LÍMITES POR COMPUESTO (A(I,J))

	N	0
1	1.0	.0
12	2.0	.0
120	2.0	1.0
4	.0	1.0
12	.0	2.0
101	1.0	1.0
10	.0	1.0
1	.0	.0
12	.0	2.0
104	1.0	1.0

NÚMERO TOTAL DE PESOS ATÓMICOS DEL J-ÉSIMO ÁTOMO (S(J))

N	0
2.00000	1.00000
1.00000	1.00000



— — — — —  
 TABLA DE CALCULOS ITERATIVOS  
 — — — — —

FLUJOS MOLARES (L3-MOL/HR)

ITERACION	M	N1	N2	N3	N4	N5	N6	O	O2	OH	TOTAL
1	1.000	1.000	1.000	1.000	1.3500	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.9000
2	0.976	0.976	0.997	0.115	1.4532	0.005	0.016	0.0593	0.0780	0.1035	1.7764
3	0.987	0.988	0.945	0.060	1.4653	0.005	0.029	0.0438	0.0674	0.1041	1.7320
4	0.995	0.996	0.911	0.040	1.4719	0.006	0.016	0.0351	0.0594	0.1035	1.7042
5	0.999	0.998	0.892	0.030	1.4760	0.006	0.044	0.0294	0.0536	0.1025	1.6458
6	0.999	0.999	0.850	0.025	1.4786	0.006	0.096	0.0264	0.0494	0.1015	1.6731
7	0.999	0.998	0.804	0.022	1.4804	0.006	0.363	0.0241	0.0463	0.1006	1.6542
8	0.999	0.999	0.755	0.020	1.4817	0.006	0.240	0.0225	0.0441	0.0998	1.6577
9	0.999	0.999	0.703	0.018	1.4826	0.007	0.323	0.0213	0.0425	0.0992	1.6529
10	0.999	0.999	0.703	0.017	1.4833	0.007	0.311	0.0205	0.0412	0.0987	1.6494
11	0.999	0.999	0.711	0.016	1.4837	0.007	0.302	0.0199	0.0403	0.0983	1.6468
12	0.999	0.999	0.710	0.016	1.4841	0.007	0.295	0.0194	0.0396	0.0979	1.6448
13	0.999	0.999	0.701	0.015	1.4844	0.007	0.290	0.0191	0.0390	0.0977	1.6433
14	0.999	0.999	0.700	0.015	1.4846	0.007	0.286	0.0188	0.0386	0.0975	1.6422
15	0.999	0.999	0.700	0.015	1.4847	0.007	0.283	0.0186	0.0383	0.0974	1.6413
16	0.999	0.999	0.700	0.015	1.4849	0.007	0.280	0.0184	0.0381	0.0973	1.6406
17	0.999	0.999	0.700	0.015	1.4849	0.007	0.280	0.0183	0.0379	0.0972	1.6401
18	0.999	0.999	0.703	0.014	1.4850	0.007	0.278	0.0182	0.0378	0.0971	1.6397
19	0.999	0.999	0.717	0.014	1.4851	0.007	0.277	0.0182	0.0377	0.0970	1.6394
20	0.999	0.999	0.721	0.014	1.4851	0.007	0.277	0.0181	0.0376	0.0970	1.6392
21	0.999	0.999	0.723	0.014	1.4851	0.007	0.276	0.0181	0.0375	0.0970	1.6390
22	0.999	0.999	0.725	0.014	1.4852	0.007	0.275	0.0180	0.0375	0.0969	1.6389
23	0.999	0.999	0.727	0.014	1.4852	0.007	0.275	0.0180	0.0374	0.0969	1.6388
24	0.999	0.999	0.726	0.014	1.4852	0.007	0.275	0.0180	0.0374	0.0969	1.6387
25	0.999	0.999	0.729	0.014	1.4852	0.007	0.275	0.0180	0.0374	0.0969	1.6386
26	0.999	0.999	0.729	0.014	1.4852	0.007	0.275	0.0180	0.0374	0.0969	1.6386
27	0.999	0.999	0.730	0.014	1.4852	0.007	0.274	0.0180	0.0374	0.0969	1.6385





CAPITULO VCOMPORTAMIENTO DE REACTORES EN PLANTAS DE  
AZUFRE POR EL METODO DE MINIMIZACION DE -  
ENERGIA LIBRE

El objetivo de este capítulo es tratar de darle un-- nuevo enfoque en el estudio de comportamiento de los reactores en plantas de azufre, aplicando el método de minimización de - energía libre.

A continuación se hace una breve descripción del proceso de -- una planta recuperadora de azufre, la cual utiliza el proceso- Claus.

Esta descripción se hace con el fin de observar la importancia que tienen los reactores catalíticos en la eficiencia global - del proceso.

#### 5.1a. Descripción del proceso.

Los gases ácidos provenientes de una planta Girbotol, se alimentan al separador de entrada de la planta (FA-100), pa ra asegurar una eficiente separación de cualquier líquido - -- arrastrado.

Los gases ácidos posteriormente se mezclan con aire suficiente provenientes de los sopladores de aire de la planta (GB-100), - para quemar una tercera parte del ácido sulfhídrico en la cáma ra de combustión (RF-200), el cual actúa como un reactor no ca

talítico a altas temperaturas, en esta cámara de combustión -- gran parte de los hidrocarburos presentes en la alimentación -- son quemados produciendo agua y bióxido de azufre. El vapor -- efluente de la cámara de combustión pasa a una unidad recuperadora de calor (H-200), en el cual la mayor parte del calor disipado por la reacción se utiliza para generar vapor. En la cámara de combustión se lleva a cabo una conversión entre el 30- y 40% del ácido sulfhídrico a azufre.

El gas efluente proveniente de la unidad recuperadora de calor pasa un condensador de azufre (X-200), donde el azufre condensado se envía al tanque de almacenamiento de la planta (FB-100) el vapor efluente pasa a un quemador auxiliar (H-201), en el -- cual se mezclan gas ácido proveniente de la alimentación con -- aire, tomándolos en la proporción estequiométrica para obtener una relación  $H_2S/SO_2$  igual a dos, la mezcla pasa al primer -- reactor catalítico (R-200), donde se alcanza una conversión -- aproximadamente entre 35 y 40% basado en el ácido sulfhídrico -- alimentado a la planta. El vapor efluente del reactor catalítico pasa al segundo condensador de azufre (X-201) donde el azufre que se condensa es enviado al tanque de almacenamiento de la planta (FB-100), el vapor es enviado al segundo quemador auxiliar de la planta (H-202), en la cual se mezclan gas ácido -- provenientes de la alimentación con aire, procurando mantener la -- relación  $H_2S/SO_2$  igual a dos. Esta mezcla es enviada al segundo reactor catalítico donde se alcanza una conversión de aproximadamente

madamente entre el 10 y 15%, el vapor efluente del segundo - - reactor catalítico es enviado al tercer condensador de azufre- (X-202), donde el azufre condensado es enviado al tanque de al macenamiento de azufre (FB-100) y el vapor efluente del tercer condensador de azufre es enviado al incinerador de la planta - (BA-100).

Nota: En todos los condensadores el medio enfriante es agua, - de la cual se genera vapor.

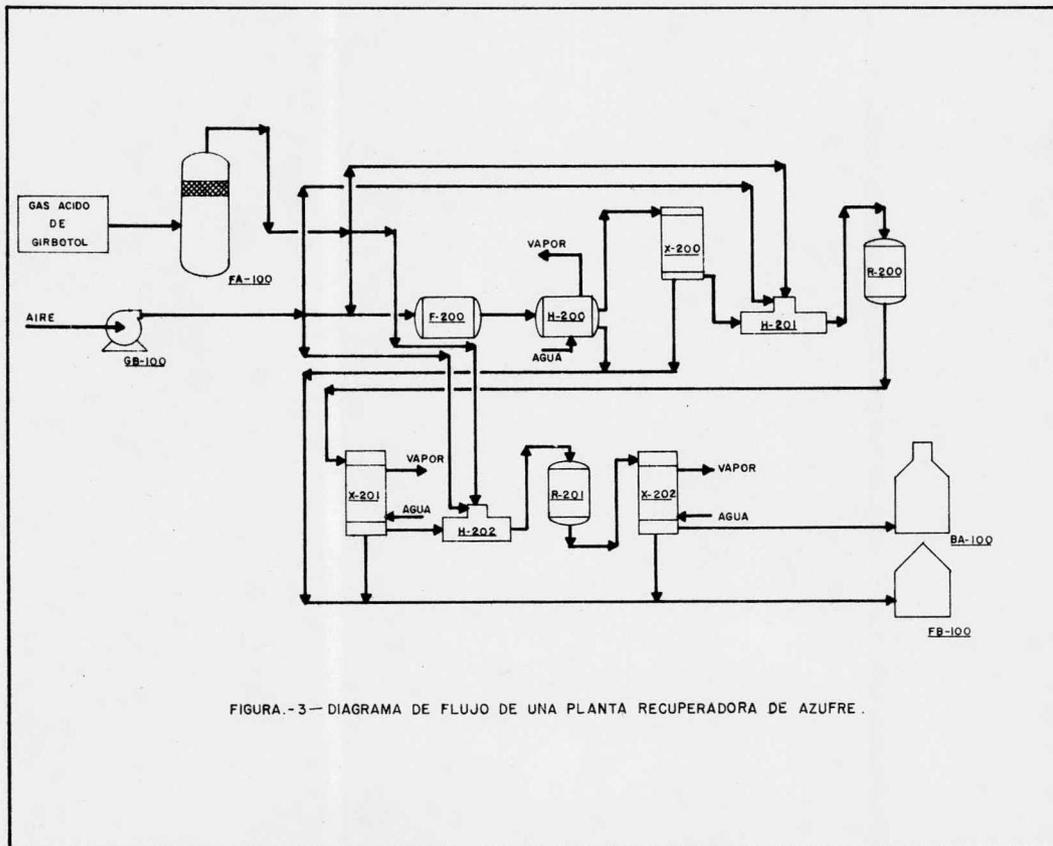


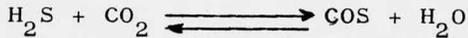
FIGURA.-3- DIAGRAMA DE FLUJO DE UNA PLANTA RECUPERADORA DE AZUFRE .

5.1b. Análisis sobre el comportamiento del  $\text{COS}$  y  $\text{CS}_2$  en los reactores.

En este inciso se estudiará el comportamiento que tiene el sulfuro de carbonilo y disulfuro de carbono en los reactores catalíticos en una planta de azufre.

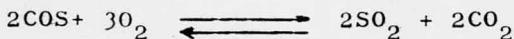
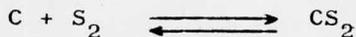
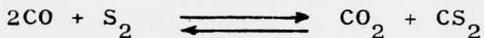
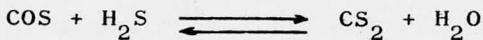
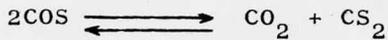
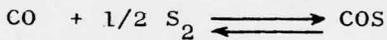
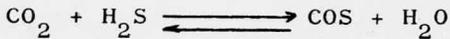
El analizar la presencia de estos dos compuestos es importante, porque su presencia reduce la conversión de azufre, por lo cual la planta debe ser operada a bajar formaciones de sulfuro de carbonilo y disulfuro de carbono. Esto se podría lograr si se pudiera eliminar la presencia de hidrocarburos en la alimentación, ya que al pasar al sistema de combustión generan bióxido de carbono, el cual reacciona con el ácido sulfhídrico para producir sulfuro de carbonilo. En estudios hechos a plantas de azufre en operación, estos han revelado que conversiones a altas temperaturas fueron detrimentemente afectadas por la presencia del bióxido de carbono en la corriente de alimentación, probablemente porque este contribuye a la formación del sulfuro de carbonilo.

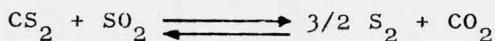
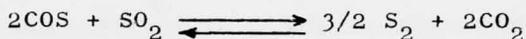
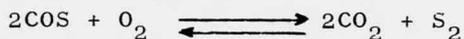
Como la alimentación que recibe la planta contiene hidrocarburos ( $\text{C}_1$ ,  $\text{C}_2$ ,  $\text{C}_3$ ,  $\text{C}_4$  y  $\text{C}_5^+$ ), porque estos no son removidos del proceso de endulzamiento del cuál provienen, estos al pasar a la cámara de combustión son oxidados en su totalidad, produciendo bióxido de carbono y agua. El bióxido de carbono formado y en presencia del ácido sulfhídrico a elevadas temperaturas (14) produce sulfuro de carbonilo. A continuación se presenta la reacción:



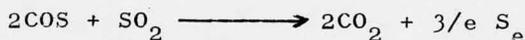
Como la reacción se ve favorecida a altas temperaturas, es por esto que es necesaria una segunda etapa de conversión catalítica a bajas temperaturas, tanto como lo permita la temperatura de rocío de la mezcla. El sulfuro de carbonilo en presencia de agua producida en la combustión de hidrocarburos y a las temperaturas existentes del horno, la reacción anterior es casi completa de derecha a izquierda, lo cual no se explica la formación del sulfuro de carbonilo en estas condiciones.

Se ha propuesto (11) también las siguientes reacciones para tratar de explicar la presencia del sulfuro de carbonilo.





Tal vez la mejor información (1) acerca de la formación de sulfuro de carbonilo, está dado por la siguiente reacción:



Datos de la literatura (1), indican que la conversión del sulfuro de carbonilo a azufre es del orden de 93% a 500°F para la reacción anterior, la cual se ve favorecida para temperaturas mayores.

En estudios anteriores por no disponer de datos de equilibrio para las reacciones anteriores, no se habían tomado en cuenta en el sistema de reacción, ya que si había formación de COS y CS<sub>2</sub> ésta era muy pequeña y era despreciable con respecto a los demás compuestos.

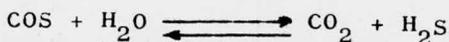
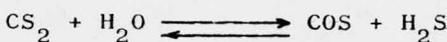
Con el método de minimización de energía libre se tratará de observar su comportamiento y desde luego obtener conclusiones sobre la importancia de su presencia en los reactores catalíticos y comprobar la hipótesis que se han establecido en estu---

dios anteriores (1,6), de que su presencia en el sistema en equilibrio es despreciable con respecto a los demás compuestos por ser muy pequeña. Cabe mencionar que el sistema de reacción para este estudio de comportamiento, se define en el inciso 5.1d.

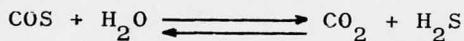
Como se podrá observar en los resultados del programa de computadora que se presenta al final de este capítulo, a bajas temperaturas la presencia del COS es muy pequeña, mientras que la formación del CS<sub>2</sub> es nula, lo cual comprueba en teoría el posible mecanismo de hidrólisis entre el COS y el H<sub>2</sub>O, ya que la concentración del agua a bajas temperaturas es grande. A medida que la temperatura del sistema se aumenta es más apreciable la formación del COS y CS<sub>2</sub>, además el número de moles iniciales de CO<sub>2</sub> no se mantuvo constante en la simulación de la distribución de los equilibrios a altas temperaturas, lo cual comprueba el mecanismo de reacción que existe entre el CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S para formar COS. Además de que la concentración de agua disminuye conforme la temperatura aumenta, lo cual hace más favorable la formación de COS y CS<sub>2</sub> por no existir hidrólisis.

A continuación se muestran las reacciones que ocurren en la posible hidrólisis del COS y CS<sub>2</sub>.

Hidrólisis del CS<sub>2</sub>

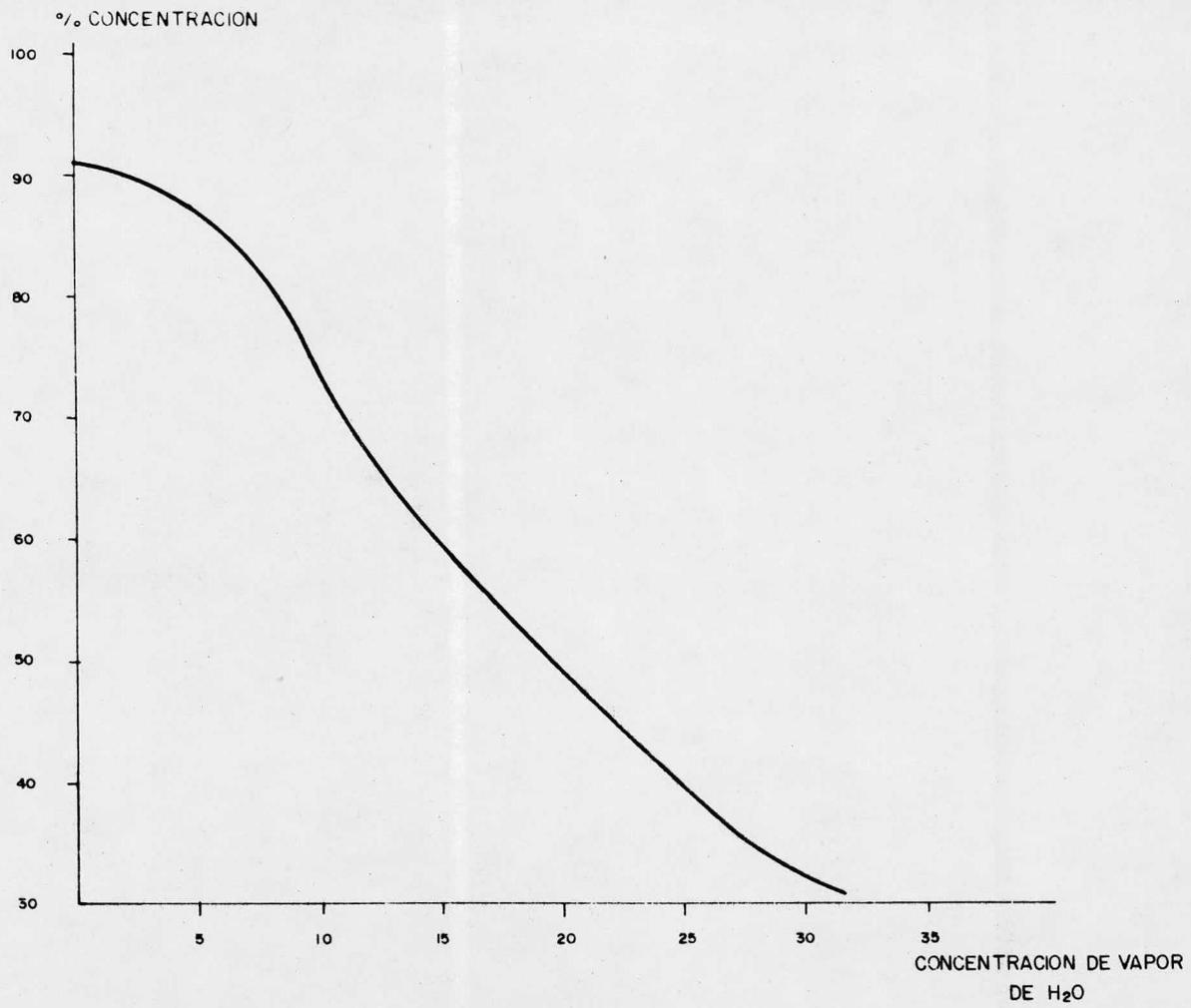


## Hidrólisis del COS



Como se puede observar la hidrólisis del  $\text{CS}_2$  se lleva a cabo en dos etapas, la cual incluyen la del COS. Es por esto que a bajas temperaturas el agua hidroliza al  $\text{CS}_2$  y su presencia es nula en el sistema de reacción.

El agua como ya se había mencionado, hidroliza al COS y  $\text{CS}_2$  a bajas temperaturas, pero también su presencia afecta a la conversión, ya que un alto contenido de agua en los gases que se alimentan al reactor afectan en la conversión global. A continuación se muestra una gráfica en el cual se puede observar el efecto de la concentración del agua en la alimentación con la conversión (14).



**Fig.6.—EFECTO DE LA CONCENTRACION DE AGUA SOBRE LA CONVERSION**

### 5.1c. Análisis de la temperatura de rocío en los reactores.

El tener un buen control de la temperatura en los reactores catalíticos es muy importante, ya que la reacción catalítica debe llevarse a cabo a temperaturas mayores a la cual el azufre condensa, ya que la presencia del azufre líquido en el catalizador disminuye su actividad.

La literatura recomienda (11) que los reactores operen a temperaturas tan bajas como lo permita la temperatura de rocío de los gases del reactor, ya que el operar a tan altas temperaturas, la conversión se ve afectada por la formación del COS y CS<sub>2</sub>.

Es por esto que se recomienda alimentar los gases a los reactores a unos 25<sup>o</sup>F arriba de la temperatura de rocío de los gases productos, ya que la literatura afirma que se podrá obtener la máxima actividad del catalizador. (14)

Cálculo de la temperatura de rocío en la mezcla de gases efluentes del reactor.

Termodinámicamente la temperatura de rocío para el sistema de reacción en los reactores, es aquella a la cual se igualan la presión del azufre y la presión parcial del azufre en la fase gaseosa.

$$P^o = \hat{P}_s$$

..... 5.1

Como los reactores operan a baja presión debido a efectos de conversión, se puede aplicar la ley de Dalton.

$$\hat{P}_s = y_s P \quad \dots\dots\dots 5.2$$

Donde:

$P_s$  = presión parcial del azufre en fase gaseosa.

$P$  = presión total del sistema

$y_s$  = fracción mol total del azufre

$$y_s = \frac{n_{s_2} + n_{s_6} + n_{s_8}}{n_t} \quad \dots\dots\dots 5.3$$

Substituyendo la expresión 5.3 y 5.2 en 5.1, se obtiene lo siguiente:

$$P = \frac{n_{s_2} + n_{s_6} + n_{s_8}}{n_t} P \quad \dots\dots\dots 5.4$$

De la literatura se reporta la presión de vapor de azufre con respecto a la temperatura (21), la cual se muestra en la siguiente tabla:

TABLA DE PRESION DE VAPOR DEL AZUFRE

T <sup>o</sup> F	Atm
248	0.00004
284	0.00014
320	0.00044
356	0.00116
392	0.00279
428	0.00605

Termodinámicamente la variación de la energía libre para una evaporación a temperatura constante, a una atmósfera es dada por la siguiente expresión:

$$\Delta G^{\circ} = -RT \ln P \quad \dots\dots\dots 5.5$$

Despejando  $\ln P$  en la expresión 5.5 y derivando con respecto a la temperatura se obtiene:

$$\frac{d(\ln P)}{dT} = \frac{1}{R} \left( \frac{d\left(\frac{\Delta G^{\circ}_{\text{vap.}}}{T}\right)}{dT} \right) \dots\dots\dots 5.6$$

Pero sabemos por termodinámica que la ecuación de Gibbs-Helmoltz expresa la variación de la energía libre con respecto a la temperatura está dada por la siguiente expresión:

$$\frac{d\left(\frac{\Delta G}{T}\right)}{dT} = - \frac{\Delta H}{RT^2} \quad \dots\dots\dots 5.7$$

Substituyendo la expresión 5.7 en la expresión 5.6, resulta:

$$\frac{d \ln P}{dT} = \frac{\Delta H^{\circ}_{\text{vap}}}{RT^2} \quad \dots\dots\dots 5.8$$

Despreciando la  $\Delta H^{\circ}_{\text{vap}}$  con respecto a la temperatura, la expresión 5.8 se puede integrar.

$$\ln P = - \frac{\Delta H^{\circ}_{\text{vap.}}}{RT} + C \quad \dots\dots 5.9$$

De la expresión 5.9 se puede observar la relación de presión vs. temperatura, lo cual nos conduce a ajustar los valores de pre--

sión de vapor con respecto a la temperatura, a una función lineal del tipo:

$$y = mx + b$$

donde:

$$y = \text{Ln } P$$

$$x = 1/T$$

Aplicando el método de mínimos cuadrados para obtener una regresión lineal con los valores de P y T, se utilizó un programa de calculadora HP-25, el cual a continuación se muestra.

