

41 2ej



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO**

FACULTAD DE QUIMICA

**ANALISIS DE PROCESOS MEDIANTE
BALANCES DE EXERGIA**



EXAMENES PROFESIONALES
FAC. DE QUIMICA

T E S I S

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



MEXICO, D. F.



1990



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

INDICE

INTRODUCCION	...1
-Objetivos.	...2
-La necesidad de ahorrar energia.	...2
-Concepto de exergia.	...3
-Ventajas del análisis exergetico.	...4
CAPITULO I.	
EVALUACION DE PROPIEDADES TERMODINAMICAS.	...5
1.1. Relaciones de Maxwell.	...6
1.2. Evaluación de propiedades de gases ideales.	...11
1.3. Cálculo de las desviaciones de la idealidad con ecuaciones de estado cúbicas.	...15
1.4. Equilibrio fisico.	...20
1.5. Expansión flash.	...21
1.6. Cálculo de equipos de proceso.	...28
CAPITULO II.	
TRABAJO PERDIDO Y SEGUNDA LEY DE LA TERMODINAMICA.	...30
2.1. Segunda Ley de la Termodinámica.	...31
2.2. Trabajo mínimo y trabajo perdido.	...37
CAPITULO III.	
DISPONIBILIDAD Y EXERGIA.	...44
3.1. Disponibilidad.	...45
3.2. Exergia.	...47
3.3. Balances de exergia, trabajo mínimo y trabajo perdido.	...49
3.4. Cálculo de la exergia física de una corriente.	...51
3.5. Cálculo de la exergia química de una corriente.	...52
3.6. Cálculo de la exergia total de una corriente.	...61

CAPITULO IV.

METODOS PARA REALIZAR BALANCES DE EXERGIA.	...62
4.1. Método a través de la unidad.	...63
4.2. Método del conocimiento de la corriente.	...66
4.3. Estrategias para operaciones unitarias.	...68
4.4. Interpretación de resultados.	...72

CAPITULO V.

METODO A TRAVES DE LA UNIDAD (SEPARACION PROPANO-PROPILENO)	...75
5.1. Presentación del problema.	...76
5.2. Caso A. Utilizando un sistema de refrigeración.	...79
5.3. Caso B. Utilizando una bomba de calor.	...83
5.4. Caso C. Expansión del líquido de fondos.	...87
5.5. Interpretación de resultados.	...90

CAPITULO VI.

METODO DEL CONOCIMIENTO DE LA CORRIENTE (PLANTA DE PRODUCCION DE AMONIACO)	...92
6.1. Descripción del problema.	...93
6.2. Reformador primario.	...96
6.3. Reformador secundario.	...105
6.4. Convertidores de CO.	...111
6.5. Interpretación de resultados.	...115

CONCLUSIONES	...117
--------------	--------

BIBLIOGRAFIA.	...121
---------------	--------

APENDICE.

PROGRAMA PARA EL CALCULO DE LA EXERGIA.	...125
EXERGIA. BAS	...138
CONSTAN. BAS	...139
SISTEMA. BAS	...145
DEFCORR. BAS	...152
EXPFLASH. BAS	...154
INTERCAM. BAS	...155
BOMBA. BAS	...158
TURBCOMP. BAS	...160
BANCO. BAS	...162
FLASH. BAS	...176
PROPS. BAS	...183
ZETAS. BAS	...187
UTIL. BAS	...189
IMPRE. BAS	...192

INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS.

- Establecer las bases y técnicas para el análisis termodinámico de procesos.
- Mostrar la utilidad del análisis exergetico como una herramienta para el ahorro de energia.
- Elaborar un programa de microcomputadora para el cálculo de exergía.

LA NECESIDAD DE AHORRAR ENERGIA.

La crisis petrolera mundial en la década de los 70's provocó un aumento acelerado del precio de los energéticos y, por lo tanto, en los costos de operación de los procesos. Para disminuir estos costos se buscó una reducción del consumo de energia en la industria por diferentes métodos, entre los cuales está el análisis exergetico.

Durante la década de los 80's el precio del crudo tuvo variaciones fuertes, llegando a una estabilidad de alrededor de 17 dólares por barril. Este precio se mantendrá algunos años, pero aumentará unos 8 dólares para la mitad de los 90's y superará los 30 dólares por barril a finales del siglo.¹

La demanda mundial de petróleo aumentará a razón de 1.5% anual y la de energéticos a razón del 2% anual. Para satisfacer este incremento no se tiene un futuro muy prometedor, ya que la producción de petróleo en los Estados Unidos caerá más de 2 millones de barriles por día con respecto a 1987. Por otro lado, no se incrementará la capacidad de las plantas nucleares y algunas que están en construcción no serán terminadas ni puestas en operación. La única fuente de energia que tendrá una fuerte contribución para el suplemento de esta demanda será la termoeléctrica.

¹Hydrocarbon Processing, Julio 1989, PP. 15

Por ello, el análisis termodinámico y otras técnicas de ahorro de energía están imponiéndose como una buena herramienta en el diseño y auditoría de las instalaciones industriales. Esto lo demuestra el incremento de publicaciones que sobre el tema han aparecido. En el caso del análisis exergético, de un número de 270 publicaciones anteriores a 1970 a 280 durante esa década y de 380 entre 1977 y 1993.