#### PROGRAMA DE HP-25 PARA REGRESION LINEAL

1. enter
2.  $gx^2$
3. sto + 2
4. R
5.  $x \rightleftharpoons y$
6.  $\Sigma +$
7. go to 00
8. Rcl 5
9. Rcl 7
10. Rcl 4
11. X
12. Rcl 3
13. ÷

14. -
15. Rcl 6
16. Rcl 7
17.  $gx^2$
18. Rcl 3
19.  $\div$
20. -
21.  $\div$
22. sto 1
23. Rcl 7
24. X
25. CHS
26. Rcl 4
27. +
28. Rcl 3
29.  $\div$
30. sto 0
31. R/S
32. Rcl 1
33. R/S
34.  $x \leftrightarrow y$
35. R
36. X
37. Rcl 2
38. Rcl 4
39.  $gx^2$

40. Rcl 3  
 41. ÷  
 42. -  
 43. ÷  
 44. go to 00

Datos para alimentar el programa de la HP-25.

	<u>x</u> <u>(1/°R)</u>	<u>y</u> <u>Ln P</u>	
	0.001412	-10.12663	
	0.001344	- 8.87386	
	0.001282	- 7.72873	
	0.001254	- 6.75933	
	0.001173	- 5.88171	
	0.001126	- 5.10769	
f PRGM	f REG		
	.001412 ↑	-10.12663 ↑	..... 1.0
	.001344 ↑	- 3.87386 ↑	..... 2.0
	.001282 ↑	- 7.72873 ↑	..... 3.0
	.001254 ↑	- 6.75933 ↑	..... 4.0
	.001173 ↑	- 5.88171 ↑	..... 5.0
	.001126 ↑	- 5.10769 ↑	..... 6.0
	go to 08	R/S	..... 14.74088
	R/S		..... - 17575.010
m =	- 1575.010		
b =	14.74088		

Por lo tanto la expresión que representa la función de la presión de vapor de azufre con la temperatura es:

$$\ln P_s = - \frac{17575.010}{T_r} + 14.74088$$

Depejando T y sustituyendo las expresiones 5.2 y 5.3 se obtiene la expresión de la temperatura de rocío en función de la composición de la mezcla de gases producto del reactor.

$$T_r = \frac{-17575.010}{P \ln \frac{n_{s2} + n_{s6} + n_{s8}}{n_t}} - 14.74088$$

Donde:

$T_r$  = temperatura de rocío de la mezcla de gases producto del reactor ( $^{\circ}R$ ).

P = presión total del sistema (Atm).

$n_{s_i}$  = moles de las diferentes especies de azufre en la mezcla a la salida del reactor.

$n_t$  = moles totales de la mezcla gaseosa a la salida del reactor.

De los resultados obtenidos de los programas de computadora, se observó que la temperatura de rocío de la corriente efluente del reactor disminuye al incrementar la presión de operación del sistema, lo cual es recomendable, ya que las conversiones más altas son alcanzadas a bajas temperaturas, esto es siempre y cuando lo permita la temperatura de rocío de los gases efluentes del reactor. A continuación se muestra una gráfica, donde se observa el efecto de la presión sobre la temperatura de rocío. Esta gráfica se construyó con datos de un siste

ma que tiene una temperatura de operación de  $500^{\circ}\text{K}$  y una relación de  $\text{H}_2\text{S}/\text{SO}_2 = 2.0$ , utilizando diferentes presiones de operación. De la gráfica se observa que para una presión de 1 Atm. el sistema está operando abajo de su punto de rocío, el cuál - nos indica la presencia de azufre líquido en los reactores, -- operación que se debe evitar, para no deactivar la vida del catalizador; arriba de 1 Atm. las temperaturas de rocío están -- muy por debajo de la temperatura de operación del sistema en - equilibrio.

Ultimamente (1974), la Amoco Production Co., de Tulsa, Oklahoma patentó el proceso CBA (Cold Bed Adsorption) el cual está - basado en el proceso Claus y cuyos objetivos son obtener altas recuperaciones de azufre y eliminar problemas de contaminación ambiental. Este proceso está basado en operar los reactores a - temperaturas abajo del punto de rocío, con lo cual se obtienen altas conversiones. El inconveniente de este proceso es el envenamiento del catalizador, por la presencia del azufre líquido, pero este problema se elimina regenerando el catalizador - con gases calientes del mismo proceso (32).



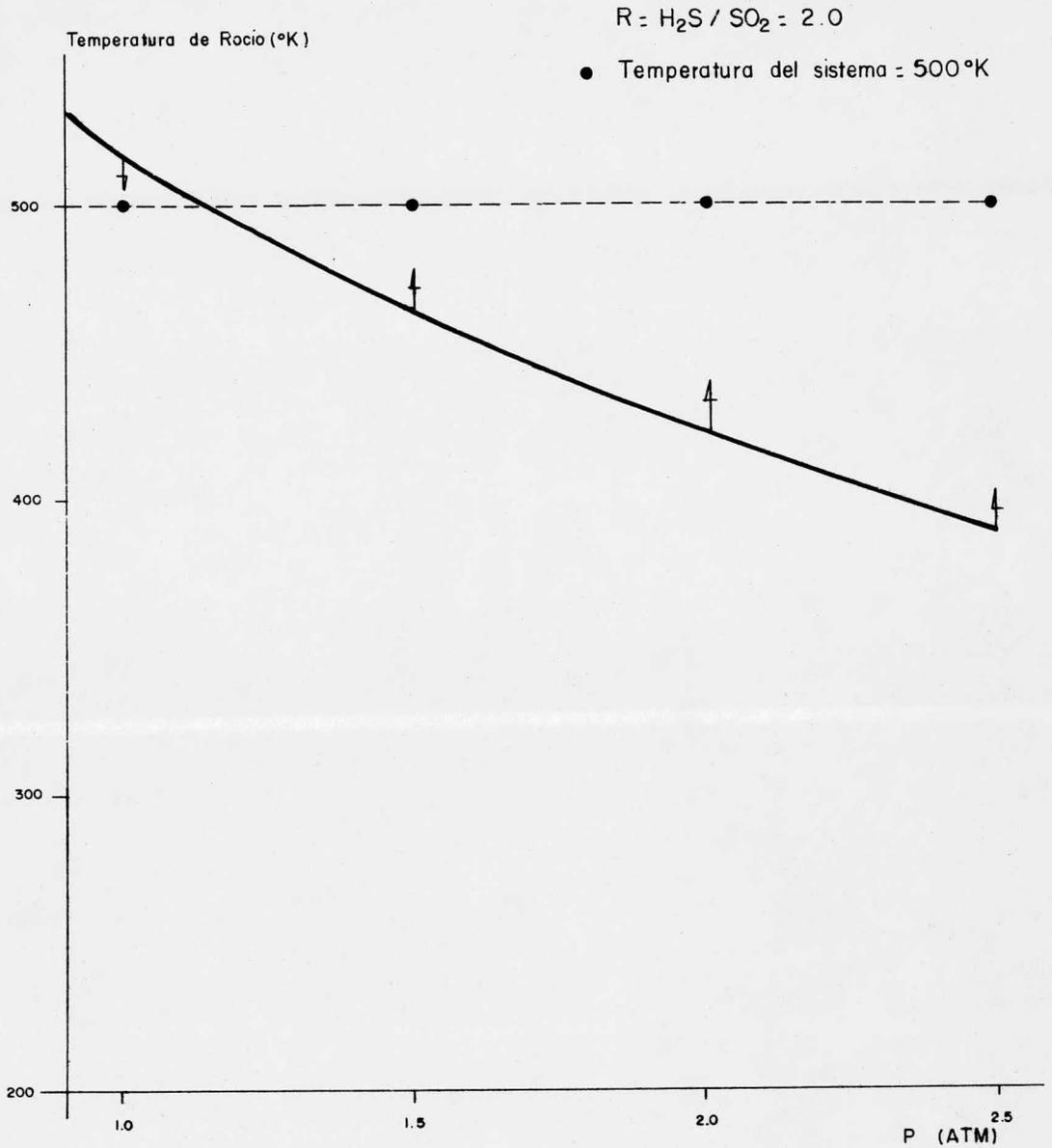


Fig.15.- EFECTO DE LA PRESION SOBRE LA TEMPERATURA DE ROCIO.

5.1d. Definición del sistema de reacción para efecto de estudio.

Se harán las siguientes consideraciones para establecer las bases que servirán para analizar el comportamiento de los reactores. La primera de ellas, es que no existe la presencia de oxígeno en la corriente que se alimenta al reactor, ya que se puede suponer que todo el oxígeno ha reaccionado con -- los hidrocarburos presentes en la alimentación al horno caldera de la planta, oxidándolos a  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$ .

Para efecto de estudio se tomará la siguiente composición de alimentación a los reactores (6) :

Compuesto	Flujo (lb-mol/h)
$\text{H}_2\text{S}$	284.4
$\text{SO}_2$	142.2 <sup>1</sup>
$\text{H}_2\text{O}$	292.62
$\text{CO}_2$	1433.14
$\text{COS}$	0.00
$\text{CS}_2$	0.00
$\text{S}_2$	0.00
$\text{S}_6$	0.00
$\text{S}_8$	0.00
$\text{N}_2$	946.74

Nota 1. La cantidad  $\text{SO}_2$  va a ser variable, ya que estará en -- función de la relación  $\text{H}_2\text{S}/\text{SO}_2$  utilizada.

En este estudio se hace uso del factor de escalamiento en los flujos (Flujo/1000), para no tener un amplio rango en la convergencia, además esto es válido, ya que la distribución en el equilibrio no depende del número de moles, sino de las condiciones del sistema.

A continuación se muestran las alimentaciones utilizadas en este estudio de comportamiento de los reactores a diferentes relaciones  $H_2S/SO_2$  utilizadas.

dl. Alimentación al reactor utilizando una relación  $H_2S/SO_2=1.5$

Tomando como base .2844 moles de  $H_2S$

$R = H_2S/SO_2 = 1.5$        $H_2S/1.5 = .1896$  moles de  $SO_2$

Compuesto	Flujo	H	C	S	O	N
$H_2S$	0.2844	2	0	1	0	0
$CO_2$	1.43314	0	1	0	2	0
$SO_2$	0.1896	0	0	1	2	0
$H_2O$	0.29262	2	0	0	1	0
$COS$	0.00	0	1	1	1	0
$CS_2$	0.00	0	1	2	0	0
$S_2$	0.00	0	0	2	0	0
$S_6$	0.00	0	0	6	0	0
$S_8$	0.00	0	0	8	0	0
$N_2$	0.94674	0	0	0	0	2

Cálculo de las  $G_{js}$  para el programa de computadora.

$$G_H = (.28444)(2) + (.29262)(2) = 1.15404$$

$$G_C = (1.43314)(1) = 1.43314$$

$$G_S = (.2844)(1) + (18960)(1) = 0.4740$$

$$G_O = (1.43314)(2) + (.1896)(2) + (.29262)(1) = 3.5381$$

$$G_N = (.94674)(2) = 1.89348$$

d2. Alimentación al reactor utilizando una  $R = 2.0$

$$H_2S/2.0 = .1422 \text{ moles de } SO_2$$

Compuesto	Flujo	H	C	S	O	N
$H_2S$	0.2844	2	0	1	0	0
$CO_2$	1.43314	0	1	0	2	0
$SO_2$	0.1422	0	0	1	2	0
$H_2O$	0.29262	2	0	0	1	0
$COS$	0.00	0	1	1	1	0
$CS_2$	0.00	0	1	2	0	0
$S_2$	0.00	0	0	2	0	0
$S_6$	0.00	0	0	6	0	0
$S_8$	0.00	0	0	8	0	0
$N_2$	0.94674	0	0	0	0	2

Cálculo de las  $G_{js}$  para el programa de computadora.

$$G_H = (.2844)(2) + (.29262)(2) = 1.1504$$

$$G_C = (1.43314)(1) = 1.43314$$

$$G_S = (.2844)(1) + (.1422)(1) = 0.4266$$

$$G_O = (1.43314)(2) + (.1422)(2) + (.29262)(1) = 3.4433$$

$$G_N = (.94674)(2) = 1.89348$$

d3. Alimentación al reactor utilizando una  $R = 2.5$

$$H_2S/2.5 = .11376 \text{ moles de } SO_2$$

Compuesto	Flujo	H	C	S	O	N
$H_2S$	0.2844	2	0	1	0	0
$CO_2$	1.43314	0	1	0	2	0
$SO_2$	0.11376	0	0	1	2	0
$H_2O$	0.29262	2	0	0	1	0
$COS$	0.00	0	1	1	1	0
$CS_2$	0.00	0	1	2	0	0
$S_2$	0.00	0	0	2	0	0
$S_6$	0.00	0	0	6	0	0
$S_8$	0.00	0	0	8	0	0
$N_2$	0.94674	0	0	0	0	2

Cálculo de las  $G_{js}$  para el programa de computadora.

$$G_H = (.2844)(2) + (.29262)(2) = 1.15404$$

$$G_C = (1.43314)(1) = 1.43314$$

$$G_S = (.2844)(1) + (.11376)(1) = .39816$$

$$G_O = (1.43314)(2) + (.11376)(2) + (.29262)(1) = 3.38642$$

$$G_N = (.94674)(2) = 1.89348$$

Cabe aclarar que los flujos que en las alimentaciones aparecen como cero, tienen realmente un valor de protección de  $1 \times 10^{-7}$ , ya que en la ejecución del programa principal (línea 62) existe la operación  $\ln(Y(i)/Y_t)$ .

#### 5.1e. Análisis de la conversión en los reactores.

La conversión en los reactores estará en función de las moles iniciales y finales de  $H_2S$  y  $SO_2$ , La conversión se puede expresar de la siguiente forma:

$$\% \text{ Conv} = \frac{N_{H_2S_o} + N_{SO_2o} - N_{H_2S_f} - N_{SO_2f}}{N_{H_2S_o} + N_{SO_2o}} \times 100$$

Donde:

$N_{H_2S_o}$  = moles iniciales de  $H_2S$  en la corriente que se alimenta al reactor.

$N_{SO_2o}$  = moles iniciales de  $SO_2$  en la corriente que se alimenta al reactor.

$N_{H_2S_f}$  = moles finales presentes en el equilibrio.

$N_{SO_2f}$  = moles finales presentes en el equilibrio.

La conversión máxima se obtuvo a  $500^{\circ}\text{K}$  ( $440.6^{\circ}\text{F}$ ) para todas las relaciones  $\text{H}_2\text{S}/\text{SO}_2$  utilizadas y la mínima se presentaron en el rango de  $900$  y  $1100^{\circ}\text{F}$ . La conversión aumenta al incrementarse la presión, pero disminuye cuando la temperatura aumenta. A continuación se presentan unas tablas de resultados de conversiones con respecto a diferentes relaciones  $\text{H}_2\text{S}/\text{SO}_2$  y presiones -- utilizadas.

TABLA E 1. CONVERSIONES A 1 Atm. DE PRESION

T(°K)	R = 1.5	R = 2.0	R = 2.5
500	87.56	93.70	85.21
600	75.38	77.30	74.21
700	53.23	52.65	50.46
800	44.84	44.71	43.51
900	51.44	51.88	50.75
1000	57.08	57.62	56.21
1100	61.47	62.63	60.65
1200	64.89	66.45	65.47

TABLA E 2. CONVERSIONES A 1.5 Atm. DE PRESION

$T(^{\circ}\text{K})$	R = 1.5	R = 2.0	R = 2.5
500	87.83	94.20	85.32
600	76.71	78.90	75.65
700	55.34	54.89	52.64
800	43.75	43.46	42.19
900	49.62	49.92	48.87
1000	55.31	55.75	54.38
1100	59.86	60.95	59.96
1200	63.37	64.82	63.90

TABLA E 3. CONVERSIONES A 2.0 Atm. DE PRESION

T(°K)	R = 1.5	R = 2.0	R = 2.5
500	88.01	94.52	85.38
600	77.60	79.97	76.59
700	56.87	56.53	54.25
800	43.30	42.88	41.52
900	48.33	48.57	47.53
1000	54.04	54.40	53.05
1100	58.69	59.70	58.75
1200	62.27	63.64	62.76

TABLA E 4. CONVERSIONES A 2.5 Atm. DE PRESION

T(°K)	R = 1.5	R = 2.0	R = 2.5
500	88.14	94.77	85.43
600	78.26	80.78	77.29
700	58.06	57.82	55.52
800	43.16	42.64	41.19
900	47.34	47.52	46.50
1000	53.04	53.35	52.02
1100	57.76	58.72	57.79
1200	61.40	62.71	61.86

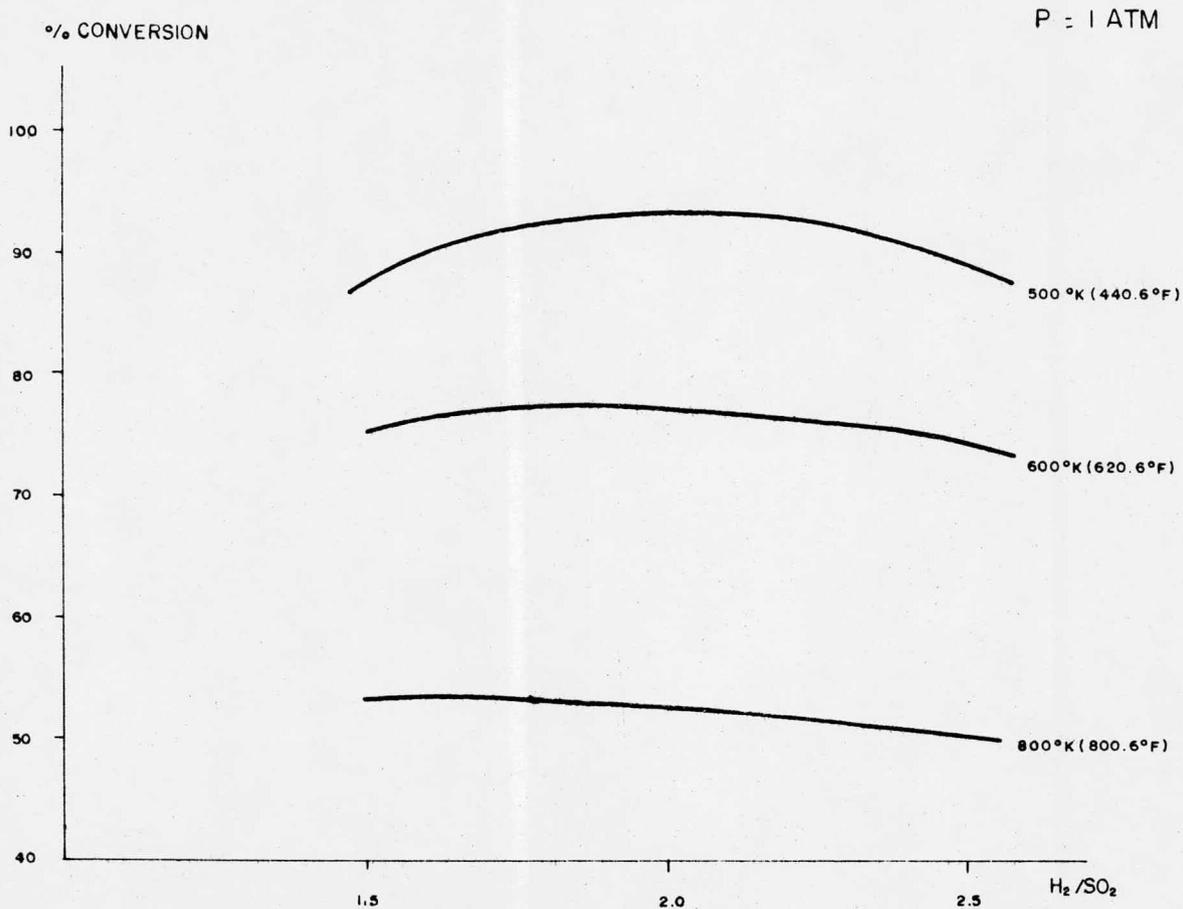


Fig. II.- EFECTO DE LA RELACION  $H_2/SO_2$  EN LA CONVERSION

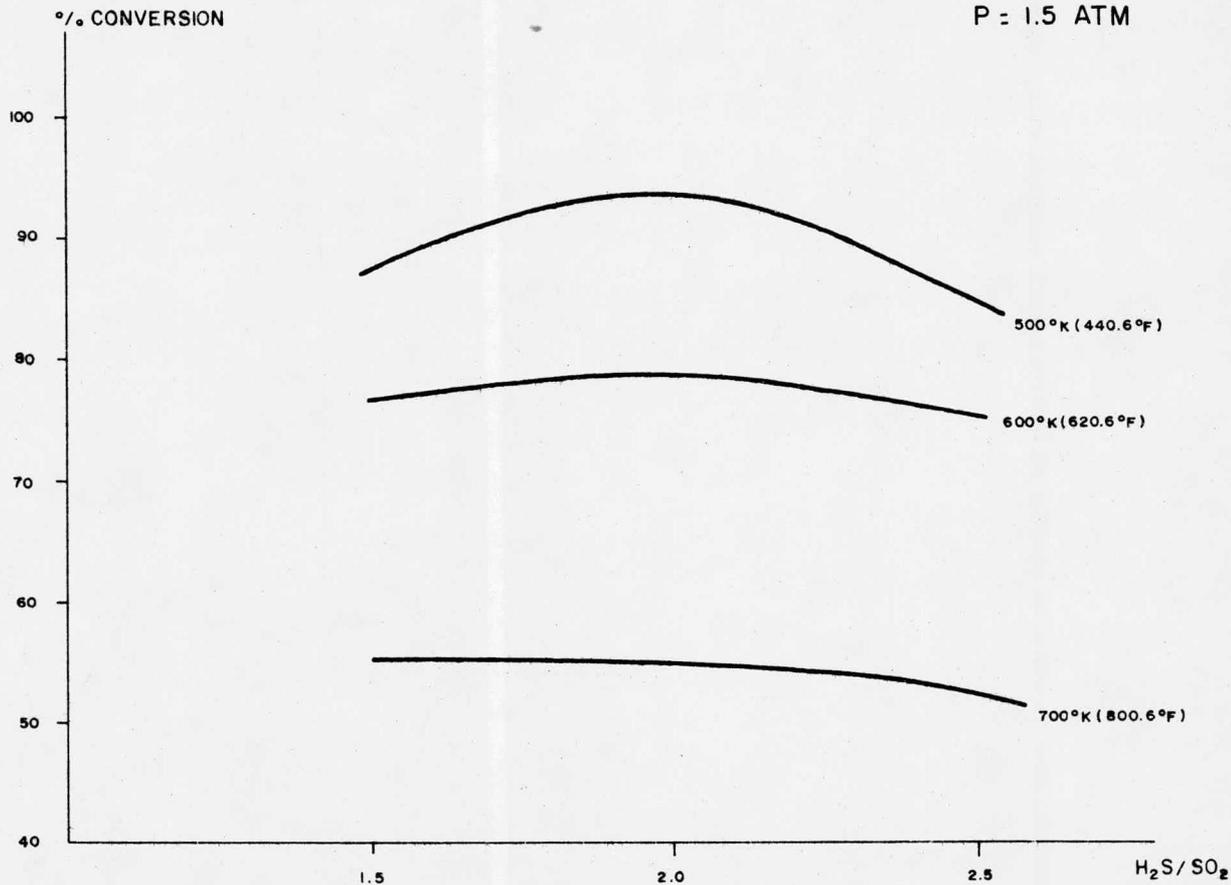


Fig. 12.- EFECTO DE LA RELACION H<sub>2</sub>S/SO<sub>2</sub> EN LA CONVERSION

P = 2.0 ATM

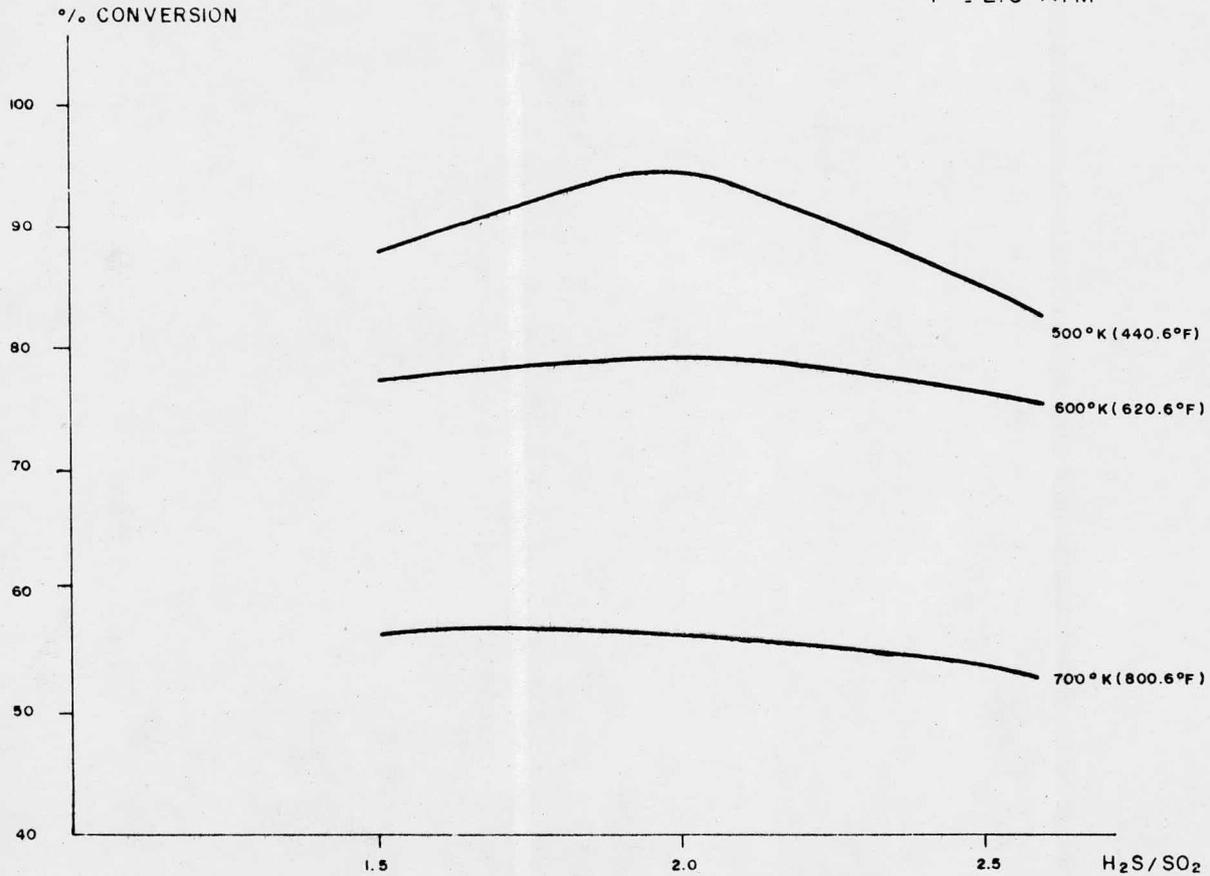


Fig. 13.— EFECTO DE LA RELACION H<sub>2</sub>S/SO<sub>2</sub> EN LA CONVERSION

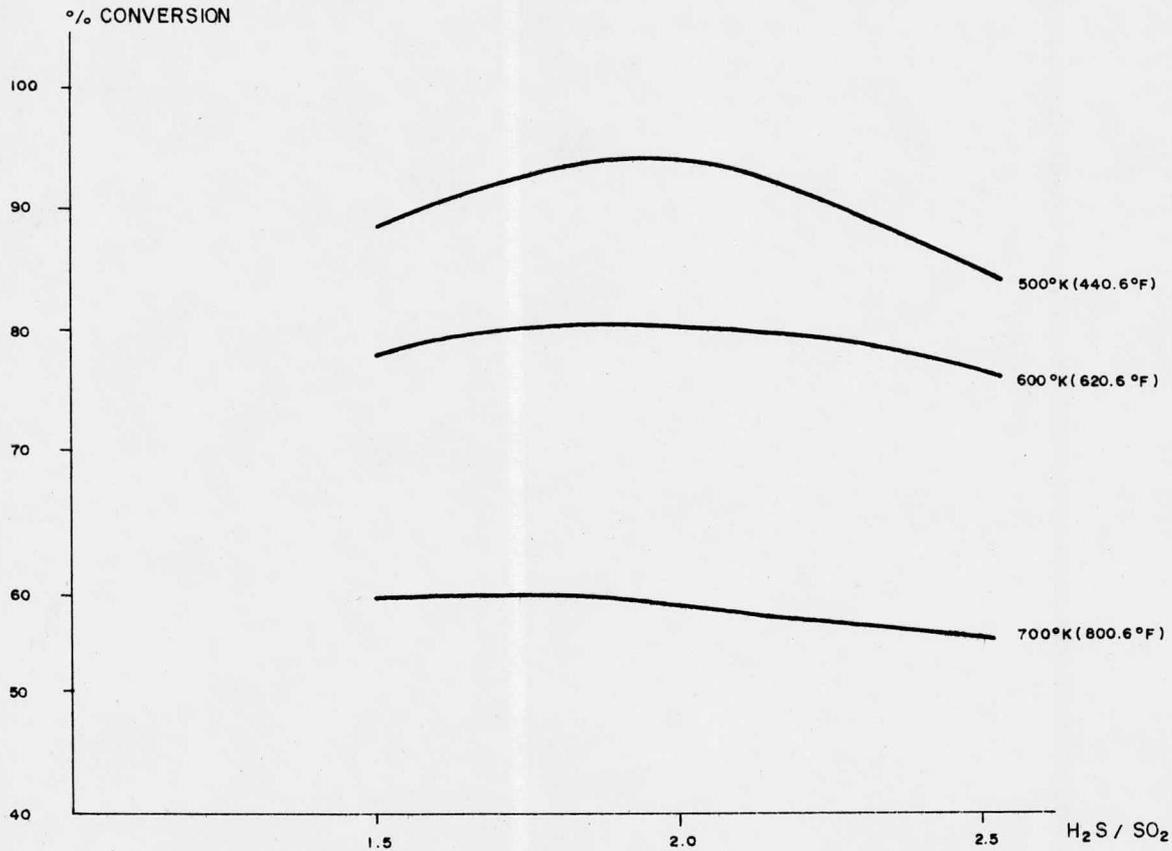


Fig. 14.- EFECTO DE LA RELACION H<sub>2</sub>S/SO<sub>2</sub> EN LA CONVERSION

5.1f. Análisis sobre la coexistencia de las diferentes especies del azufre.

A temperaturas arriba de  $1200^{\circ}\text{K}$  ( $1700.6^{\circ}\text{F}$ ) y abajo de  $2000^{\circ}\text{K}$  ( $1340.6^{\circ}\text{F}$ ) la especie estable es el azufre diatómico. Abajo de  $1200^{\circ}\text{K}$  y arriba de  $300^{\circ}\text{K}$  ( $80.6^{\circ}\text{F}$ ) existe un equilibrio entre las diferentes especies  $\text{S}_2$ ,  $\text{S}_6$  y  $\text{S}_8$ , la composición va a depender de la temperatura y presión total del sistema (1). De los resultados del programa de computadora se observa que al aumentar la temperatura, mayor formación de  $\text{S}_2$  existe y menores cantidades de  $\text{S}_6$  y  $\text{S}_8$  se encuentran en equilibrio. A bajas temperaturas coexisten las tres especies del azufre. A continuación se presenta una tabla de resultados sobre la distribución de las diferentes especies de azufre con respecto a la temperatura, utilizando una relación de 2.0 que es la óptima y 1 Atm. de presión.

Tabla F1. Distribución de las diferentes especies del azufre.

<u>Temperatura (<math>^{\circ}\text{K}</math>)</u>	<u><math>\text{S}_2</math></u>	<u><math>\text{S}_6</math></u>	<u><math>\text{S}_8</math></u>
500	0.000044	0.002675	0.047948
600	0.002301	0.010632	0.032642
700	0.003037	0.015055	0.009016
800	0.088458	0.001588	0.000069
900	0.107629	0.000045	0.000000
1000	0.122289	0.000003	0.000000
1100	0.128903	0.000000	0.000000
1200	0.135906	0.000000	0.000000

A continuación se presenta una gráfica que muestra el comportamiento que siguen las diferentes especies de azufre con respecto a la temperatura.

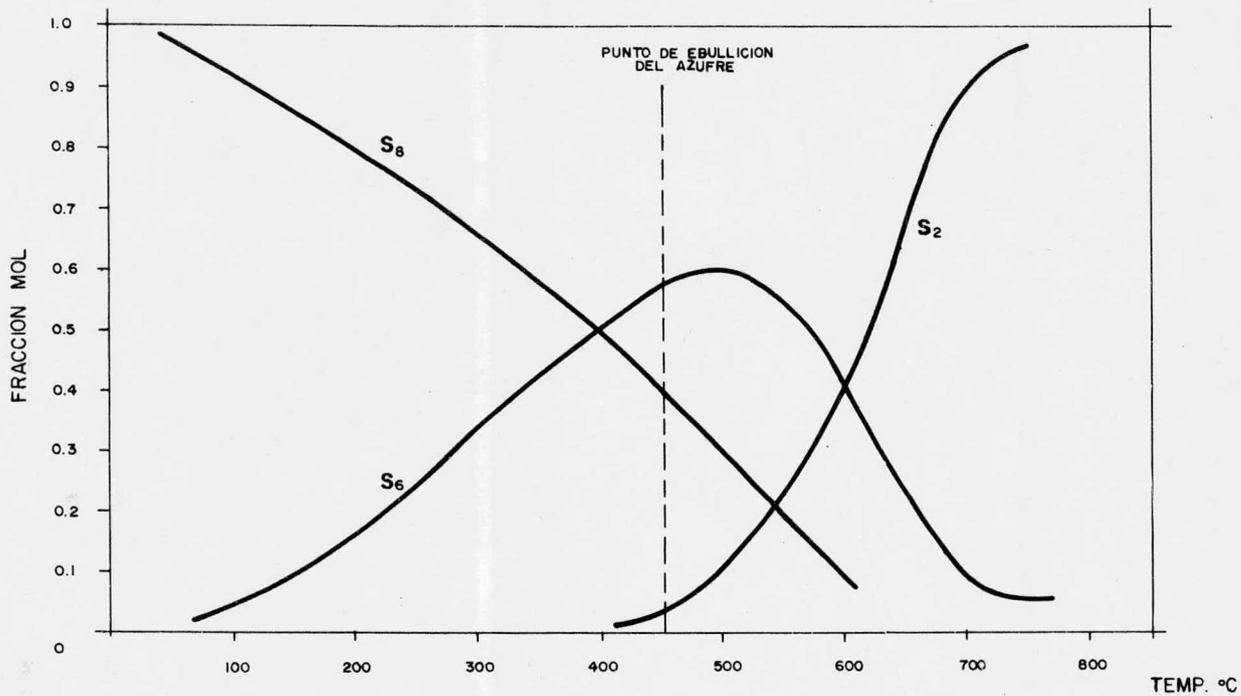


Fig.—10. EQUILIBRIO ENTRE LAS DIFERENTES ESPECIES DE AZUFRE

5.1g. Relación  $H_2S/SO_2$ .

Se encontró que la relación óptima fue de 2.0, entre las que se estudiaron, ya que se obtuvieron las máximas conversiones para cualquier temperatura utilizada, pero no con la presión, ya que entre los  $400^{\circ}F$  y  $900^{\circ}F$ , la conversión aumenta al incrementarse la presión del sistema para todas las relaciones estudiadas, pero este efecto no ocurre entre los  $940^{\circ}F$  y  $1700^{\circ}F$  donde la conversión aumenta, conforme la presión disminuye para todas las relaciones. Además es la única relación que se mantiene constante a lo largo del reactor.

En seguida se presentan 3 gráficas que muestran el efecto de la relación  $H_2S/SO_2$  sobre la conversión a varias temperaturas y -- presiones.

## 5.1h. Correlaciones de energías libres en función de la temperatura usadas en los programas de computadora.

La energía libre de formación de los compuestos puede definirse de la siguiente manera:

$$(F/RT)_i = \frac{1}{R} \left( \frac{F - H_{298K}}{T} \right) + \frac{\Delta H_{298}}{RT}$$

Como se puede observar, la expresión anterior muestra que la -- energía libre es función de la temperatura y de su entalpia de formación a  $298^{\circ}K$ .

Con datos de  $(F - H_{298}/T)$  obtenidos de la literatura (4,30) a diferentes temperaturas, se les hizo un tratamiento de mínimos-cuadrados para obtener una correlación lineal con respecto a la temperatura, para esto se utilizó el programa de la Hp-25 que se muestra en el inciso 5.1c. La correlación obtenida fué del siguiente tipo:

$$K_1 = \frac{1}{R} \left( mT + b + \frac{\Delta H}{T} \right)$$

Donde:

M = pendiente de la recta del ajuste lineal para cada compuesto en particular.

T = temperatura ( $^{\circ}\text{K}$ )

b = coordenada al origen de la recta

$H_{f298}$  = entalpia de formación a  $298^{\circ}\text{K}$  (cal/ $^{\circ}\text{K}$ )

R = constante de los gases (1.9872 cal/mol- $^{\circ}\text{K}$ )

A continuación se muestran las correlaciones de energías libres de todos los compuestos utilizados en el estudio de comportamiento de los reactores.

$$\text{H}_2\text{S} \quad K_L = .5032(-0.0066T - 46.970 - \frac{4815}{T})$$

$$\text{SO}_2 \quad K_L = .5032(-0.0081T - 56.576 - \frac{70960}{T})$$

$$\text{CO}_2 \quad K_L = .5032(-0.0078T - 48.463 - \frac{94052}{T})$$

$$\text{H}_2\text{O} \quad K_L = .5032(-0.0062T - 43.066 - \frac{57798}{T})$$

$$\text{COS} \quad K_L = .5032(-0.0086T - 52.477 - \frac{32800}{T})$$

$$\text{CS}_2 \quad K_L = .5032(-0.0092T - 53.704 + \frac{27550}{T})$$

$$\text{S}_2 \quad K_L = .5032(-0.0061T - 52.518 + \frac{30840}{T})$$

$$\text{S}_6 \quad K_L = .5032(-0.0261T - 76.571 + \frac{27780}{T})$$

$$\text{S}_8 \quad K_L = .5032(-0.0238T - 98.086 + \frac{27090}{T})$$

$$\text{N}_2 \quad K_L = .5032(-0.0053T - 44.061)$$

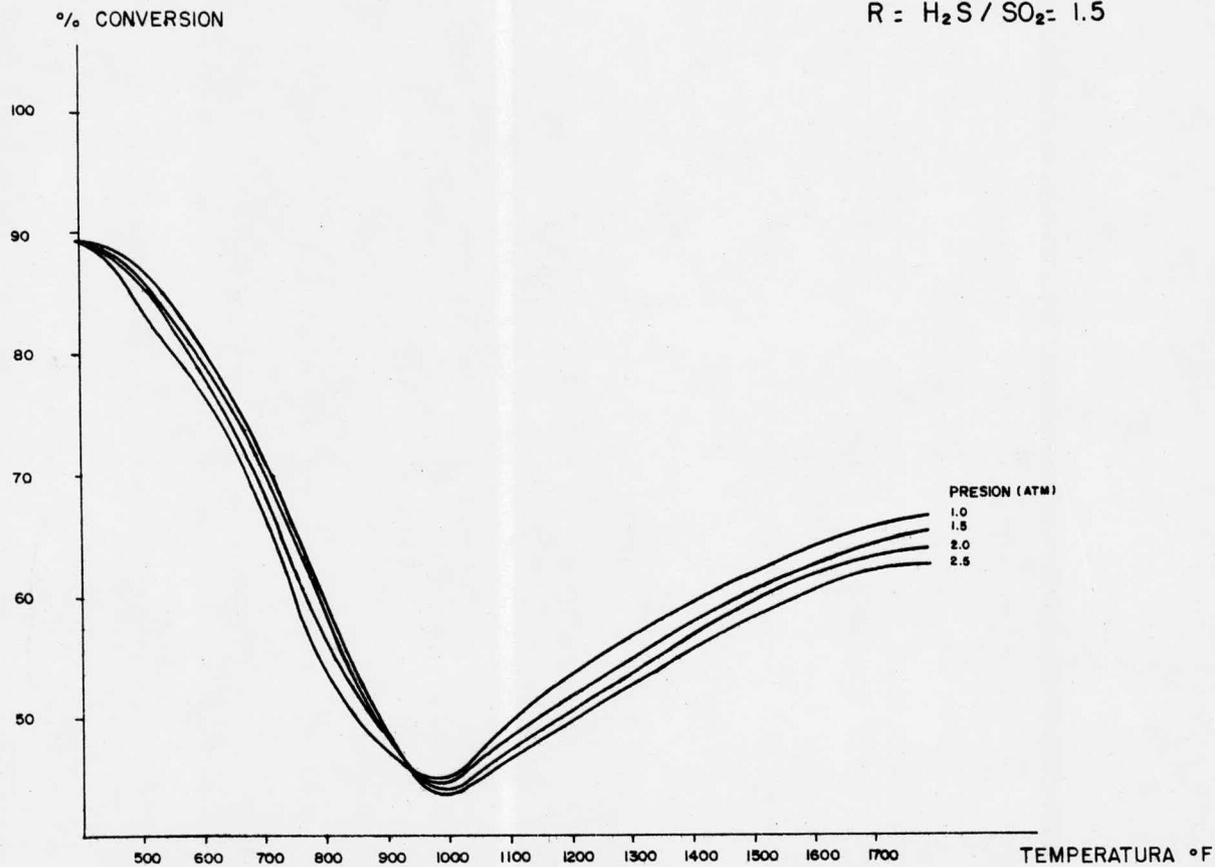


Fig. 7.— REACCION ISOTERMICA

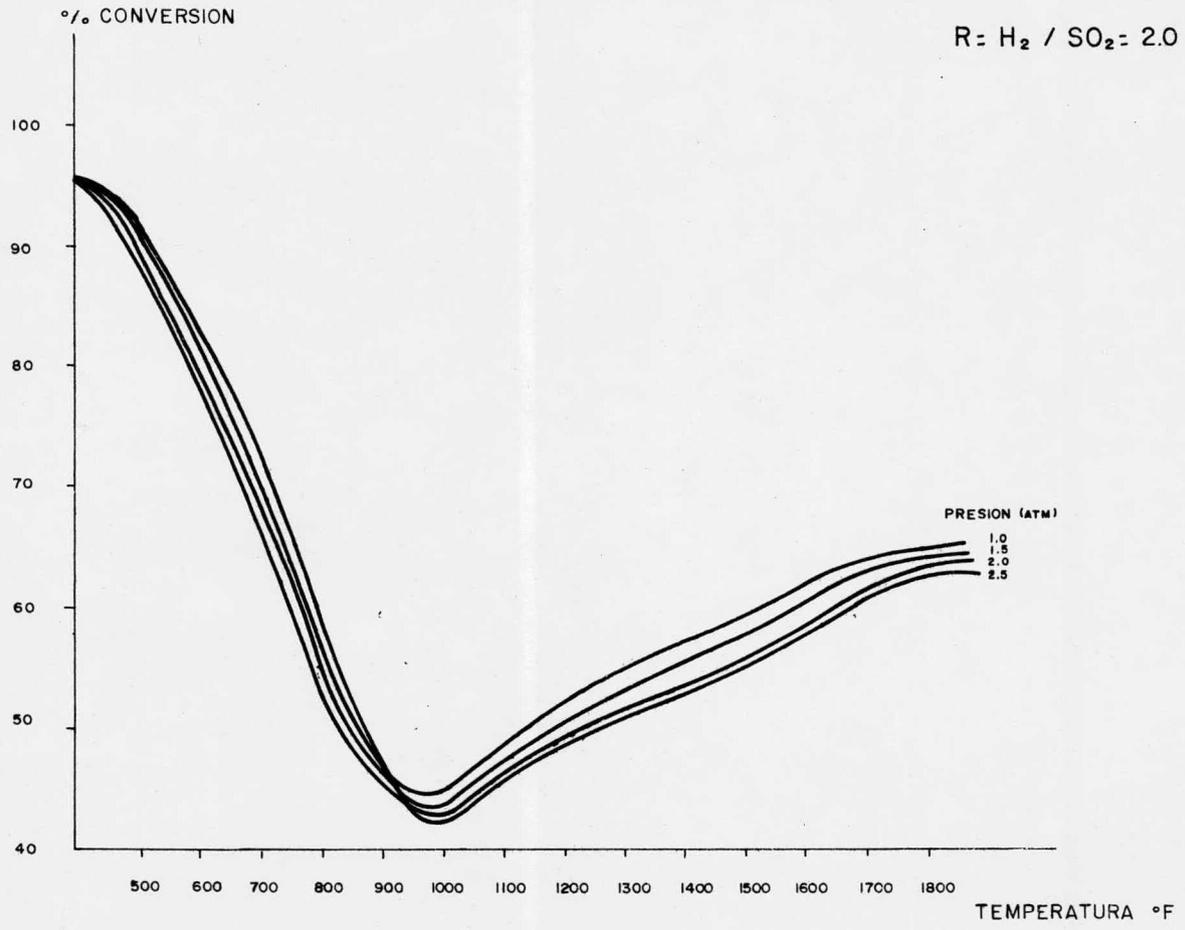
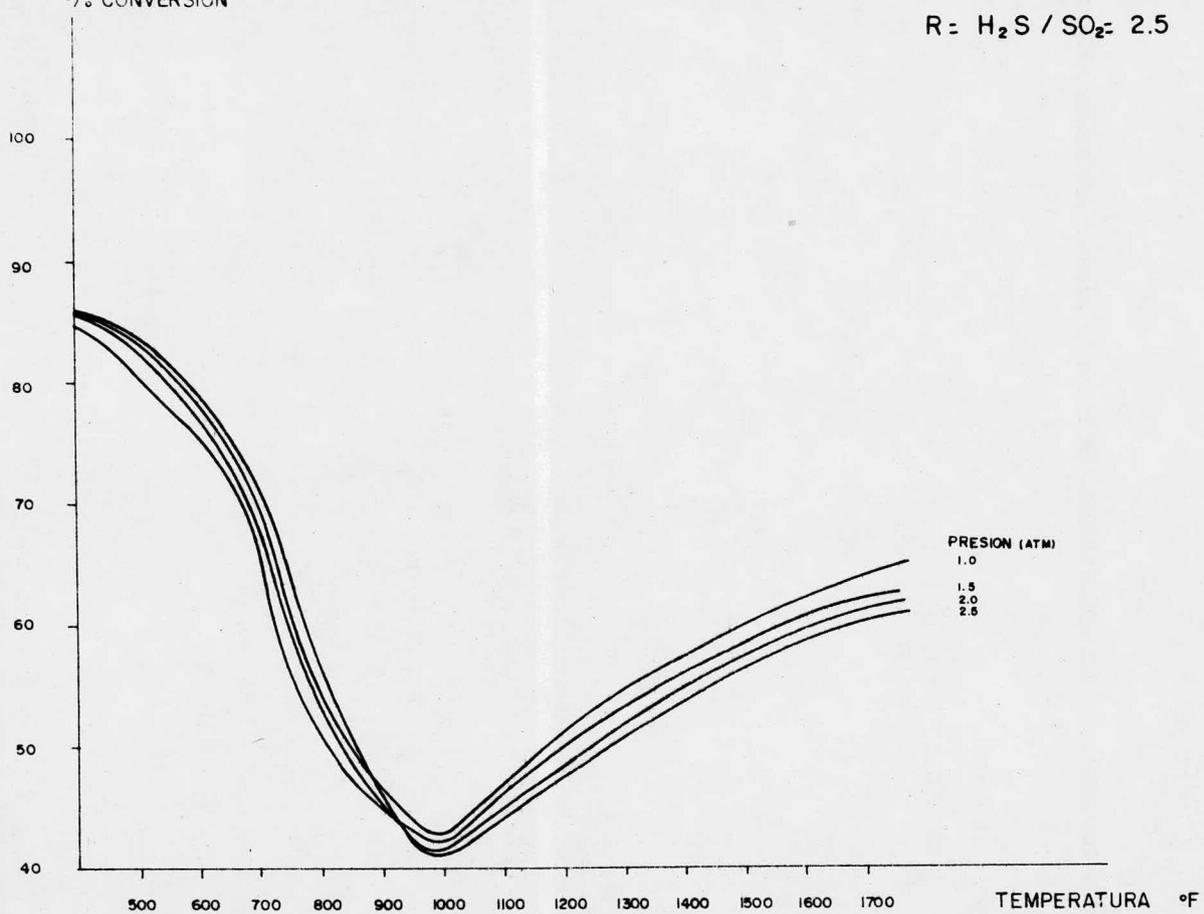


Fig. 8.- REACCION ISOTERMICA

R = H<sub>2</sub>S / SO<sub>2</sub> = 2.5



103

Fig. 9.— REACCION ISOTERMICA

TABLA H 1. ENERGIAS LIBRES UTILIZADAS EN EL ESTUDIO DE COMPORTAMIENTO

	500°K	600°K	700°K	800°K	900°K	1000°K	1100°K	1200°K
H <sub>2</sub> S	-30.1417	-29.6662	-29.4214	-29.3208	-29.3164	-29.3793	-29.4912	-29.6397
CO <sub>2</sub>	-121.0030	-105.6198	-94.7440	-86.6853	-80.5046	-75.6385	-71.7286	-68.5357
SO <sub>2</sub>	-101.9211	-90.4264	-82.3323	-76.3636	-71.8119	-68.2520	-65.4135	-63.1160
H <sub>2</sub> O	-81.4112	-72.0311	-65.4208	-60.5418	-56.8168	-63.8998	-51.5703	-49.6814
COS	-61.5801	-56.5112	-53.0142	-50.4996	-48.6400	-47.2389	-46.1712	-45.3536
CS <sub>2</sub>	-1.6173	-6.7023	-10.4670	-13.4065	-15.7959	-17.8002	-19.5244	-21.0386
S <sub>2</sub>	-3.0756	2.4043	-6.4062	-9.4843	-11.9466	-13.9779	-15.6956	-17.1782
S <sub>6</sub>	-17.1395	-23.1125	-27.7541	-31.5637	-34.8186	-37.6852	-40.2693	-42.6417
S <sub>8</sub>	-28.0816	-33.8231	-38.2663	-41.8982	-44.9891	-47.7013	-50.1382	-52.3685
N <sub>2</sub>	-23.5050	-23.7717	-24.0384	-24.3051	-24.5718	-24.8385	-25.1052	-25.3718

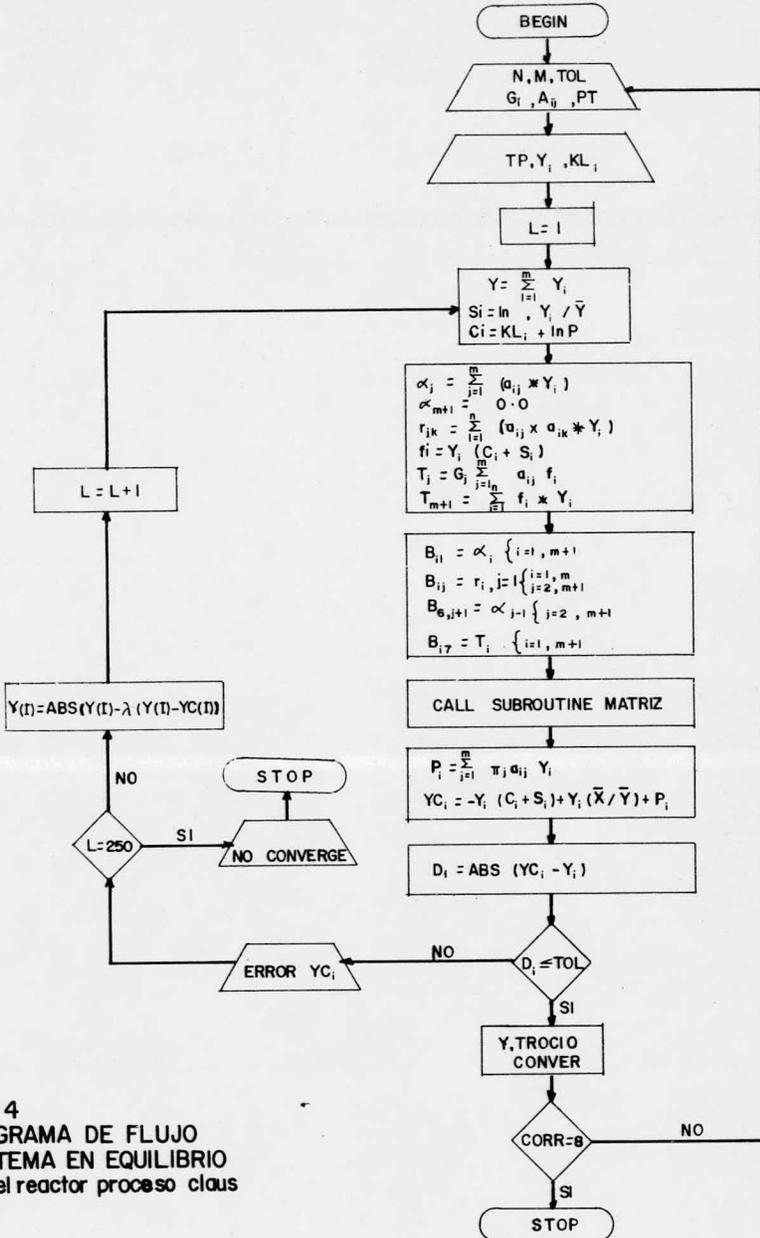


Fig. 4  
 DIAGRAMA DE FLUJO  
 SISTEMA EN EQUILIBRIO  
 en el reactor proceso claus

```

EU*MERODATOS(1),UCKPCG002
1  WRU(1),UCKR02,EB1045,L,EB,2,200 ST3004 OSCAR CRUZ KATO EXT.2410
2  WPR(5),MERODATOS,UCKPCG002
3  WFOR(15) TP,*,LE,RRRER
4  DIMENSION Y(10),G(5),C(15),A(15),S(15),ALFA(6),R(5),F(15),T(16)
5  *,I(6),7),P(15),YC(15),D(15),P(15),KL(15),NOMB(10),ELEM(5),PCM(10),
6  *,YALM(10)
7  REAL LAMBDA,KL
8  INTEGER CORR
9  NAMELIST/CONS/R,M,PT,COL,G,A/VARI/TP,Y,KL
10 DATA/HORU/'H2S',*C02,'*S02','*H2O','*CO2','*CS2','*S2','*S6','*S8','*N2'/
11 DATA/ELEM/'H','C','S','O','N'/
12 READ(5,CONS)
13 CORR=8
14 ICON=0
15 31 READ(5,VARI)
16 DO 30 I=1,N
17 50 YALM(I)=FY(I)
18 PHINT 20
19 20 FORMAT(30X,'CALCULO DE LAS CONCENTRACIONES AL EQUILIBRIO EN LOS RE
20 *ACTORES DEL PROCESO CLAUDIUS//45X'//POR EL METODO DE MINIMIZACION DE
21 *ENTROPIA L/MOL//4(7),20X,'DATOS DEL SISTEMA: '//)
22 WRITE(6,2)N,M,PT,TP
23 2 FORMAT(20X,'NUMERO DE COMPONENTES (N) =',I2//20X,'NUMERO DE LOS C
24 *OMPONENTES: ACIDO SULFIDRICO, DIOXIDO DE CARBONO, DIOXIDO DE AZUF
25 *RE, AGUA, SULFURO DE//47X,'CARBONILO, DISULFURO DE CARBONO, AZUFRE
26 *DIATOMICO, AZUFRE HEXAATOMICO, AZU//47X,'FENIL OCTAATOMICO Y NITRO
27 *GENO'//20X,'NUMERO DE LOS ELEMENTOS QUE CONSTITUYEN LOS COMPONENTE
28 *S (N)=',I1//20X,'NUMERO DE LOS ELEMENTOS: HIDROGENO, NITROGENO, C
29 *ARBONO, OXIGENO Y AZUFRE'//20X,'PRESION TOTAL DEL SISTEMA (ATMOSFE
30 *RAS) =',F5,2//20X,'TEMPERATURA DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO (GRAD
31 *OS KELVIN) =',F9,4//20X,'RELACION DE H2S/S02 =2.0',6(7))
32 PHINT 30
33 36 FORMAT(20X,'COMPOSICION DE LA ALIMENTACION AL REACTOR (Y(I))//20X
34 *,*COMPUESTO FLUJO MOLAR')
35 DO 37 I=1,N
36 37 WRITE(6,30)NOMB(I),Y(I)
37 38 FORMAT(725X,A3,9X,F10.6)
38 WRITE(6,30)I,LEM
39 39 FORMAT(181//20X,'TABLA DE ELEMENTOS POR COMPUESTO -(A(I,J))'//25X,5
40 *(IX,A1))
41 DO 40 I=1,N
42 40 WRITE(6,41)NOMB(I),(A(I,J),J=1,M)
43 41 FORMAT(725X,A3,5F7.1)
44 PHINT 43
45 43 FORMAT(//20X,'NUMERO TOTAL DE PESOS ATOMICOS DEL J-ESIMO ATOMO (G
46 *J)')
47 WRITE(6,40)I,LEM
48 48 FORMAT(9X,5(14X,A1))
49 WRITE(6,49)G
50 49 FORMAT(12X,5F15.5/1H)
51 WRITE(6,20)NOMB
52 28 FORMAT(52X,'TABLA DE CALCULOS ITERATIVOS'//53X,'FLUJOS MOLARES (LB
53 *-MOL/HR)//8X,'ITERACION',5X,A3,9(7X,A3),5X,'TOTAL')
54 ICON=ICOR+1
55 L=1
56 25 YI=0.0
57 DO 3 I=1,N
58 3 YI=YI+Y(I)
59 DO 1 I=1,N
60 1 C(I)=SK(I)+A(09(PT))

```

1965-01-01 10:00 AM 100

```

61      DO 4 I=1,N
62      4 S(I)=ALOG(Y(I)/YT)
63      DO 5 J=1,M
64      ALFA(I,J)=0.0
65      DO 5 I=1,N
66      5 ALFA(I,J)=ALFA(I,J)+A(I,J)*Y(I)
67      ALFA(I,J)=0.0
68      DO 6 J=1,M
69      DO 6 K=1,M
70      R(J,K)=0.0
71      DO 6 I=1,N
72      6 R(J,K)=R(J,K)+A(I,J)*A(I,K)*Y(I)
73      DO 7 I=1,N
74      7 F(I)=Y(I)+U(I)+S(I)
75      DO 8 J=1,M
76      T(J)=0.0
77      SAF=0.0
78      DO 9 I=1,N
79      9 SAF=SAF+A(I,J)*F(I)
80      8 T(J)=G(J)+SAF
81      T(M+1)=0.0
82      DO 10 I=1,N
83      10 T(M+1)=T(M+1)+F(I)
84      MM=MM+1
85      DO 11 I=1,MM
86      11 B(I,1)=ALFA(I)
87      DO 12 J=1,M
88      DO 12 I=1,M
89      12 B(I,J,1)=R(I,J)
90      DO 13 J=1,M
91      13 B(I,G(J),1)=ALFA(I)
92      DO 14 I=1,MM
93      14 B(I,7)=T(I)
94      CALL MATH12(U,XYT,P1)
95      DO 15 I=1,N
96      P(I)=0.0
97      DO 15 J=1,M
98      15 P(I)=P(I)+P1(J)+A(I,J)*Y(I)
99      DO 16 I=1,N
100     YC(I)=-Y(I)*(C(I)+S(I))+Y(I)*XYT+P(I)
101     16 U(I)=AUS(YC(I))-Y(I)
102     MC=2
103     I=1
104     J=2
105     17 IF (U(I).GE.U(J))GO TO 18
106     I=J
107     IF (MC.EQ.10)GO TO 32
108     MC=MC+1
109     J=J+1
110     GO TO 17
111     18 IF (MC.EQ.10)GO TO 32
112     MC=MC+1
113     J=J+1
114     GO TO 17
115     32 IF (U(1).LE.-10)GO TO 19
116     IF (L.EW.25)GO TO 23
117     WRITE (6,35)L,Y,XYT
118     35 FORMAT(/BX,(3,4X,11(2X,F8.6))
119     DO 24 I=1,N
120     LAMDA=19
121     24 Y(I)=AUS(Y(I))-LAMDA*(Y(I)-YC(I))

```

```

122 L=1
123 GO TO 25
124 25 PRINT 26
125 26 FORMAT(10X,'NO CONVERGE, TERMINARON LAS ITERACIONES L',10X,'SE DE
126 *TIENE EL PROGRAMA*)
127 IF (ICOR.EQ.CORR)GO TO 27
128 GO TO 31
129 DO 29 I=1,N
130 29 PCM(I)=Y(I)/YT*100
131 PRINT 34
132 34 FORMAT(1H)46X,'COMPOSICION DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO'//41X,'CO
133 *MULSTO',3X,'FLUJO MOLAR',8X,'PORCIENTO MOL')
134 DO 46 I=1,N
135 46 WRITE(6,47)HOM(I),Y(I),PCM(I)
136 47 FORMAT(44X7A3,10X,F10,0,11X7F9,4)
137 CONVER=(1-(Y(1)+Y(3)))/(YALTA(1)+YALTA(3))*100
138 THOCIO=((1-1/5/5.01/01)*ALOG((Y(7)+Y(8)+Y(9))/YT)-14.74088)-460.)-
139 *32.7-.18)+2/5.15
140 WRITE(6,51)CONVLR,THOCIO
141 51 FORMAT(//45A,'PORCIENTO DE CONVERSION = ',F5.2,//45X,'TEMPERATURA
142 *DE RUCIO = ',1X,F7.3,1X,'GRADOS KELVIN'//1H)
143 IF (ICOR.EQ.CORR)GO TO 27
144 GO TO 31
145 27 STOP
146 END
147 *FOR IS TIPS,SLIIVM
148 SUBROUTINE MATH12(A,X,I,Z)
149 DIMENSION A(6,7),V(10),Z(10)
150 N=6
151 M=7
152 L=1
153 K=1
154 I=1
155 5 JEM
156 500 A(I,J)=A(I,J)/A(I,K)
157 IF (J.EQ.K)GO TO 2
158 J=J+1
159 GO TO 500
160 2 IF (I.EQ.N.AND J.EQ.M)GO TO 20
161 6 I=I+1
162 JEM
163 500 A(I,J)=A(I,K)*A(I=L,J)+A(I,J)
164 IF (J.EQ.K)GO TO 3
165 J=J+1
166 GO TO 500
167 3 IF (I.EQ.N)GO TO 4
168 K=K+1
169 I=K
170 L=1
171 GO TO 5
172 4 L=L+1
173 GO TO 6
174 20 K=1
175 L=N
176 V(N)=A(N,M)
177 11 SUM=0.0
178 L=L-1
179 10 PROU=0.0
180 PROU=A(L,L*K)*V(L+K)
181 SUM=SUM+PROU
182 I=L+K

```

```

185      IF (1.0,N)GO TO 9
186      K=K+1
187      GO TO 10
188      9 V(L)=A(L,M)-SUM
189      IF (L.0.1)GO TO 12
190      K=1
191      GO TO 11
192      12 XY=V(1)
193      N1=N-1
194      DO 70 I=1,N1
195      70 Z(I)=V(I+1)
196      RETURN
197      END
198      QMA,  .TIP 3, XLENERKLE
199      IN TIP 3, EMERFREE
200      IN TIP 3, SLHIVM
201      END
202      QXOT  TIP 3, XENERKLE
203      $CORS  IP=1.000,PI=1.000,TOLE=0.00001,C=1.15404,1.45314,.4266,5.44350,
204      1.6934,0.7A=2.72*0,+2.12*0,+1.2*0,+2*1.1*0,+1.9*0,+1.0*0,+1.0*0,+1.7*2*0.76,
205      0,+7*0,+2*2,+2*1*0,+2.2*0,+5*0
206      $VARI  IP=0.00,0.0,Y=2.044,1.453140,14220,.292620,.000001,.000001,
207      .000001,.000001,.000001,0.946740,
208      KL=-30.1417,-171.065,-101.4211,-81.4112,-61.5801,-1.6173,3.0756,
209      -17.1395,-28.0010,-23.565,5*END
210      $VARI  IP=0.00,0.0,Y=2.044,1.453140,14220,.292620,.000001,.000001,
211      .000001,.000001,.000001,0.946740,
212      KL=-29.6682,-105.6198,-90.4266,-72.0311,-56.5112,-6.7023,-2.4043,
213      -23.1125,-33.0234,-23.7717,5*END
214      $VARI  IP=700.00,Y=7.044,1.453140,14220,.292620,.000001,.000001,
215      .000001,.000001,.000001,0.946740,
216      KL=-29.4214,-74.744,-82.3323,-65.4208,-53.0142,-10.4670,-6.4062,
217      -27.7511,-38.2663,-24.0304,5*END
218      $VARI  IP=0.00,0.0,Y=2.044,1.453140,14220,.292620,.000001,.000001,
219      .000001,.000001,.000001,0.946740,
220      KL=-29.3208,-86.0853,-76.3436,-60.5410,-50.4996,-13.4065,-9.4843,
221      -31.5637,-41.4492,-24.3051,5*END
222      $VARI  IP=200.00,Y=2.044,1.453140,14220,.292620,.000001,.000001,
223      .000001,.000001,.000001,0.946740,
224      KL=-29.3104,-80.3040,-71.8119,-56.0168,-48.6400,-15.7959,-11.9466,
225      -36.0100,-44.9491,-24.5710,5*END
226      $VARI  IP=1000.00,Y=2.044,1.453140,14220,.292620,.000001,.000001,
227      .000001,.000001,.000001,0.946740,
228      KL=-29.3737,-75.0505,-68.2520,-53.0998,-41.2389,-14.8002,-13.9779,
229      -37.6852,-47.7013,-24.0365,5*END
230      $VARI  IP=1100.00,Y=2.044,1.453140,14220,.292620,.000001,.000001,
231      .000001,.000001,.000001,0.946740,
232      KL=-29.4712,-71.7200,-65.4150,-51.5703,-46.1712,-19.5244,-15.6456,
233      -40.2693,-50.1382,-23.1052,5*END
234      $VARI  IP=1200.00,Y=2.044,1.453140,14220,.292620,.000001,.000001,
235      .000001,.000001,.000001,0.946740,
236      KL=-29.4637,-64.5357,-63.1100,-49.0814,-45.3536,-21.0386,-17.1782,
237      -42.6417,-52.3683,-25.3718,5*END
238      $FIN

```

CALCULO DE CONCENTRACIONES AL EQUILIBRIO EN LOS ETAPAS DEL PROCESO CLAS  
 POR EL METODO DE MINIMIZACION DE ENERGIA LIBRE

DATOS DEL SISTEMA:

NUMERO DE COMPONENTES (N) = 10  
 NUMERO DE LOS COMPONENTES: ACIDO SULFIDRICO, BIXIDO DE CARBONO, BIXIDO DE AZUFRE, AGUA, SULFURO DE CARBONILO, DISULFURO DE CARBONO, AZUFRE DIATOMICO, AZUFRE HEXAATOMICO, AZUFRE OCTAATOMICO Y NITROGENO  
 NUMERO DE LOS ELEMENTOS QUE CONSTITUYEN LOS COMPONENTES (M) = 5  
 NUMERO DE LOS ELEMENTOS: HIDROGENO, NITROGENO, CARBONO, OXIGENO Y AZUFRE  
 PRESION TOTAL DEL SISTEMA (ATMOSFERAS) = 1.00  
 TEMPERATURA DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO (GRADOS KELVIN) = 500.0000  
 RELACION DE H2S/SO2 = 2.0

COMPOSICION DE LA ALIMENTACION AL REACTOR (Y(1))

COMPUESTO	FLUJO MOLAR
H2S	.284400
CO2	1.433140
SO2	.142200
H2O	.292620
COS	.000000
CS2	.000000
S2	.000000
S6	.000000
S8	.000000
N2	.446740

TAHLA DE ELLMLNTOS POR COMPUESTO (A(I,J))

	H	C	S	O	N
H2S	2.0	.0	1.0	.0	.0
CO2	.0	1.0	.0	2.0	.0
SO2	.0	.0	1.0	2.0	.0
H2O	2.0	.0	.0	1.0	.0
CO5	.0	1.0	1.0	1.0	.0
CS2	.0	1.0	2.0	.0	.0
S2	.0	.0	2.0	.0	.0
S6	.0	.0	6.0	.0	.0
S8	.0	.0	8.0	.0	.0
H2	.0	.0	.0	.0	2.0

NUMERO TOTAL DE PLSUS ATOMICOS DEL J-ESIMO ATOMO (G(J))

H	C	S	O	N
1.15404	1.43314	.42660	3.44330	1.89348

TABLA DE CALCULOS ITERATIVOS

FLUJOS MOLARES (LB-MOL/HR)

ITERACION	12S	102	502	120	105	152	52	56	58	12	TOTAL
1	.204400	1.433140	.142200	.292620	.000000	.000000	.000000	.000000	.000000	.946740	3.099100
2	.204393	1.433140	.142197	.292627	.000000	.000000	.000000	.000001	.000001	.946740	3.099098
3	.204348	1.433140	.142173	.292672	.000001	.000000	.000001	.000004	.000007	.946739	3.099085
4	.204034	1.433139	.142017	.292985	.000001	.000000	.000003	.000024	.000050	.946739	3.098994
5	.201491	1.433138	.140997	.295029	.000003	.000000	.000008	.000131	.000351	.946739	3.098386
6	.270220	1.433136	.135112	.306800	.000005	.000000	.000020	.000626	.002183	.946739	3.094841
7	.226472	1.433132	.113240	.350548	.000008	.000000	.000036	.002057	.009309	.946738	3.091539
8	.159001	1.433131	.079504	.418019	.000009	.000000	.000046	.003584	.020812	.946738	3.090844
9	.106311	1.433130	.053160	.470708	.000010	.000000	.000049	.004175	.030247	.946738	3.094528
10	.074283	1.433130	.037146	.502737	.000011	.000000	.000049	.004168	.036257	.946738	3.0934518
11	.055441	1.433129	.027750	.521529	.000011	.000000	.000049	.003967	.039931	.946738	3.0928594
12	.044045	1.433129	.022027	.532974	.000011	.000000	.000048	.003738	.042249	.946738	3.0924960
13	.036715	1.433128	.018362	.540305	.000012	.000000	.000048	.003534	.043776	.946738	3.0922618
14	.031799	1.433128	.015905	.545221	.000012	.000000	.000047	.003365	.044825	.946738	3.0921039
15	.028376	1.433127	.014194	.548644	.000012	.000000	.000046	.003228	.045570	.946738	3.0919934
16	.025918	1.433127	.012965	.551102	.000012	.000000	.000046	.003118	.046113	.946738	3.0919138
17	.024110	1.433127	.012061	.552910	.000013	.000000	.000046	.003030	.046518	.946738	3.091852
18	.022755	1.433126	.011384	.554265	.000013	.000000	.000045	.002960	.046824	.946738	3.0918111
19	.021723	1.433126	.010868	.555297	.000013	.000000	.000045	.002904	.047060	.946738	3.0917773
20	.020929	1.433126	.010470	.556091	.000013	.000000	.000045	.002860	.047243	.946737	3.0917514
21	.020310	1.433126	.010161	.556710	.000013	.000000	.000045	.002824	.047365	.946738	3.0917311
22	.019825	1.433126	.009918	.557195	.000013	.000000	.000045	.002795	.047448	.946738	3.0917153
23	.019442	1.433126	.009727	.557578	.000013	.000000	.000045	.002772	.047507	.946737	3.0917027
24	.019138	1.433126	.009575	.557882	.000013	.000000	.000045	.002753	.047658	.946737	3.0916927
25	.018897	1.433126	.009454	.558123	.000013	.000000	.000044	.002738	.047715	.946737	3.0916848
26	.018704	1.433126	.009358	.558316	.000013	.000000	.000044	.002726	.047760	.946737	3.0916784
27	.018549	1.433126	.009280	.558471	.000013	.000000	.000044	.002716	.047796	.946737	3.0916733

28	.018425	1.433127	.000000	.558595	.000013	.000000	.000004	.002708	.047826	.946738	3.016693
29	.018325	1.433127	.000168	.558695	.000013	.000000	.000044	.002702	.047849	.946738	3.016661
30	.018244	1.433127	.000128	.558776	.000013	.000000	.000044	.002697	.047868	.946738	3.016634
31	.018179	1.433126	.000046	.558840	.000013	.000000	.000044	.002693	.047883	.946738	3.016612
32	.018127	1.433126	.000070	.558893	.000013	.000000	.000044	.002689	.047896	.946738	3.016595
33	.018085	1.433125	.000048	.558935	.000013	.000000	.000044	.002686	.047906	.946738	3.016581
34	.018051	1.433126	.000031	.558969	.000013	.000000	.000044	.002684	.047914	.946738	3.016570
35	.018023	1.433125	.000018	.558997	.000013	.000000	.000044	.002682	.047920	.946738	3.016561
36	.018001	1.433126	.000006	.559019	.000013	.000000	.000044	.002681	.047926	.946738	3.016553
37	.017982	1.433125	.000000	.559038	.000013	.000000	.000044	.002680	.047930	.946738	3.016548
38	.017967	1.433125	.000000	.559053	.000013	.000000	.000044	.002679	.047933	.946738	3.016543
39	.017955	1.433125	.000000	.559065	.000013	.000000	.000044	.002678	.047936	.946738	3.016540
40	.017945	1.433125	.000000	.559074	.000013	.000000	.000044	.002677	.047938	.946738	3.016537
41	.017938	1.433125	.000000	.559082	.000013	.000000	.000044	.002677	.047940	.946738	3.016534
42	.017931	1.433125	.000000	.559089	.000013	.000000	.000044	.002676	.047942	.946738	3.016532
43	.017926	1.433125	.000000	.559093	.000013	.000000	.000044	.002676	.047943	.946737	3.016530
44	.017922	1.433125	.000000	.559097	.000013	.000000	.000044	.002676	.047944	.946737	3.016528
45	.017919	1.433125	.000000	.559101	.000013	.000000	.000044	.002676	.047945	.946737	3.016527
46	.017917	1.433126	.000000	.559103	.000013	.000000	.000044	.002675	.047945	.946738	3.016526
47	.017915	1.433126	.000000	.559105	.000013	.000000	.000044	.002675	.047946	.946738	3.016526
48	.017913	1.433127	.000000	.559107	.000013	.000000	.000044	.002675	.047946	.946738	3.016526
49	.017911	1.433127	.000000	.559108	.000013	.000000	.000044	.002675	.047947	.946738	3.016526
50	.017911	1.433127	.000000	.559109	.000013	.000000	.000044	.002675	.047947	.946738	3.016525
51	.017910	1.433127	.000000	.559110	.000013	.000000	.000044	.002675	.047947	.946738	3.016525
52	.017909	1.433127	.000000	.559110	.000013	.000000	.000044	.002675	.047947	.946738	3.016525
53	.017909	1.433128	.000000	.559111	.000013	.000000	.000044	.002675	.047947	.946738	3.016525
54	.017908	1.433127	.000000	.559112	.000013	.000000	.000044	.002675	.047948	.946738	3.016525
55	.017908	1.433128	.000000	.559112	.000013	.000000	.000044	.002675	.047948	.946738	3.016525
56	.017907	1.433128	.000000	.559113	.000013	.000000	.000044	.002675	.047948	.946738	3.016525
57	.017907	1.433128	.000000	.559113	.000013	.000000	.000044	.002675	.047948	.946738	3.016525
58	.017907	1.433128	.000000	.559113	.000013	.000000	.000044	.002675	.047948	.946738	3.016525

59	.017907	1.433128	.008	.559113	.000013	.000000	.0000	.002675	.047948	.946738	3.016525
60	.017906	1.433127	.008959	.559113	.000013	.000000	.000044	.002675	.047948	.946738	3.016524
61	.017907	1.433128	.008959	.559113	.000013	.000000	.000044	.002675	.047948	.946737	3.016524
62	.017907	1.433127	.008959	.559113	.000013	.000000	.000044	.002675	.047948	.946737	3.016522
63	.017906	1.433127	.008959	.559113	.000013	.000000	.000044	.002675	.047948	.946737	3.016523
64	.017906	1.433127	.008959	.559113	.000013	.000000	.000044	.002675	.047948	.946738	3.016524

11  
 12  
 13  
 14  
 15  
 16  
 17  
 18  
 19  
 20  
 21  
 22  
 23  
 24  
 25  
 26  
 27  
 28  
 29  
 30

— COMPOSICION DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO —

COMPUESTO	FLOJO MOLAR	PORCIENTO MOL
H2S	.01790658	.5936
CO2	1.43312703	47.5092
SO2	.00895856	.2970
H2O	.55911312	18.5350
COs	.00001321	.0004
CS2	.00000000	.0000
S2	.00004418	.0015
S0	.00267476	.0887
SH	.04794801	1.5895
N2	.94673776	31.3851

— PORCIENTO DE CONVERSION = 95.70 —

TEMPERATURA DE ROCIO = 518.415 GRADOS KELVIN

CALCULO DE LAS CONCENTRACIONES AL EQUILIBRIO EN LOS REACTORES DEL PROCESO CLAUSS  
 POR EL METODO DE MINIMIZACION DE ENERGIA LIBRE

DATOS DEL SISTEMA:

NUMERO DE COMPONENTES (N) = 10

NUMERO DE LOS COMPONENTES: ACIDO SULFIDRICO, BIOXIDO DE CARBONO, BIOXIDO DE AZUFRE, AGUA, SULFURO DE CARBONILO, DISULFURO DE CARBONO, AZUFRE DIATOMICO, AZUFRE HEXAATOMICO, AZUFRE OCTAATOMICO Y NITROGENO

NUMERO DE LOS ELEMENTOS QUE CONSTITUYEN LOS COMPONENTES (M) = 5

NUMERO DE LOS ELEMENTOS: HIDROGENO, NITROGENO, CARBONO, OXIGENO Y AZUFRE

PRESSION TOTAL DEL SISTEMA (ATMOSFERAS) = 1.00

TEMPERATURA DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO (GRADOS KELVIN) = 600.0000

RELACION DL H2S/SO2 = 2.0

COMPOSICION DE LA ALIMENTACION AL REACTOR Y(I)

COMPUESTO FLUJO MOLAR

H2S .284400

CO2 1.433140

SO2 .142200

H2O .292620

CO5 .000000

CS2 .000000

S2 .000000

S6 .000000

S8 .000000

N2 .446740

TABLA DE CALCULOS ITERATIVOS

FUJOS MOLARES (LBI-MOL/HR)

ITERACION	H2S	CO2	SO2	H2O	CO5	CS2	S2	S6	SH	N2	TOTAL
1	.204400	1.433140	.142200	.292620	.000000	.000000	.000000	.000000	.000000	.946740	3.099100
2	.204395	1.433140	.142197	.292625	.000000	.000000	.000000	.000001	.000001	.946739	3.099098
3	.204368	1.433139	.142184	.292652	.000001	.000000	.000001	.000003	.000004	.946739	3.099091
4	.204236	1.433138	.142118	.292704	.000002	.000000	.000004	.000012	.000020	.946739	3.099054
5	.203604	1.433135	.141803	.293416	.000004	.000000	.000011	.000054	.000105	.946739	3.099072
6	.200066	1.433130	.140407	.296214	.000009	.000000	.000030	.000218	.000501	.946738	3.099054
7	.270328	1.433122	.135172	.306692	.000017	.000000	.000072	.000755	.002051	.946738	3.094947
8	.243812	1.433111	.121919	.333208	.000028	.000000	.000145	.001954	.006103	.946738	3.087020
9	.206457	1.433099	.103248	.370562	.000041	.000000	.000245	.003511	.011912	.946738	3.075814
10	.171089	1.433084	.085971	.405151	.000055	.000000	.000364	.004935	.017293	.946738	3.065461
11	.144937	1.433070	.072502	.432083	.000070	.000000	.000503	.006094	.021440	.946738	3.057437
12	.125044	1.433055	.062564	.451976	.000085	.000000	.000655	.007013	.024440	.946738	3.051569
13	.110514	1.433040	.055306	.466506	.000099	.000000	.000817	.007737	.026578	.946738	3.047337
14	.099834	1.433026	.049974	.477186	.000114	.000000	.000981	.008311	.028106	.946738	3.044270
15	.091090	1.433012	.046008	.485130	.000127	.000000	.001143	.008767	.029211	.946738	3.042026
16	.085904	1.432999	.043022	.491116	.000140	.000000	.001297	.009132	.030019	.946738	3.040366
17	.081339	1.432988	.040744	.495681	.000151	.000000	.001439	.009423	.030619	.946738	3.039122
18	.077421	1.432978	.038990	.499199	.000161	.000000	.001568	.009657	.031069	.946738	3.038181
19	.075085	1.432970	.037627	.501935	.000169	.000000	.001683	.009845	.031410	.946738	3.037463
20	.072942	1.432963	.036559	.504078	.000177	.000000	.001784	.009996	.031672	.946738	3.036909
21	.071252	1.432957	.035717	.505767	.000183	.000000	.001870	.010118	.031875	.946739	3.036478
22	.069913	1.432951	.035050	.507106	.000188	.000000	.001944	.010217	.032032	.946738	3.036141
23	.068849	1.432947	.034520	.508171	.000192	.000000	.002006	.010296	.032156	.946738	3.035875
24	.067998	1.432943	.034097	.509021	.000196	.000000	.002059	.010360	.032254	.946738	3.035666
25	.067318	1.432940	.033758	.509702	.000199	.000000	.002102	.010412	.032331	.946739	3.035500
26	.066772	1.432938	.033486	.510248	.000201	.000000	.002138	.010454	.032392	.946738	3.035368
27	.066333	1.432936	.033267	.510687	.000204	.000000	.002168	.010488	.032441	.946738	3.035263

20	.065950	1.432735	.0331	.511039	.000205	.000000	.0021	.010515	.032411	.946739	3.035178
29	.065696	1.432934	.032949	.511324	.000207	.000000	.002213	.010538	.032512	.946739	3.035110
30	.065956	1.432933	.032845	.511553	.000208	.000000	.002229	.010556	.032537	.946739	3.035056
31	.065241	1.432931	.032743	.511739	.000209	.000000	.002243	.010570	.032558	.946738	3.035011
32	.065131	1.432931	.032669	.511889	.000209	.000000	.002254	.010582	.032574	.946738	3.034977
33	.065009	1.432930	.032609	.512010	.000210	.000000	.002263	.010591	.032587	.946738	3.034948
34	.064911	1.432930	.032560	.512108	.000210	.000000	.002270	.010599	.032598	.946738	3.034925
35	.064833	1.432929	.032521	.512187	.000211	.000000	.002276	.010605	.032606	.946738	3.034906
36	.064768	1.432929	.032489	.512251	.000211	.000000	.002280	.010610	.032613	.946738	3.034891
37	.064716	1.432929	.032463	.512303	.000211	.000000	.002284	.010615	.032619	.946738	3.034879
38	.064675	1.432929	.032442	.512345	.000212	.000000	.002288	.010618	.032624	.946739	3.034870
39	.064641	1.432929	.032425	.512379	.000212	.000000	.002290	.010621	.032627	.946738	3.034862
40	.064613	1.432929	.032412	.512406	.000212	.000000	.002292	.010623	.032630	.946738	3.034855
41	.064591	1.432929	.032401	.512429	.000212	.000000	.002294	.010625	.032633	.946738	3.034851
42	.064573	1.432929	.032392	.512447	.000212	.000000	.002295	.010626	.032635	.946738	3.034846
43	.064559	1.432929	.032384	.512461	.000212	.000000	.002296	.010627	.032636	.946738	3.034842
44	.064547	1.432928	.032378	.512473	.000212	.000000	.002297	.010628	.032637	.946738	3.034839
45	.064537	1.432928	.032374	.512483	.000212	.000000	.002298	.010629	.032638	.946738	3.034837
46	.064529	1.432928	.032370	.512490	.000212	.000000	.002299	.010629	.032639	.946738	3.034835
47	.064523	1.432928	.032367	.512497	.000212	.000000	.002299	.010630	.032640	.946739	3.034834
48	.064518	1.432927	.032364	.512502	.000212	.000000	.002299	.010630	.032641	.946738	3.034832
49	.064514	1.432927	.032362	.512506	.000212	.000000	.002300	.010631	.032641	.946738	3.034831
50	.064510	1.432928	.032361	.512510	.000212	.000000	.002300	.010631	.032641	.946738	3.034831
51	.064507	1.432928	.032360	.512513	.000212	.000000	.002300	.010631	.032642	.946738	3.034831
52	.064505	1.432928	.032359	.512515	.000212	.000000	.002300	.010631	.032642	.946738	3.034830
53	.064503	1.432928	.032358	.512516	.000212	.000000	.002300	.010631	.032642	.946738	3.034830
54	.064502	1.432928	.032357	.512518	.000212	.000000	.002301	.010632	.032642	.946738	3.034829
55	.064501	1.432927	.032357	.512519	.000212	.000000	.002301	.010632	.032642	.946738	3.034829
56	.064500	1.432927	.032356	.512520	.000212	.000000	.002301	.010632	.032642	.946738	3.034829
57	.064499	1.432928	.032356	.512521	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946738	3.034829
58	.064498	1.432928	.032356	.512522	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946738	3.034829

59	.064496	1.432927	.032354	.512522	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946738	3.034828
60	.064497	1.432927	.032355	.512523	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946738	3.034828
61	.064497	1.432927	.032355	.512523	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946739	3.034828
62	.064497	1.432927	.032355	.512523	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946739	3.034828
63	.064496	1.432927	.032355	.512523	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946739	3.034828
64	.064496	1.432927	.032355	.512523	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946739	3.034828
65	.064496	1.432927	.032354	.512523	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946739	3.034828
66	.064496	1.432927	.032354	.512523	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946739	3.034827
67	.064497	1.432927	.032354	.512523	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946739	3.034827
68	.064496	1.432927	.032354	.512523	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946739	3.034827
69	.064497	1.432927	.032353	.512523	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946739	3.034827
70	.064497	1.432927	.032353	.512523	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946738	3.034826
71	.064497	1.432927	.032353	.512523	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946738	3.034826
72	.064497	1.432927	.032353	.512523	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946738	3.034826
73	.064497	1.432928	.032353	.512523	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946738	3.034827
74	.064497	1.432928	.032353	.512523	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946739	3.034828
75	.064497	1.432928	.032353	.512523	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946738	3.034827
76	.064497	1.432928	.032353	.512523	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946738	3.034828
77	.064496	1.432928	.032353	.512523	.000212	.000000	.002301	.010632	.032643	.946738	3.034827

— COMPOSICION DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO —

COMPUESTO	FUJO MOLAR	PORCIENTO MOL
H2S	.06449628	2.1252
CO2	1.43292753	47.2161
SO2	.03235343	1.0661
H2O	.51252337	16.4881
CO5	.00021247	.0070
CS2	.00000002	.0000
S2	.00230104	.0758
S6	.01063203	.3503
S8	.03264208	1.0756
N2	.94673759	31.1958

PORCIENTO DE CONVERSION = 77.30

TEMPERATURA DE ROCIO = 515.450 GRAUOS KELVIN

CALCULO DE LAS CONCENTRACIONES AL EQUILIBRIO EN LOS REACTORES DEL PROCESO CLAYS  
 POR EL METODO DE MINIMIZACION DE ENERGIA LIBRE

DATOS DEL SISTEMA:

NUMERO DE COMPONENTES (N) = 10

NUMERO DE LOS COMPONENTES: ACIDO SULFHDRIICO, BIOXIDO DE CARBONO, BIOXIDO DE AZUFRE, AGUA, SULFURO DE CARBONILO, DISULFURO DE CARBONO, AZUFRE DIATOMICO, AZUFRE HEXAATOMICO, AZUFRE OCTAATOMICO Y NITROGENO

NUMERO DE LOS ELEMENTOS QUE CONSTITUYEN LOS COMPONENTES (M) = 5

NUMERO DE LOS ELEMENTOS: HIDROGENO, NITROGENO, CARBONO, OXIGENO Y AZUFRE

PRESION TOTAL DEL SISTEMA (ATMOSFERAS) = 1.00

TEMPERATURA DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO (GRADOS KELVIN) = 700.0000

RELACION DE H<sub>2</sub>S/SO<sub>2</sub> = 2.0

COMPOSICION DE LA ALIMENTACION AL REACTOR (Y(I))

COMPUESTO FLUJO MOLAR

H <sub>2</sub> S	.284400
CO <sub>2</sub>	1.433140
SO <sub>2</sub>	.142200
H <sub>2</sub> O	.292620
CO <sub>S</sub>	.000000
C <sub>S</sub> 2	.000000
S <sub>2</sub>	.000000
S <sub>6</sub>	.000000
S <sub>8</sub>	.000000
N <sub>2</sub>	.946740

TABLA DE CALCULOS ITERATIVOS

FLUJOS MOLARES (LB-MOL/HR)

ITERACION	H2S	CO2	SO2	H2O	CO	CS2	S2	S6	S8	N2	TOTAL
1	.204900	1.433140	.142200	.292620	.000000	.000000	.000000	.000000	.000000	.946740	3.099100
2	.204396	1.433140	.142198	.292624	.000000	.000000	.000000	.000000	.000000	.946740	3.099099
3	.204380	1.433139	.142190	.292640	.000001	.000000	.000001	.000002	.000002	.946739	3.099099
4	.204318	1.433137	.142160	.292702	.000002	.000000	.000004	.000007	.000009	.946739	3.099079
5	.204095	1.433133	.142050	.292925	.000006	.000001	.000014	.000026	.000033	.946739	3.099021
6	.20352	1.433126	.141683	.293608	.000012	.000001	.000038	.000086	.000120	.946739	3.098825
7	.201098	1.433112	.140563	.295922	.000026	.000001	.000101	.000264	.000391	.946739	3.098217
8	.275227	1.433086	.137640	.301793	.000051	.000002	.000243	.000715	.001113	.946738	3.096608
9	.263358	1.433048	.131725	.313602	.000089	.000002	.000521	.001622	.002581	.946738	3.093346
10	.246230	1.432994	.123188	.330790	.000143	.000002	.000996	.002989	.004638	.946738	3.088709
11	.227732	1.432927	.113972	.349287	.000210	.000001	.001721	.004617	.006692	.946739	3.083900
12	.210788	1.432846	.105541	.366232	.000291	.000001	.002740	.006305	.008333	.946738	3.079816
13	.196394	1.432756	.098389	.380626	.000383	.000001	.004074	.007921	.009970	.946738	3.076751
14	.184557	1.432658	.092519	.392463	.000481	.000001	.005711	.009379	.010168	.946739	3.074675
15	.174950	1.432556	.087767	.402070	.000583	.000001	.007605	.010635	.010535	.946738	3.073440
16	.167190	1.432455	.083937	.409830	.000683	.000001	.009684	.011675	.010671	.946739	3.072865
17	.160925	1.432359	.080852	.416095	.000780	.000001	.011859	.012508	.010659	.946739	3.072778
18	.155863	1.432269	.078366	.421157	.000870	.000001	.014042	.013158	.010558	.946739	3.073023
19	.151767	1.432188	.076359	.425252	.000951	.000001	.016155	.013653	.010412	.946739	3.073477
20	.148449	1.432116	.074736	.428571	.001023	.000001	.018138	.014024	.010247	.946739	3.074042
21	.145758	1.432053	.073423	.431261	.001086	.000001	.019950	.014290	.010081	.946739	3.074649
22	.143575	1.431999	.072358	.433444	.001141	.000001	.021571	.014498	.009924	.946739	3.075219
23	.141803	1.431952	.071495	.435217	.001187	.000001	.022994	.014645	.009782	.946739	3.075814
24	.140364	1.431913	.070795	.436655	.001226	.000001	.024225	.014751	.009657	.946739	3.076327
25	.139197	1.431881	.070227	.437823	.001258	.000001	.025278	.014829	.009549	.946739	3.076780
26	.138249	1.431854	.069767	.438771	.001285	.000001	.026168	.014885	.009456	.946739	3.077175
27	.137480	1.431832	.069394	.439540	.001308	.000001	.026914	.014927	.009379	.946739	3.077512

26	.130850	1.451814	.069	.440164	.001326	.000001	.0275	.014957	.009314	.946739	3.077798
29	.130350	1.451799	.068845	.440670	.001341	.000001	.028053	.014980	.009260	.946738	3.078036
30	.135939	1.451786	.068646	.441081	.001354	.000001	.028479	.014997	.009215	.946739	3.078236
31	.135006	1.451776	.068485	.441414	.001364	.000001	.028829	.015010	.009178	.946738	3.078401
32	.135336	1.451767	.068354	.441684	.001372	.000001	.029116	.015020	.009148	.946738	3.078536
33	.135117	1.451761	.068248	.441902	.001379	.000001	.029351	.015027	.009124	.946739	3.078648
34	.134941	1.451755	.068162	.442079	.001384	.000001	.029543	.015033	.009103	.946739	3.078740
35	.134797	1.451751	.068092	.442223	.001389	.000001	.029699	.015038	.009087	.946739	3.078815
36	.134670	1.451747	.068036	.442340	.001393	.000001	.029827	.015041	.009074	.946739	3.078876
37	.134586	1.451744	.067990	.442434	.001396	.000001	.029930	.015044	.009063	.946738	3.078926
38	.134510	1.451742	.067953	.442510	.001398	.000001	.030015	.015046	.009054	.946738	3.078966
39	.134448	1.451740	.067923	.442572	.001400	.000001	.030083	.015048	.009047	.946738	3.078999
40	.134398	1.451738	.067899	.442622	.001401	.000001	.030139	.015049	.009041	.946738	3.079026
41	.134357	1.451737	.067880	.442663	.001403	.000001	.030184	.015050	.009036	.946738	3.079048
42	.134324	1.451735	.067864	.442696	.001404	.000001	.030220	.015051	.009032	.946739	3.079066
43	.134297	1.451734	.067851	.442723	.001405	.000001	.030250	.015052	.009029	.946738	3.079080
44	.134275	1.451734	.067841	.442745	.001405	.000001	.030274	.015053	.009027	.946738	3.079092
45	.134258	1.451734	.067832	.442762	.001406	.000001	.030293	.015053	.009025	.946738	3.079101
46	.134244	1.451733	.067825	.442776	.001406	.000001	.030309	.015054	.009023	.946738	3.079109
47	.134232	1.451733	.067820	.442788	.001407	.000001	.030322	.015054	.009022	.946738	3.079115
48	.134223	1.451733	.067815	.442797	.001407	.000001	.030332	.015054	.009021	.946738	3.079120
49	.134215	1.451733	.067811	.442804	.001407	.000001	.030341	.015054	.009020	.946738	3.079124
50	.134209	1.451732	.067809	.442811	.001407	.000001	.030348	.015054	.009019	.946738	3.079128
51	.134204	1.451732	.067806	.442815	.001407	.000001	.030353	.015055	.009018	.946738	3.079130
52	.134200	1.451732	.067804	.442819	.001408	.000001	.030358	.015055	.009018	.946739	3.079132
53	.134197	1.451732	.067803	.442823	.001408	.000001	.030361	.015055	.009018	.946739	3.079134
54	.134194	1.451731	.067802	.442826	.001408	.000001	.030364	.015055	.009017	.946739	3.079136
55	.134192	1.451731	.067801	.442828	.001408	.000001	.030367	.015055	.009017	.946739	3.079137
56	.134190	1.451731	.067800	.442830	.001408	.000001	.030368	.015055	.009017	.946739	3.079138
57	.134189	1.451731	.067799	.442831	.001408	.000001	.030370	.015055	.009017	.946739	3.079139
58	.134188	1.451731	.067799	.442832	.001408	.000001	.030371	.015055	.009016	.946739	3.079139

59	.134187	1.431731	.067797	.442853	.001408	.000001	.03037	.015055	.009016	.946739	3.079139
60	.134186	1.431731	.067797	.442853	.001408	.000001	.030373	.015055	.009016	.946739	3.079140
61	.134186	1.431730	.067797	.442854	.001408	.000001	.030374	.015055	.009016	.946739	3.079140
62	.134185	1.431730	.067797	.442854	.001408	.000001	.030374	.015055	.009016	.946739	3.079139
63	.134185	1.431730	.067796	.442855	.001408	.000001	.030375	.015055	.009016	.946739	3.079140
64	.134185	1.431730	.067797	.442855	.001408	.000001	.030375	.015055	.009016	.946739	3.079140
65	.134184	1.431730	.067796	.442856	.001408	.000001	.030375	.015055	.009016	.946739	3.079140
66	.134184	1.431730	.067796	.442856	.001408	.000001	.030376	.015055	.009016	.946739	3.079140

— COMPOSICION DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO —

COMPUESTO	FLUJO MOLAR	PORCIENTO MOL
H2S	.1341417	4.3578
CO2	1.43173030	46.4977
SO2	.06779592	2.2018
H2O	.44283571	14.3818
CO5	.00140808	.0457
CS2	.00000061	.0000
S2	.05037500	.9865
S6	.01505512	.4889
S8	.00901600	.2928
N2	.94673892	30.7469

PORCIENTO DE CONVERSION = 52.65

TEMPERATURA DE ROCIO = 519.835 GRADOS KELVIN

CALCULO DE LAS CONCENTRACIONES AL EQUILIBRIO EN LOS REACTORES DEL PROCESO CLAUS  
 POR EL METODO DE MINIMIZACION DE ENERGIA LIBRE

DATOS DEL SISTEMA:

NUMERO DE COMPONENTES (N) = 10

NUMERO DE LOS COMPONENTES: ACIDO SULFIDRICO, BIXIDO DE CARBONO, BIXIDO DE AZUFRE, AGUA, SULFURO DE CARBONILO, DISULFURO DE CARBONO, AZUFRE DIATOMICO, AZUFRE HEXAATOMICO, AZUFRE OCTAATOMICO Y NITROGENO

NUMERO DE LOS ELEMENTOS QUE CONSTITUYEN LOS COMPONENTES (M) = 5

NUMERO DE LOS ELEMENTOS: HIDROGENO, NITROGENO, CARBONO, OXIGENO Y AZUFRE

PRESION TOTAL DEL SISTEMA (ATMOSFERAS) = 1.00

TEMPERATURA DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO (GRADOS KELVIN) = 800.0000

RELACION DE H<sub>2</sub>S/SO<sub>2</sub> = 2.0

COMPOSICION DE LA ALIMENTACION AL REACTOR (Y(I)):

COMPUESTO      FLUJO MOLAR

H<sub>2</sub>S      284400

CO<sub>2</sub>      1433140

SO<sub>2</sub>      142200

H<sub>2</sub>O      292620

CO<sub>S</sub>      000000

CS<sub>2</sub>      000000

S<sub>2</sub>      000000

S<sub>6</sub>      000000

S<sub>8</sub>      000000

N<sub>2</sub>      446740

TABLA DE CALCULOS ITERATIVOS

FLUJOS MOLARES (LB-MOL/HR)

ITERACION	H2S	CO2	SO2	H2O	CO	CS2	S2	S6	SH	N2	TOTAL
1	.284400	1.433140	1.42200	.292620	.000000	.000000	.000000	.000000	.000000	.946740	3.099100
2	.284397	1.433140	1.42198	.292623	.000000	.000000	.000000	.000000	.000000	.946739	3.099099
3	.284386	1.433139	1.42193	.292634	.000001	.000000	.000001	.000001	.000001	.946739	3.099096
4	.284354	1.433136	1.42179	.292666	.000003	.000001	.000005	.000004	.000004	.946739	3.099090
5	.284264	1.433132	1.42136	.292756	.000007	.000001	.000016	.000014	.000010	.946739	3.099074
6	.284025	1.433122	1.42022	.292994	.000016	.000002	.000046	.000039	.000026	.946739	3.099032
7	.283444	1.433102	1.41742	.293576	.000035	.000003	.000126	.000102	.000064	.946739	3.098933
8	.282149	1.433063	1.41114	.294871	.000072	.000004	.000321	.000247	.000141	.946739	3.098723
9	.279560	1.432996	1.39854	.297460	.000138	.000005	.000755	.000545	.000283	.946739	3.098334
10	.275037	1.432888	1.37647	.301983	.000245	.000006	.001629	.001072	.000446	.946739	3.097742
11	.268287	1.432731	1.34351	.308733	.000401	.000007	.003220	.001856	.000746	.946739	3.097072
12	.259672	1.432520	1.30150	.317348	.000611	.000008	.005827	.002812	.000953	.946739	3.096640
13	.249971	1.432260	1.25430	.327049	.000871	.000008	.009697	.003759	.001046	.946739	3.096828
14	.239908	1.431963	1.20547	.337112	.001168	.000008	.014927	.004501	.001012	.946739	3.097895
15	.229959	1.431645	1.15731	.347061	.001486	.000008	.021404	.004914	.000889	.946739	3.099836
16	.220406	1.431327	1.11113	.356614	.001805	.000007	.028784	.004977	.000729	.946739	3.102501
17	.211428	1.431024	1.06775	.365542	.002100	.000007	.036575	.004758	.000573	.946739	3.105578
18	.203163	1.430752	1.02779	.373857	.002381	.000007	.044256	.004371	.000441	.946739	3.108744
19	.195713	1.430514	0.99173	.381307	.002618	.000006	.051407	.003925	.000340	.946739	3.111742
20	.189139	1.430314	0.95985	.387881	.002819	.000006	.057774	.003445	.000266	.946739	3.114417
21	.183452	1.430148	0.93224	.393568	.002985	.000005	.063257	.003118	.000213	.946739	3.116709
22	.178610	1.430012	0.90871	.398410	.003121	.000005	.067874	.002805	.000176	.946738	3.118623
23	.174543	1.429902	0.88892	.402476	.003232	.000005	.071704	.002554	.000145	.946739	3.120196
24	.171160	1.429813	0.87246	.405860	.003321	.000005	.074850	.002354	.000130	.946739	3.121477
25	.168367	1.429741	0.85885	.408653	.003393	.000005	.077420	.002196	.000116	.946738	3.122514
26	.166072	1.429683	0.84766	.410948	.003452	.000004	.079512	.002072	.000106	.946738	3.123352
27	.164193	1.429636	0.83850	.412827	.003494	.000004	.081210	.001974	.000098	.946739	3.124030

20	.162060	1.429598	.08310	.414360	.003537	.000004	.08258	.001897	.000092	.946739	3.124577
29	.161910	1.429560	.082493	.415610	.003568	.000004	.083704	.001836	.000007	.946739	3.125018
30	.160394	1.429543	.081997	.416626	.003592	.000004	.084608	.001787	.000004	.946739	3.125374
31	.159508	1.429523	.081594	.417452	.003612	.000004	.085341	.001748	.000001	.946739	3.125662
32	.158898	1.429507	.081267	.418122	.003629	.000004	.085934	.001717	.000079	.946739	3.125894
33	.158350	1.429494	.081001	.418667	.003642	.000004	.086414	.001692	.000077	.946739	3.126082
34	.157911	1.429483	.080786	.419109	.003652	.000004	.086803	.001672	.000076	.946738	3.126234
35	.157554	1.429474	.080611	.419466	.003661	.000004	.087118	.001656	.000074	.946738	3.126357
36	.157263	1.429468	.080469	.419757	.003668	.000004	.087373	.001643	.000074	.946738	3.126456
37	.157028	1.429462	.080354	.419992	.003674	.000004	.087579	.001633	.000073	.946738	3.126536
38	.156837	1.429458	.080261	.420183	.003678	.000004	.087746	.001624	.000072	.946738	3.126602
39	.156683	1.429454	.080185	.420337	.003682	.000004	.087882	.001617	.000072	.946738	3.126655
40	.156557	1.429451	.080124	.420463	.003685	.000004	.087992	.001612	.000071	.946738	3.126697
41	.156456	1.429448	.080075	.420564	.003687	.000004	.088080	.001607	.000071	.946738	3.126732
42	.156373	1.429447	.080035	.420647	.003689	.000004	.088152	.001604	.000071	.946739	3.126760
43	.156307	1.429445	.080002	.420713	.003691	.000004	.088211	.001601	.000071	.946739	3.126782
44	.156253	1.429444	.079976	.420767	.003692	.000004	.088258	.001599	.000071	.946739	3.126801
45	.156209	1.429443	.079954	.420811	.003693	.000004	.088296	.001597	.000070	.946739	3.126816
46	.156174	1.429442	.079937	.420846	.003694	.000004	.088327	.001595	.000070	.946739	3.126828
47	.156145	1.429441	.079923	.420875	.003695	.000004	.088352	.001594	.000070	.946738	3.126837
48	.156122	1.429441	.079912	.420898	.003695	.000004	.088372	.001593	.000070	.946739	3.126845
49	.156103	1.429440	.079902	.420917	.003696	.000004	.088389	.001592	.000070	.946739	3.126852
50	.156088	1.429440	.079895	.420932	.003696	.000004	.088402	.001591	.000070	.946739	3.126857
51	.156075	1.429439	.079889	.420945	.003696	.000004	.088413	.001591	.000070	.946738	3.126861
52	.156065	1.429439	.079884	.420955	.003697	.000004	.088422	.001590	.000070	.946738	3.126864
53	.156057	1.429439	.079880	.420963	.003697	.000004	.088429	.001590	.000070	.946739	3.126868
54	.156050	1.429439	.079877	.420969	.003697	.000004	.088435	.001590	.000070	.946739	3.126870
55	.156045	1.429439	.079874	.420975	.003697	.000004	.088439	.001590	.000070	.946739	3.126871
56	.156041	1.429438	.079872	.420979	.003697	.000004	.088443	.001589	.000070	.946739	3.126872
57	.156038	1.429438	.079870	.420982	.003697	.000004	.088446	.001589	.000070	.946739	3.126874
58	.156035	1.429438	.079869	.420985	.003697	.000004	.088449	.001589	.000070	.946738	3.126874

59	.156032	1.429438	.079863	.420988	.003697	.000004	.088452	.001589	.000070	.946738	3.126875
60	.156030	1.429438	.079867	.420990	.003698	.000004	.088452	.001589	.000070	.946738	3.126876
61	.156029	1.429438	.079867	.420991	.003698	.000004	.088453	.001589	.000070	.946738	3.126877
62	.156028	1.429438	.079866	.420992	.003698	.000004	.088454	.001589	.000070	.946738	3.126877
63	.156027	1.429438	.079866	.420993	.003698	.000004	.088455	.001589	.000070	.946738	3.126877
64	.156026	1.429438	.079865	.420994	.003698	.000004	.088456	.001589	.000070	.946738	3.126877
65	.156025	1.429438	.079865	.420995	.003698	.000004	.088457	.001589	.000070	.946739	3.126878
66	.156025	1.429438	.079865	.420995	.003698	.000004	.088457	.001589	.000070	.946739	3.126878
67	.156024	1.429438	.079865	.420996	.003698	.000004	.088457	.001589	.000070	.946738	3.126878
68	.156024	1.429438	.079864	.420996	.003698	.000004	.088458	.001589	.000070	.946738	3.126878
69	.156024	1.429438	.079864	.420996	.003698	.000004	.088458	.001589	.000070	.946738	3.126878
70	.156023	1.429438	.079864	.420997	.003698	.000004	.088458	.001589	.000070	.946738	3.126879
71	.156023	1.429438	.079864	.420997	.003698	.000004	.088458	.001589	.000070	.946738	3.126879
72	.156023	1.429438	.079864	.420997	.003698	.000004	.088458	.001589	.000070	.946738	3.126878
73	.156023	1.429438	.079864	.420997	.003698	.000004	.088459	.001589	.000070	.946738	3.126878
74	.156023	1.429438	.079864	.420997	.003698	.000004	.088459	.001589	.000070	.946738	3.126879
75	.156023	1.429438	.079864	.420997	.003698	.000004	.088459	.001589	.000070	.946739	3.126879
76	.156023	1.429438	.079864	.420997	.003698	.000004	.088459	.001589	.000070	.946739	3.126879

COMPOSICION DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO

COMUESTO	FLUJO MOLAR	PORCIENTO MOL
H2S	.15602253	4.0897
CO2	1.42943777	45.7145
SO2	.07986375	2.5541
H2O	.42099741	13.4638
CO5	.00369769	.1183
CS2	.0000386	.0001
S2	.08845878	2.8290
S6	.00158859	.0508
S8	.00006986	.0022
N2	.94673857	30.2774

PORCIENTO DE CONVERSION = 44.71

TEMPERATURA DE MOCIO = 533.726 GRADOS KELVIN

CALCULO DE LAS CONCENTRACIONES AL EQUILIBRIO EN LOS REACTORES DEL PROCESO CLAUS  
 POR EL METODO DE MINIMIZACION DE ENERGIA LIBRE

DATOS DEL SISTEMA:

NUMERO DE COMPONENTES (N) = 10

NUMBRE DE LOS COMPONENTES: ACIDO SULFIDRICO, BIOXIDO DE CARBONO, BIOXIDO DE AZUFRE, AGUA, SULFURO DE CARBONILO, DISULFURO DE CARBONO, AZUFRE DIATOMICO, AZUFRE HEXAATOMICO, AZUFRE OCTAATOMICO Y NITROGENO

NUMERO DE LOS ELEMENTOS QUE CONSTITUYEN LOS COMPONENTES (M) = 5

NUMBRE DE LOS ELEMENTOS: HIDROGENO, NITROGENO, CARBONO, OXIGENO Y AZUFRE

PRESION TOTAL DEL SISTEMA (ATMOSFERAS) = 1.00

TEMPERATURA DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO (GRADOS KELVIN) = 900.0000

RELACION DE H<sub>2</sub>S/SO<sub>2</sub> = 2.0

COMPOSICION DE LA ALIMENTACION AL REACTOR (Y(I))

COMPUESTO -- FLUJO MOLAR --

H<sub>2</sub>S .284400

CO<sub>2</sub> 1.433140

SO<sub>2</sub> .142200

H<sub>2</sub>O .292620

CO<sub>S</sub> .000000

CS<sub>2</sub> .000000

S<sub>2</sub> .000000

S<sub>6</sub> .000000

S<sub>8</sub> .000000

N<sub>2</sub> .446740

9 10 11

TAULA DE CALCULOS ITERATIVOS

FLUJOS MOLARES (LB-MOL/HR)

ITERACION	H2S	CO2	SO2	H2O	CO5	CS2	S2	S6	S8	N2	TOTAL
1	.284400	1.453140	.142200	.292620	.000000	.000000	.000000	.000000	.000000	.946740	3.099100
2	.284397	1.453140	.142199	.292623	.000000	.000000	.000000	.000000	.000000	.946740	3.099100
3	.284390	1.453139	.142195	.292630	.000001	.000000	.000002	.000001	.000001	.946739	3.099098
4	.284369	1.453130	.142186	.292651	.000003	.000001	.000005	.000003	.000002	.946739	3.099095
5	.284317	1.453130	.142163	.292703	.000008	.000002	.000017	.000008	.000004	.946739	3.099091
6	.284190	1.453118	.142107	.292830	.000019	.000003	.000053	.000019	.000007	.946739	3.099085
7	.283899	1.453092	.141976	.293121	.000044	.000005	.000148	.000045	.000014	.946739	3.099081
8	.283267	1.453040	.141687	.293753	.000093	.000008	.000390	.000095	.000024	.946739	3.099094
9	.281984	1.452945	.141094	.295036	.000185	.000011	.000948	.000186	.000038	.946739	3.099165
10	.279568	1.452764	.139969	.297451	.000342	.000015	.002130	.000331	.000056	.946739	3.099384
11	.275408	1.452536	.138014	.301612	.000586	.000018	.004405	.000529	.000071	.946738	3.099918
12	.268924	1.452167	.134948	.308096	.000932	.000021	.008345	.000740	.000078	.946738	3.101009
13	.259834	1.451742	.130626	.317186	.001375	.000023	.014418	.000888	.000070	.946738	3.102899
14	.248334	1.451230	.125133	.328685	.001887	.000024	.022696	.000901	.000050	.946738	3.105679
15	.235111	1.450695	.118788	.341909	.002422	.000023	.032663	.000780	.000029	.946739	3.109158
16	.221175	1.450185	.112075	.355845	.002934	.000021	.043344	.000595	.000015	.946739	3.112926
17	.207595	1.449728	.105512	.369425	.003394	.000018	.053729	.000424	.000007	.946739	3.116571
18	.195167	1.449336	.099503	.381833	.003787	.000016	.063131	.000299	.000004	.946738	3.119836
19	.184373	1.449010	.094258	.392647	.004115	.000015	.071252	.000217	.000002	.946739	3.122628
20	.175238	1.448741	.089825	.401782	.004386	.000013	.078064	.000164	.000002	.946739	3.124953
21	.167671	1.448521	.086151	.409349	.004606	.000012	.083681	.000130	.000001	.946739	3.126860
22	.161476	1.448342	.083142	.415544	.004786	.000011	.088264	.000107	.000001	.946739	3.128411
23	.156437	1.448196	.080695	.420583	.004932	.000011	.091982	.000091	.000001	.946739	3.129666
24	.152355	1.448079	.078713	.424665	.005051	.000010	.094989	.000080	.000001	.946738	3.130680
25	.149053	1.447963	.077110	.427967	.005147	.000010	.097418	.000072	.000000	.946738	3.131497
26	.146386	1.447906	.075815	.430634	.005224	.000009	.099379	.000066	.000000	.946738	3.132157
27	.144232	1.447843	.074768	.432787	.005287	.000009	.100961	.000061	.000000	.946738	3.132689

28	.142492	1.427792	.0739	.434528	.005338	.000009	.1022	.000058	.000000	.946738	3.153118
29	.141086	1.427751	.073242	.435933	.005380	.000009	.103269	.000055	.000000	.946738	3.153464
30	.139951	1.427710	.072690	.437069	.005413	.000009	.104103	.000053	.000000	.946738	3.153745
31	.139032	1.427691	.072245	.437988	.005440	.000009	.104776	.000052	.000000	.946738	3.153971
32	.138290	1.427669	.071804	.438730	.005462	.000008	.105320	.000051	.000000	.946739	3.154154
33	.137689	1.427652	.071593	.439331	.005480	.000008	.105760	.000050	.000000	.946738	3.154301
34	.137203	1.427637	.071357	.439816	.005494	.000008	.106117	.000049	.000000	.946738	3.154420
35	.136810	1.427625	.071166	.440210	.005506	.000008	.106405	.000048	.000000	.946738	3.154517
36	.136492	1.427616	.071011	.440528	.005515	.000008	.106638	.000048	.000000	.946738	3.154595
37	.136235	1.427609	.070806	.440785	.005523	.000008	.106827	.000047	.000000	.946738	3.154658
38	.136026	1.427602	.070785	.440994	.005529	.000008	.106979	.000047	.000000	.946739	3.154710
39	.135857	1.427590	.070703	.441163	.005534	.000008	.107103	.000047	.000000	.946739	3.154752
40	.135721	1.427593	.070637	.441299	.005538	.000008	.107203	.000047	.000000	.946739	3.154786
41	.135610	1.427590	.070583	.441410	.005541	.000008	.107284	.000046	.000000	.946739	3.154813
42	.135520	1.427588	.070540	.441500	.005544	.000008	.107350	.000046	.000000	.946739	3.154835
43	.135447	1.427585	.070505	.441573	.005546	.000008	.107403	.000046	.000000	.946739	3.154852
44	.135388	1.427583	.070477	.441632	.005548	.000008	.107446	.000046	.000000	.946739	3.154867
45	.135341	1.427582	.070454	.441679	.005549	.000008	.107481	.000046	.000000	.946739	3.154879
46	.135302	1.427581	.070435	.441718	.005551	.000008	.107509	.000046	.000000	.946739	3.154888
47	.135271	1.427580	.070420	.441749	.005552	.000008	.107532	.000046	.000000	.946739	3.154895
48	.135246	1.427579	.070408	.441774	.005552	.000008	.107550	.000046	.000000	.946739	3.154902
49	.135225	1.427578	.070398	.441795	.005553	.000008	.107565	.000046	.000000	.946739	3.154907
50	.135209	1.427578	.070389	.441811	.005553	.000008	.107578	.000046	.000000	.946739	3.154911
51	.135196	1.427577	.070383	.441824	.005554	.000008	.107588	.000046	.000000	.946739	3.154914
52	.135185	1.427577	.070377	.441835	.005554	.000008	.107595	.000046	.000000	.946739	3.154916
53	.135176	1.427576	.070373	.441844	.005554	.000008	.107602	.000046	.000000	.946739	3.154918
54	.135169	1.427576	.070369	.441851	.005555	.000008	.107607	.000046	.000000	.946739	3.154920
55	.135163	1.427576	.070367	.441857	.005555	.000008	.107611	.000046	.000000	.946739	3.154921
56	.135158	1.427576	.070364	.441862	.005555	.000008	.107615	.000046	.000000	.946739	3.154922
57	.135155	1.427576	.070362	.441865	.005555	.000008	.107618	.000046	.000000	.946739	3.154924
58	.135152	1.427576	.070361	.441868	.005555	.000008	.107620	.000046	.000000	.946739	3.154924

59	.135149	1.427576	.07035	.441871	.005555	.000008	.107622	.000046	.000000	.946739	3.134925
60	.135147	1.427576	.070359	.441873	.005555	.000008	.107623	.000046	.000000	.946739	3.134926
61	.135145	1.427576	.070358	.441874	.005555	.000008	.107624	.000046	.000000	.946738	3.134925
62	.135144	1.427576	.070357	.441876	.005555	.000008	.107625	.000046	.000000	.946738	3.134926
63	.135143	1.427576	.070356	.441877	.005555	.000008	.107626	.000046	.000000	.946739	3.134927
64	.135142	1.427576	.070356	.441877	.005555	.000008	.107627	.000046	.000000	.946738	3.134926
65	.135142	1.427576	.070356	.441878	.005555	.000008	.107627	.000046	.000000	.946738	3.134927
66	.135141	1.427577	.070355	.441879	.005555	.000008	.107628	.000046	.000000	.946738	3.134927
67	.135141	1.427577	.070355	.441879	.005555	.000008	.107628	.000046	.000000	.946738	3.134927
68	.135140	1.427577	.070355	.441880	.005555	.000008	.107628	.000046	.000000	.946738	3.134928
69	.135140	1.427577	.070355	.441880	.005555	.000008	.107629	.000046	.000000	.946738	3.134927
70	.135140	1.427577	.070355	.441880	.005556	.000008	.107629	.000046	.000000	.946738	3.134927
71	.135140	1.427577	.070354	.441880	.005556	.000008	.107629	.000046	.000000	.946738	3.134928
72	.135139	1.427577	.070354	.441881	.005556	.000008	.107629	.000046	.000000	.946738	3.134928
73	.135139	1.427577	.070354	.441881	.005556	.000008	.107629	.000046	.000000	.946739	3.134928
74	.135139	1.427577	.070354	.441881	.005556	.000008	.107629	.000046	.000000	.946739	3.134928
75	.135139	1.427577	.070355	.441881	.005556	.000008	.107629	.000046	.000000	.946738	3.134928
76	.135139	1.427577	.070354	.441881	.005556	.000008	.107629	.000046	.000000	.946738	3.134928
77	.135139	1.427576	.070354	.441881	.005556	.000008	.107629	.000046	.000000	.946739	3.134928
78	.135139	1.427576	.070354	.441881	.005556	.000008	.107629	.000046	.000000	.946739	3.134928
79	.135139	1.427576	.070354	.441881	.005556	.000008	.107629	.000046	.000000	.946739	3.134928
80	.135139	1.427576	.070354	.441881	.005556	.000008	.107629	.000046	.000000	.946739	3.134928

COMPOSICION DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO

COMPUESTO	FLUJO MOLAR	PORCIENTO MOL
H2S	.13513863	4.3107
CO2	1.42757595	45.5378
SO2	.07035436	2.2442
H2O	.44188126	14.0954
CO5	.00555552	.1772
CS2	.00000812	.0003
S2	.10762939	3.4332
S6	.00004569	.0015
SH	.00000027	.0000
N2	.94673872	30.1997

PORCIENTO DE CONVERSION = 51.83

TEMPERATURA DE ROCIO = 538.897 GRADOS KELVIN

CALCULO DE LAS CONCENTRACIONES AL EQUILIBRIO EN LOS REACTORES DEL PROCESO CLAUS  
 POR EL METODO DE MINIMIZACION DE ENERGIA LIBRE

DATOS DEL SISTEMA:

NUMERO DE COMPONENTES (N) = 10

NUMBRE DE LOS COMPONENTES: ACIDO SULFIDRICO, BIOXIDO DE CARBONO, BIOXIDO DE AZUFRE, AGUA, SULFURO DE CARBONILO, DISULFURO DE CARBONO, AZUFRE DIATOMICO, AZUFRE HEXAATOMICO, AZUFRE OCTAATOMICO Y NITROGENO

NUMERO DE LOS ELEMENTOS QUE CONSTITUYEN LOS COMPONENTES (M) = 5

NUMBRE DE LOS ELEMENTOS: HIDROGENO, NITROGENO, CARBONO, OXIGENO Y AZUFRE

PRESION TOTAL DEL SISTEMA (ATMOSFERAS) = 1.00

TEMPERATURA DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO (GRAOS KELVIN) = 1000.0000

RELACION DE H2S/SO2 = 2.0

COMPOSICION DE LA ALIMENTACION AL REACTOR (Y(I))

COMPUESTO FLUJO MOLAR

H2S	284400
CO2	1453140
SO2	142200
H2O	292620
COS	.000000
CS2	.000000
S2	.000000
S6	.000000
S8	.000000
N2	446740

9 10 11 1

TABLA DE CALCULOS ITERATIVOS

FLUJOS MOLARES (LB-MOL/HR)

ITERACION	H2S	CO2	SO2	H2O	CO	CS2	S2	S6	S8	N2	TOTAL
1	.284400	1.433140	.142200	.292620	.000000	.000000	.000000	.000000	.000000	.946740	3.099100
2	.284398	1.433140	.142199	.292622	.000000	.000000	.000000	.000000	.000000	.946739	3.099099
3	.284393	1.433139	.142196	.292627	.000000	.000000	.000002	.000001	.000000	.946739	3.099098
4	.284380	1.433138	.142190	.292640	.000001	.000001	.000006	.000002	.000001	.946739	3.099097
5	.284347	1.433137	.142175	.292673	.000002	.000001	.000019	.000005	.000001	.946739	3.099098
6	.284266	1.433135	.142155	.292754	.000003	.000001	.000058	.000011	.000002	.946739	3.099104
7	.284067	1.433133	.142037	.292953	.000005	.000002	.000169	.000022	.000003	.946739	3.099128
8	.283600	1.433130	.141805	.293419	.000007	.000002	.000452	.000042	.000003	.946739	3.099201
9	.282966	1.433127	.141290	.294454	.000010	.000003	.001126	.000073	.000004	.946739	3.099392
10	.280426	1.433122	.140222	.296594	.000014	.000004	.002591	.000118	.000005	.946739	3.099834
11	.276363	1.433118	.138193	.300657	.000017	.000004	.005481	.000169	.000005	.946738	3.100746
12	.269905	1.433114	.134717	.307615	.000021	.000004	.010581	.000208	.000005	.946739	3.102408
13	.258855	1.433111	.129443	.318165	.000024	.000004	.018485	.000213	.000003	.946739	3.105042
14	.244854	1.433110	.122443	.332166	.000026	.000004	.029109	.000173	.000001	.946739	3.108625
15	.228558	1.433110	.114310	.348432	.000026	.000003	.041487	.000115	.000001	.946739	3.112811
16	.211905	1.433110	.105918	.365215	.000026	.000003	.054219	.000068	.000000	.946739	3.117102
17	.196035	1.433111	.098032	.380985	.000026	.000002	.066133	.000039	.000000	.946739	3.121102
18	.182151	1.433113	.091089	.394869	.000025	.000002	.076594	.000024	.000000	.946739	3.124604
19	.170423	1.433114	.085224	.406597	.000024	.000002	.085415	.000016	.000000	.946739	3.127553
20	.160759	1.433115	.080392	.416261	.000023	.000001	.092678	.000011	.000000	.946739	3.129979
21	.152906	1.433116	.076465	.424113	.000022	.000001	.098576	.000009	.000000	.946739	3.131948
22	.146573	1.433117	.073297	.430447	.000022	.000001	.103332	.000007	.000000	.946739	3.133535
23	.141482	1.433117	.070752	.435538	.000021	.000001	.107154	.000006	.000000	.946739	3.134810
24	.137395	1.433118	.068708	.439624	.000021	.000001	.110272	.000005	.000000	.946739	3.135833
25	.134115	1.433118	.067068	.442995	.000021	.000001	.112688	.000004	.000000	.946739	3.136654
26	.131480	1.433119	.065750	.445590	.000020	.000001	.114442	.000004	.000000	.946739	3.137314
27	.129362	1.433119	.064691	.447658	.000020	.000001	.115453	.000003	.000000	.946739	3.137744

20	.127057	1.433118	.0031	.449363	.000020	.000001	.117531	.000003	.000000	.946739	3.138271
29	.126284	1.433118	.003152	.450736	.000020	.000001	.118561	.000003	.000000	.946739	3.138614
30	.125177	1.433118	.002599	.451843	.000020	.000001	.119392	.000003	.000000	.946739	3.138891
31	.124204	1.433119	.002152	.452736	.000020	.000001	.120062	.000003	.000000	.946739	3.139115
32	.123563	1.433119	.001791	.453457	.000020	.000001	.120603	.000003	.000000	.946739	3.139295
33	.122981	1.433119	.001500	.454039	.000020	.000001	.121040	.000003	.000000	.946739	3.139441
34	.122510	1.433120	.001265	.454510	.000020	.000001	.121393	.000003	.000000	.946739	3.139560
35	.122130	1.433119	.001074	.454890	.000020	.000001	.121679	.000003	.000000	.946739	3.139655
36	.121822	1.433119	.000920	.455198	.000020	.000001	.121910	.000003	.000000	.946739	3.139731
37	.121573	1.433119	.000796	.455447	.000019	.000001	.122097	.000003	.000000	.946739	3.139794
38	.121371	1.433119	.000695	.455649	.000019	.000001	.122248	.000003	.000000	.946739	3.139844
39	.121208	1.433120	.000613	.455812	.000019	.000001	.122371	.000003	.000000	.946739	3.139885
40	.121076	1.433120	.000548	.455944	.000019	.000001	.122470	.000003	.000000	.946739	3.139918
41	.120979	1.433120	.000494	.456051	.000019	.000001	.122550	.000003	.000000	.946739	3.139945
42	.120903	1.433120	.000451	.456137	.000019	.000001	.122615	.000003	.000000	.946739	3.139967
43	.120812	1.433120	.000416	.456207	.000019	.000001	.122667	.000003	.000000	.946739	3.139984
44	.120756	1.433120	.000387	.456264	.000019	.000001	.122710	.000003	.000000	.946739	3.139998
45	.120710	1.433119	.000364	.456310	.000019	.000001	.122744	.000003	.000000	.946739	3.140009
46	.120673	1.433120	.000346	.456347	.000019	.000001	.122772	.000003	.000000	.946739	3.140019
47	.120643	1.433120	.000330	.456377	.000019	.000001	.122795	.000003	.000000	.946739	3.140027
48	.120618	1.433120	.000318	.456402	.000019	.000001	.122813	.000003	.000000	.946739	3.140033
49	.120598	1.433120	.000308	.456421	.000019	.000001	.122828	.000003	.000000	.946739	3.140038
50	.120582	1.433120	.000300	.456437	.000019	.000001	.122840	.000003	.000000	.946739	3.140042
51	.120569	1.433119	.000294	.456451	.000019	.000001	.122850	.000003	.000000	.946739	3.140045
52	.120559	1.433119	.000289	.456461	.000019	.000001	.122858	.000003	.000000	.946739	3.140047
53	.120550	1.433120	.000285	.456470	.000019	.000001	.122864	.000003	.000000	.946739	3.140050
54	.120543	1.433119	.000281	.456477	.000019	.000001	.122869	.000003	.000000	.946739	3.140051
55	.120538	1.433120	.000278	.456482	.000019	.000001	.122873	.000003	.000000	.946739	3.140053
56	.120533	1.433120	.000276	.456487	.000019	.000001	.122877	.000003	.000000	.946739	3.140054
57	.120530	1.433119	.000274	.456490	.000019	.000001	.122879	.000003	.000000	.946739	3.140054
58	.120527	1.433119	.000273	.456493	.000019	.000001	.122882	.000003	.000000	.946739	3.140055

59	.120574	1.433119	.000271	.456496	.000019	.000001	.122884	.000003	.000000	.946739	3.140056
60	.120572	1.433119	.000271	.456498	.000019	.000001	.122885	.000003	.000000	.946739	3.140056
61	.120571	1.433119	.000270	.456499	.000019	.000001	.122886	.000003	.000000	.946738	3.140056
62	.120519	1.433119	.000269	.456501	.000019	.000001	.122887	.000003	.000000	.946738	3.140056
63	.120518	1.433119	.000269	.456502	.000019	.000001	.122888	.000003	.000000	.946739	3.140057
64	.120517	1.433119	.000268	.456502	.000019	.000001	.122889	.000003	.000000	.946739	3.140057
65	.120517	1.433119	.000268	.456503	.000019	.000001	.122889	.000003	.000000	.946738	3.140056
66	.120516	1.433119	.000267	.456504	.000019	.000001	.122889	.000003	.000000	.946739	3.140057
67	.120516	1.433119	.000267	.456504	.000019	.000001	.122890	.000003	.000000	.946739	3.140057
68	.120516	1.433119	.000267	.456504	.000019	.000001	.122890	.000003	.000000	.946739	3.140057
69	.120515	1.433119	.000267	.456505	.000019	.000001	.122890	.000003	.000000	.946739	3.140058
70	.120515	1.433119	.000267	.456505	.000019	.000001	.122890	.000003	.000000	.946739	3.140058

— COMPOSICION DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO

COMPUESTO	FLUJO MOLAR	PORCIENTO MOL
H2S	.12051468	3.8300
CO2	1.43311942	45.6399
SO2	.06026694	1.9193
H2O	.45650516	14.5341
COs	.00001938	.0006
CS2	.00000075	.0000
S2	.12289064	3.9136
So	.00000269	.0001
SH	.00000000	.0000
N2	.94673881	30.1504

PORCIENTO DE CONVERSION = 57.62

TEMPERATURA DE ROCIO = 542.812 GRADOS KELVIN

CALCULO DE LAS CONCENTRACIONES AL EQUILIBRIO EN LOS REACTORES DEL PROCESO CLAUS  
 POR EL METODO DE MINIMIZACION DE ENERGIA LIBRE

DATOS DEL SISTEMA:

NUMERO DE COMPONENTES (N) = 10

NUMERO DE LOS COMPONENTES: ACIDO SULFURICO, BIOXIDO DE CARBONO, BIOXIDO DE AZUFRE, AGUA, SULFURO DE CARBONILO, DISULFURO DE CARBONO, AZUFRE DIATOMICO, AZUFRE HEXAATOMICO, AZUFRE OCTAATOMICO Y NITROGENO

NUMERO DE LOS ELEMENTOS QUE CONSTITUYEN LOS COMPONENTES (M) = 5

NUMERO DE LOS ELEMENTOS: HIDROGENO, NITROGENO, CARBONO, OXIGENO Y AZUFRE

PRESION TOTAL DEL SISTEMA (ATMOSFERAS) = 1.00

TEMPERATURA DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO (GRADOS KELVIN) = 1100.0000

RELACION DE H2S/SO2 = 2.0

COMPOSICION DE LA ALIMENTACION AL REACTOR (Y(I))

COMPUESTO	FLUJO MOLAR
H2S	.204400
CO2	1.455140
SO2	.142200
H2O	.292620
COS	.000000
CS2	.000000
S2	.000000
S6	.000000
S8	.000000
N2	.946740

TABLA DE CALCULOS ITERATIVOS

FLUJOS MOLARES (LH-MOL/HR)

ITERACION	H2S	CO2	SO2	H2O	CO	CS2	S2	SA	SA	N2	TOTAL
1	.284400	1.433140	.142200	.292620	.000000	.000000	.000000	.000000	.000000	.946740	3.099100
2	.284398	1.433139	.142199	.292622	.000000	.000000	.000000	.000000	.000000	.946740	3.099099
3	.284393	1.433138	.142197	.292627	.000001	.000001	.000002	.000001	.000000	.946739	3.099099
4	.284380	1.433135	.142192	.292640	.000003	.000001	.000006	.000002	.000000	.946739	3.099098
5	.284344	1.433127	.142179	.292676	.000009	.000003	.000020	.000003	.000000	.946739	3.099101
6	.284252	1.433109	.142144	.292767	.000024	.000006	.000063	.000006	.000000	.946739	3.099112
7	.284022	1.433070	.142050	.292998	.000059	.000010	.000187	.000012	.000000	.946739	3.099147
8	.283467	1.432939	.141818	.293553	.000133	.000018	.000510	.000021	.000001	.946739	3.099246
9	.282212	1.432834	.141272	.294308	.000277	.000028	.001290	.000033	.000001	.946739	3.099494
10	.279567	1.432561	.140093	.297453	.000547	.000043	.003014	.000038	.000001	.946739	3.100654
11	.274471	1.432121	.137773	.302549	.000962	.000056	.006455	.000061	.000000	.946739	3.101187
12	.268690	1.431485	.135707	.311330	.001585	.000070	.012541	.000066	.000000	.946739	3.103212
13	.252459	1.430670	.127503	.324561	.002392	.000078	.021880	.000055	.000000	.946739	3.106336
14	.235288	1.429750	.119377	.341732	.003312	.000078	.034129	.000035	.000000	.946739	3.110439
15	.216029	1.428822	.110208	.360991	.004246	.000071	.047934	.000018	.000000	.946739	3.115058
16	.196923	1.427960	.101082	.380097	.005117	.000062	.061651	.000009	.000000	.946739	3.119640
17	.179596	1.427201	.092793	.397424	.005885	.000054	.074096	.000004	.000000	.946739	3.123793
18	.164777	1.426554	.085704	.412243	.006540	.000046	.084736	.000002	.000000	.946739	3.127341
19	.152544	1.426012	.079856	.424476	.007088	.000041	.093511	.000002	.000000	.946739	3.130267
20	.142643	1.425563	.075127	.434377	.007541	.000036	.100605	.000001	.000000	.946739	3.132632
21	.134709	1.425194	.071343	.442311	.007913	.000033	.106282	.000001	.000000	.946739	3.134525
22	.128380	1.424892	.068328	.448640	.008218	.000031	.110804	.000001	.000000	.946738	3.136052
23	.123337	1.424646	.065929	.453603	.008466	.000029	.114404	.000001	.000000	.946738	3.137232
24	.119315	1.424445	.064018	.457705	.008669	.000027	.117271	.000000	.000000	.946739	3.138188
25	.116104	1.424261	.062493	.460916	.008833	.000026	.119558	.000000	.000000	.946739	3.138950
26	.113535	1.424148	.061275	.463485	.008967	.000025	.121385	.000000	.000000	.946739	3.139559
27	.111477	1.424041	.060299	.465543	.009073	.000024	.122849	.000000	.000000	.946739	3.140047

23	.109906	1.423953	.0595	.467194	.009163	.000024	.124025	.000000	.000000	.946739	3.140438
29	.109908	1.423332	.058888	.468522	.009235	.000023	.124966	.000000	.000000	.946739	3.140753
30	.107929	1.423024	.058382	.469591	.009293	.000023	.125724	.000000	.000000	.946739	3.141005
31	.106509	1.423778	.057975	.470451	.009339	.000023	.126335	.000000	.000000	.946739	3.141209
32	.105874	1.423740	.057647	.471146	.009377	.000022	.126828	.000000	.000000	.946739	3.141373
33	.105314	1.423709	.057382	.471706	.009408	.000022	.127225	.000000	.000000	.946739	3.141505
34	.104861	1.423634	.057168	.472159	.009433	.000022	.127546	.000000	.000000	.946739	3.141612
35	.104495	1.423664	.056995	.472525	.009453	.000022	.127805	.000000	.000000	.946739	3.141699
36	.104200	1.423648	.056855	.472820	.009470	.000022	.128015	.000000	.000000	.946739	3.141769
37	.103960	1.423635	.056742	.473060	.009483	.000022	.128184	.000000	.000000	.946739	3.141826
38	.103767	1.423624	.056651	.473253	.009494	.000022	.128322	.000000	.000000	.946739	3.141872
39	.103610	1.423615	.056577	.473410	.009503	.000022	.128432	.000000	.000000	.946739	3.141908
40	.103484	1.423608	.056517	.473536	.009510	.000022	.128522	.000000	.000000	.946739	3.141938
41	.103381	1.423603	.056469	.473639	.009515	.000022	.128595	.000000	.000000	.946739	3.141962
42	.103298	1.423598	.056430	.473722	.009520	.000022	.128654	.000000	.000000	.946739	3.141982
43	.103231	1.423594	.056394	.473789	.009524	.000022	.128701	.000000	.000000	.946739	3.141997
44	.103176	1.423591	.056372	.473843	.009527	.000022	.128740	.000000	.000000	.946739	3.142010
45	.103132	1.423589	.056351	.473887	.009529	.000022	.128771	.000000	.000000	.946738	3.142020
46	.103097	1.423586	.056335	.473923	.009531	.000022	.128796	.000000	.000000	.946738	3.142029
47	.103068	1.423585	.056321	.473952	.009533	.000022	.128817	.000000	.000000	.946739	3.142036
48	.103045	1.423584	.056310	.473975	.009534	.000022	.128833	.000000	.000000	.946739	3.142041
49	.103026	1.423583	.056301	.473994	.009535	.000022	.128847	.000000	.000000	.946739	3.142047
50	.103010	1.423582	.056294	.474010	.009536	.000022	.128854	.000000	.000000	.946739	3.142050
51	.102998	1.423581	.056288	.474022	.009537	.000022	.128867	.000000	.000000	.946739	3.142053
52	.102988	1.423581	.056283	.474032	.009537	.000022	.128874	.000000	.000000	.946739	3.142055
53	.102980	1.423580	.056279	.474040	.009538	.000022	.128879	.000000	.000000	.946739	3.142057
54	.102973	1.423580	.056276	.474047	.009538	.000022	.128884	.000000	.000000	.946739	3.142058
55	.102968	1.423579	.056273	.474052	.009538	.000022	.128888	.000000	.000000	.946739	3.142059
56	.102963	1.423579	.056271	.474056	.009539	.000022	.128891	.000000	.000000	.946738	3.142060
57	.102960	1.423579	.056270	.474060	.009539	.000022	.128894	.000000	.000000	.946739	3.142061
58	.102957	1.423579	.056268	.474063	.009539	.000022	.128896	.000000	.000000	.946739	3.142062

59	.102955	1.423579	.056267	.474065	.009539	.000022	.128897	.000000	.000000	.946738	3.142063
60	.102953	1.423579	.056266	.474067	.009539	.000022	.128899	.000000	.000000	.946738	3.142063
61	.102951	1.423579	.056266	.474069	.009539	.000022	.128900	.000000	.000000	.946738	3.142063
62	.102950	1.423579	.056265	.474070	.009539	.000022	.128900	.000000	.000000	.946738	3.142063
63	.102949	1.423579	.056265	.474071	.009539	.000022	.128901	.000000	.000000	.946738	3.142064
64	.102948	1.423579	.056264	.474071	.009539	.000022	.128902	.000000	.000000	.946739	3.142064
65	.102948	1.423579	.056264	.474072	.009540	.000022	.128902	.000000	.000000	.946738	3.142064
66	.102947	1.423579	.056264	.474073	.009540	.000022	.128903	.000000	.000000	.946739	3.142065
67	.102947	1.423578	.056264	.474073	.009540	.000022	.128903	.000000	.000000	.946739	3.142065
68	.102946	1.423578	.056263	.474074	.009540	.000022	.128903	.000000	.000000	.946739	3.142065
69	.102946	1.423578	.056263	.474074	.009540	.000022	.128903	.000000	.000000	.946739	3.142065
70	.102946	1.423578	.056263	.474074	.009540	.000022	.128903	.000000	.000000	.946739	3.142064
71	.102946	1.423579	.056263	.474074	.009540	.000022	.128904	.000000	.000000	.946739	3.142065
72	.102945	1.423579	.056263	.474074	.009540	.000022	.128904	.000000	.000000	.946739	3.142065
73	.102945	1.423579	.056263	.474075	.009540	.000022	.128904	.000000	.000000	.946739	3.142065
74	.102945	1.423578	.056263	.474075	.009540	.000022	.128904	.000000	.000000	.946739	3.142065

COMPOSICION DEL SISTEMA EN EL FUENTE

COMPUESTO	FLUJO MOLAR	PORCIENTO MOL
H2S	.10294522	3.2764
CO2	1.42357837	45.3071
SO2	.05626271	1.7906
H2O	.47407473	15.0080
CO5	.00953964	.3036
CS2	.00002151	.0007
S2	.12890383	4.1025
S6	.00000024	.0000
S8	.00000000	.0000
N2	.94673892	30.1311

PORCIENTO DE CONVERSION = 62.68

TEMPERATURA DE BOCIO = 544.238 GRADOS KELVIN

CALCULO DE LAS CONCENTRACIONES AL EQUILIBRIO EN LOS REACTOMES DEL PROCESO CLAUSS  
 POR EL METODO DE MINIMIZACION DE ENERGIA LIBRE

DATOS DEL SISTEMA:

NUMERO DE COMPONENTES (N) = 10

NUMBRE DE LOS COMPONENTES: ACIDO SULFIDRICO, BIOXIDO DE CARBONO, BIOXIDO DE AZUFRE, AGUA, SULFURO DE CARBONILO, DISULFURO DE CARBONO, AZUFRE DIATOMICO, AZUFRE HEXAATOMICO, AZUFRE OCTAATOMICO Y NITROGENO

NUMERO DE LOS ELEMENTOS QUE CONSTITUYEN LOS COMPONENTES (M) = 5

NUMBRE DE LOS ELEMENTOS: HIDROGENO, NITROGENO, CARBONO, OXIGENO Y AZUFRE

PRESION TOTAL DEL SISTEMA (ATMOSFERAS) = 1.00

TEMPERATURA ULL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO (GRADOS KELVIN) = 1200.0000

RELACION DE H2S/SO2 = 2.0

COMPOSICION DE LA ALIMENTACION AL REACTOR (Y(I))

COMPULESTO FLUJO MOLAR

H2S .284400

CO2 1.433140

SO2 .142200

H2O .292620

CO5 .000000

CS2 .000000

S2 .000000

S6 .000000

S8 .000000

N2 .346740



20	.096093	1.421967	.0546	.471927	.011138	.000034	.13132	.000000	.000000	.946739	3.142072
29	.096824	1.421082	.054056	.480196	.011225	.000033	.132214	.000000	.000000	.946739	3.143169
30	.095803	1.421812	.053581	.481217	.011295	.000033	.132928	.000000	.000000	.946739	3.143406
31	.094932	1.421755	.053198	.482038	.011352	.000032	.133501	.000000	.000000	.946739	3.143597
32	.094320	1.421709	.052890	.482699	.011398	.000032	.133963	.000000	.000000	.946739	3.143751
33	.093787	1.421672	.052642	.483233	.011436	.000032	.134336	.000000	.000000	.946739	3.143876
34	.093356	1.421642	.052442	.483664	.011466	.000031	.134637	.000000	.000000	.946739	3.143976
35	.093008	1.421617	.052280	.484012	.011491	.000031	.134879	.000000	.000000	.946739	3.144057
36	.092727	1.421597	.052149	.484293	.011511	.000031	.135075	.000000	.000000	.946739	3.144123
37	.092499	1.421581	.052043	.484521	.011527	.000031	.135234	.000000	.000000	.946739	3.144176
38	.092316	1.421569	.051958	.484704	.011540	.000031	.135362	.000000	.000000	.946739	3.144218
39	.092167	1.421558	.051889	.484853	.011551	.000031	.135466	.000000	.000000	.946739	3.144253
40	.092046	1.421550	.051833	.484974	.011559	.000031	.135550	.000000	.000000	.946739	3.144281
41	.091949	1.421543	.051788	.485071	.011566	.000031	.135618	.000000	.000000	.946739	3.144304
42	.091870	1.421538	.051751	.485150	.011572	.000031	.135673	.000000	.000000	.946739	3.144323
43	.091806	1.421533	.051721	.485213	.011576	.000031	.135717	.000000	.000000	.946739	3.144338
44	.091755	1.421529	.051697	.485265	.011580	.000031	.135753	.000000	.000000	.946740	3.144350
45	.091713	1.421526	.051678	.485307	.011583	.000031	.135782	.000000	.000000	.946739	3.144359
46	.091679	1.421524	.051662	.485341	.011585	.000031	.135806	.000000	.000000	.946739	3.144367
47	.091652	1.421522	.051649	.485368	.011587	.000031	.135825	.000000	.000000	.946739	3.144373
48	.091629	1.421520	.051639	.485390	.011589	.000031	.135841	.000000	.000000	.946739	3.144378
49	.091611	1.421519	.051631	.485409	.011590	.000031	.135853	.000000	.000000	.946739	3.144383
50	.091597	1.421518	.051624	.485423	.011591	.000030	.135863	.000000	.000000	.946739	3.144386
51	.091585	1.421517	.051618	.485435	.011592	.000030	.135871	.000000	.000000	.946739	3.144388
52	.091576	1.421516	.051614	.485444	.011593	.000030	.135878	.000000	.000000	.946739	3.144390
53	.091568	1.421516	.051610	.485452	.011594	.000030	.135884	.000000	.000000	.946739	3.144391
54	.091562	1.421515	.051607	.485458	.011594	.000030	.135888	.000000	.000000	.946739	3.144393
55	.091556	1.421515	.051605	.485463	.011594	.000030	.135891	.000000	.000000	.946739	3.144394
56	.091552	1.421515	.051603	.485468	.011595	.000030	.135894	.000000	.000000	.946739	3.144396
57	.091549	1.421514	.051601	.485471	.011595	.000030	.135897	.000000	.000000	.946739	3.144396
58	.091546	1.421514	.051600	.485474	.011595	.000030	.135898	.000000	.000000	.946739	3.144397

59	.091544	1.421514	.051599	.485476	.011595	.000030	.135900	.000000	.000000	.946739	3.144398
60	.091542	1.421513	.051599	.485478	.011595	.000030	.135901	.000000	.000000	.946739	3.144398
61	.091541	1.421513	.051598	.485479	.011595	.000030	.135902	.000000	.000000	.946739	3.144398
62	.091540	1.421513	.051597	.485480	.011595	.000030	.135903	.000000	.000000	.946739	3.144399
63	.091539	1.421513	.051597	.485481	.011596	.000030	.135904	.000000	.000000	.946739	3.144399
64	.091538	1.421513	.051596	.485482	.011596	.000030	.135904	.000000	.000000	.946739	3.144399
65	.091537	1.421513	.051596	.485482	.011596	.000030	.135905	.000000	.000000	.946739	3.144399
66	.091537	1.421513	.051596	.485483	.011596	.000030	.135905	.000000	.000000	.946739	3.144399
67	.091537	1.421513	.051596	.485483	.011596	.000030	.135905	.000000	.000000	.946739	3.144399
68	.091536	1.421513	.051596	.485484	.011596	.000030	.135906	.000000	.000000	.946739	3.144399
69	.091536	1.421513	.051595	.485484	.011596	.000030	.135906	.000000	.000000	.946739	3.144399
70	.091536	1.421513	.051595	.485484	.011596	.000030	.135906	.000000	.000000	.946739	3.144400
71	.091536	1.421514	.051595	.485484	.011596	.000030	.135906	.000000	.000000	.946739	3.144400
72	.091536	1.421514	.051595	.485484	.011596	.000030	.135906	.000000	.000000	.946739	3.144400
73	.091536	1.421514	.051595	.485484	.011596	.000030	.135906	.000000	.000000	.946739	3.144400
74	.091536	1.421513	.051595	.485484	.011596	.000030	.135906	.000000	.000000	.946739	3.144399
75	.091536	1.421513	.051594	.485484	.011596	.000030	.135906	.000000	.000000	.946739	3.144399
76	.091536	1.421514	.051594	.485484	.011596	.000030	.135906	.000000	.000000	.946739	3.144400

COMPOSICION DEL SISTEMA EN EL EQUILIBRIO

COMPUESTO	FLUJO MOLAR	PORCIENTO MOL
H2S	.09153535	2.9111
CO2	1.42151400	45.2078
SO2	.05159451	1.6408
H2O	.00444454	15.4397
COS	.01159509	.3688
CS2	.00003047	.0010
S2	.13590036	4.3222
SO	.00000003	.0000
SH	.00000000	.0000
N2	1.94673886	30.1087

PORCIENTO DE CONVERSION = 66.45

TEMPERATURA DE PROCIO = 545.826 GRADOS KELVIN

CAPITULO VIC O N C L U S I O N E S

La aplicación del método de minimización de energía libre para encontrar la distribución de los compuestos en el equilibrio a una presión y temperatura determinada en los sistemas de reacción estudiados en los capítulos anteriores es muy aceptable, ya que se tuvo la oportunidad de compararlos con respecto al método clásico de constantes de equilibrio (como fué el caso del sistema Metano Agua). También al analizar el comportamiento de los reactores en plantas de azufre, se obtuvieron magníficos resultados, ya que como se pudo observar en el capítulo anterior, tanto resultados como gráficas obtenidos de los diferentes programas de computadora que simularon el comportamiento de los reactores, son idénticos a la literatura (1,14). Además se comprobó que la presencia del COS y CS<sub>2</sub> es pequeña, que realmente no afectan a las demás especies en el equilibrio.

Al hacer un análisis detallado de las diferentes variables que se estudiaron y que intervienen en el diseño del reactor se llegó a la siguiente conclusión:

1.- Relación H<sub>2</sub>S/SO<sub>2</sub>

Se encontró que la relación óptima es de 2.0 para todos los casos estudiados (ya que las máximas conversiones a diferentes temperaturas y presiones fue utilizando esta rela

ción).

## 2.- Conversión de los reactores catalíticos.

Las máximas conversiones se lograron operando a temperaturas bajas, tanto como lo permita la temperatura de rocío de la mezcla efluente del reactor. El nivel de temperatura óptimo fué de  $480^{\circ}\text{K}$  a  $500^{\circ}\text{K}$ .

## 3.- Presión total del sistema de reacción.

En los sistemas estudiados se observó que al incrementarse la presión en el sistema, se obtienen mejores conversiones para cualquier relación  $\text{H}_2\text{S}/\text{SO}_2$  utilizada, esto es operando los reactores a bajas temperaturas ( $500^{\circ}\text{K}$ ). Esto se debe a que al incrementarse la presión, la temperatura de rocío se abate, lo cual permite al sistema operar a temperaturas más bajas y por lo consiguiente lograr mejores conversiones.

## 4.- Temperatura de rocío.

El comportamiento de la temperatura de rocío en los reactores fue de que al aumentar la presión total del sistema, ésta se abate y también el efecto contrario o sea de que al bajar la presión la temperatura de rocío se incrementa.

## 5.- Distribución de las especies moleculares del azufre.

De los resultados obtenidos de los diferentes programas -- que simularon el comportamiento de los reactores, se puede

observar que la distribución de las diferentes especies moleculares del azufre, siguen el mismo comportamiento establecido por la literatura (1).

#### 6.- Presencia de COS y CS<sub>2</sub>

Se analizó la presencia de COS y CS<sub>2</sub> en los reactores y se llegó a la conclusión de que la cantidad formada de estos dos compuestos es muy pequeña. Para evitarse el problema de formación de COS y CS<sub>2</sub> es recomendable operar los reactores a bajas temperaturas.

Para concluir, este método es de suma utilidad cuando se trata de estudiar un sistema de reacción de la cual se desconoce la estequiometría de la reacción, como fue el caso de los reactores en las plantas de azufre.

CAPITULO VIIB I B L I O G R A F I A

1. B.W. Gamson and R.H. Elkins  
"Sulfur from Hydrogen Sulfide"  
Chemical Engineering Progress  
Vol. 49, No. 4, Abril 1953, p. 203
2. R.C. Oliver, S.E. Stephanou and R.W. Baier  
"Calculating Free - Energy Minimization"  
Chemical Engineering  
Febrero 19 (1962), p. 121
3. W.B. White, S.M. Johnson and G.B. Dantzing  
"Chemical Equilibrium in Complex Mixtures"  
The Journal of Chemical Physics  
Vol. 28, No. 5, Mayo 1958, p. 751.
4. National Bureau of Standards  
"Selected Values of Chemical Thermodynamics Properties"  
Serie III  
Marzo 31 (1947), Washington, D.C.
5. H.A. Bennett and A. Meisen  
"Hydrogen Sulfide - Air Equilibria Under Claus Furnace  
Conditions"  
The Canadian Journal of Chemical Engineering  
Vol. 51, Diciembre 1973, p. 720

6. Ricardo Zepeda Galvez  
"Simulación de una Planta Recuperadora de Azufre por el método de Simplex Evop"  
Tesis  
UNAM , 1968
7. Frank J. Zeleznik and Sanford Gordon  
"Calculation of Complex Chemical Equilibria"  
Industrial and Engineering Chemistry  
Vol. 60, No. 6, Junio 1968, p. 27
8. Huff, V.N., Gordon, S., Morell, V.E.,  
"General Method and Thermodynamic Tables for Computation of Equilibrium Composition and Temperature of Chemical Reaction".  
NACA, Reporte 1037  
1951
9. A.H. Boas and R.C. Andrade  
"Simulate Sulfur Recovery Plant"  
Hydrocarbon Processing  
Marzo 1971, p. 81
10. Harold J. Kandiner and Stuart R. Brinkley, Jr.  
"Calculation of Complex Equilibrium Relations"  
Industrial and Engineering Chemistry  
Vol. 42, 1950, p. 850.

11. P.C. Opekar and B.G. Goar  
"This Computer Program Optimezes Sulfur Plant Design and  
Operation"  
Hydrocarbon Processing  
Vol. 45, No. 6, Junio 1966, p. 181
  
12. Barnett F. Dodge  
"Chemical Engineering Thermodynamics"  
McGraw-Hill Book Co.  
1944
  
13. George Boyd Allen  
"Computation of Multicomponet, Multi-Phase Equilibrium"  
The University of Tulsa  
1973
  
14. Frederick G. Sawyer and Rodney N. Hader  
"Sulfur from Sour Gases"  
Industrial and Engineering Chemistry  
Vol. 42, No. 10, Octubre 1950, p. 1938
  
15. A.R. Valdes, Brown & Root, Inc., Houston  
"New Look at Sulfur Plants" Part 1  
Hydrocarbon Processing  
Vol. 43, No. 3, Marzo 1964, p. 104

16. A.R. Valdes, Brown & Root, Inc., Houston  
"New Look at Sulfur Plants" Part 2  
Vol. 43, No. 4, Abril 1964, p. 122
  
17. F.J. Krieger and W.B. White  
"A Simplified for Computing the Equilibrium Composition  
of Gaseous Systems"  
The Journal of Chemical Physics  
Vol. 16, No. 4, Abril 1948, p. 358
  
18. Stuart R. Brinkley, Jr.  
"Calculation of the Equilibrium of Systems of Many  
Constituents"  
The Journal of Chemical Physics  
Vol. 15, No. 2, Febrero 1947, p. 107
  
19. W.N. Tuller  
"The sulfur Data Book"  
(Freeport Sulfur Co.)  
McGraw Hill  
1954
  
20. James R. West  
"Thermodynamics Properties of Sulfur"  
Industrial and Engineering Chemistry  
Vol. 42, No. 4, Abril 1950, p. 713

21. Kennet A. Kobe and John J. Mcketta  
"Advances in Petroleum Chemistry and Refining"  
Vol. VI  
Interscience Publishers  
New York - London 1962
22. B. Gene Goar  
"Today's Sulfur Recovery Processes"  
Hydrocarbon Processing  
Vol. 47, No. 9, Septiembre 1968, p. 248
23. B. Gene Goar  
"Sulfur Recovery from Natural Gas Involves Big Investment"  
The Oil and Gas Journal  
Julio 14 (1975), p. 78
24. W.S. Norman  
"There are to Smoother Operation of Sulfur Plants"  
The Oil and Gas Journal  
Noviembre 15 (1976), p. 55
25. Andrew G. Chute  
"Taylor Sulfur Plants to Unusual Conditions"  
Hydrocarbon processing  
Abril 1977, p. 119

26. Robert A. Burns and Regis B. Lippert  
"Choose Catalyst Objectively"  
Hydrocarbon Processing  
Noviembre 1974, p. 181
27. M.J. Pearson  
"Developments in Claus Catalysts"  
Hydrocarbon Processing  
Febrero 1973, p. 81
28. Maxime Graulier and Dennis Papee  
"Optimization of a Claus Unit - Aging and Regeneration  
Mechanisms"  
Energy Processing/Canada  
Marzo-Abril 1974, p. 32
29. Dr. I.G. Dalla Lana  
"Chemically Modified Catalysts Found Superior"  
Gas Processing/Canada  
Enero-Febrero 1971, p. 36
30. Kenneth S. Pitzer and Leo Brewer  
Thermodynamics  
Second Edition  
McGraw-Hill Kogakusha
31. John H. Perry  
"Chemical Engineer's Handbook"  
Fifth Edition  
McGraw-Hill Kogakusha

32. C.S. Goddin, E.B. Hunt and J.W. Palm, Amoco Production Co.

"CBA Process Ups Claus Recovery"

Hydrocarbon Processing

Octubre 1974

**ESTE TRABAJO SE IMPRIMIO EN LOS TALLERES  
GRAFICOS DE GUADARRAMA IMPRESORES, S. A.  
AV. CUAUHTEMOC 1201, COL. VERTIZ NARVARTE  
MEXICO 13, D. F. TEL. 568 22 77 CON TRES LINEAS**