CONCEPTO DE EXERGIA.

La exergía se define como el trabajo disponible en un fluido o masa como resultado de su desviación del punto de equilibrio con un estado o condición de referencia que se denomina estado muerto.

En 1885, Gibbs fue el primero en conceptualizar lo que él llamó Trabajo Perdido. En 1889, Gouy propuso el uso de una función termodinámica para su manejo. Posteriormente, en 1935, F. Bosnjakovic aplica *Technische Arbeitsfähigkeit* (capacidad de trabajo técnico). En 1951, Joseph H. Keenan propuso una función termodinámica y la llamó Availability (disponibilidad). Más tarde, en 1953, E. Schmidt se refirió al concepto como *Technische Maximale Arbeit* (trabajo técnico máximo). En 1954, U. Grigull propuso utilizar el término *Ectalpia* (rendimiento calorífico), y en 1955, Gilbert propuso la *Energie Dégradée en Chaleur* (energía degradada en calor). Finalmente, en 1956, el yugoslavo Z. Rant utilizó el término Exergía, que por su significado etimológico, trabajo que puede ser extraído, tuvo aceptación a nivel internacional.²

² Lartiga O., J.; Herrera M., G. / ¿Qué es la Exergía? / Gaceta Fac. Químico, UNAM. Mayo 1989.

VENTAJAS DEL ANALISIS EXERGETICO.

El empleo de los balances de exergía no sustituye al análisis energético clásico. Sin embargo, al utilizarlo como complemento, nos proporciona el criterio de decisión para diseñar y optimizar el consumo de energía en los procesos industriales, ya que la exergía es la parte de la energía capaz de producir trabajo, cuantificando la calidad del proceso desde el punto de vista termodinámico.

El principal objetivo del análisis exergetico es detectar y cuantificar las imperfecciones termodinámicas en procesos mecánicos, térmicos y químicos. Este análisis nos proporciona un punto de comparación entre las diferentes alternativas de un proceso.

Sin embargo, contrario a lo que se piensa, al realizar balances de exergía no se soluciona el problema de ahorro de energía, sino que esta solución debe proponerse mediante algún otro método. Posteriormente, al realizar este tipo de balances a la alternativa propuesta, se compara el consumo y utilización de energéticos en el proceso.

El análisis termodinámico de procesos está basado en la primera y segunda leyes de la termodinámica. Se realizan balances de energía, basados en el principio de conservación que se plantea en la primera ley, y balances de exergía que, según la segunda ley, evalúan cuantitativamente la degradación de la energía.

CAPÍTULO I. EVALUACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS.

1.1. RELACIONES DE MAXWELL.

Para calcular las propiedades termodinámicas de una corriente es necesario conocer la variación de éstas con respecto a las variables que determinan su estado: temperatura, presión y composición. Estas variaciones son conocidas como *relaciones de Maxwell* y se obtienen a partir de la primera y segunda leyes de la termodinámica.

Tomando el balance diferencial de energía para un sistema cerrado:

$$dU = dQ + dW \quad \dots(1.1)$$

y sustituyendo el balance diferencial de entropía para un proceso reversible:

$$dQ = T dS \quad \dots(1.2)$$

y la definición de trabajo:

$$dW = -P dV \quad \dots(1.3)$$

se obtiene:

$$dU = T dS - P dV \quad \dots(1.4)$$

Si se toma a la energía interna como una función de entropía y volumen, $U=U(S,V)$, la expresión diferencial para la energía interna es:

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_V dS + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_S dV \quad \dots(1.5)$$

y por analogía con la ecuación 1.4, se obtiene:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_V = T \quad \dots(1.6)$$

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_S = -P \quad \dots(1.7)$$

que son conocidas como *relaciones primarias*.

Para ampliar la ecuación 1.5 a sistemas abiertos, se toma $U=U(S,V,N_1,N_2,\dots)$, quedando:

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_V dS + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_S dV + \sum_i \left(\frac{\partial U}{\partial N_i}\right)_{S,V,N_{j \neq i}} dN_i \quad \dots(1.8)$$

que según 1.6 y 1.7 se obtiene:

$$dU = TdS - PdV + \sum_i \mu_i dN_i \quad \dots(1.9)$$

donde μ_i es el potencial químico, definido por:

$$\mu_i = \left(\frac{\partial U}{\partial N_i}\right)_{S,V,N_{j \neq i}} \quad \dots(1.10)$$

La ecuación 1.9 es la relación fundamental para la energía interna. A partir de ella y la definición de las funciones termodinámicas se obtienen las relaciones fundamentales para éstas.

Tomando, por ejemplo, la definición de energía de Gibbs:

$$G = U + PV - TS \quad \dots(1.11)$$

su expresión diferencial será:

$$dG = dU + PdV + VdP - TdS - SdT \quad \dots(1.12)$$

sustituyendo la expresión diferencial para la energía interna, 1.9; se obtiene la relación fundamental para la energía de Gibbs:

$$dG = VdP - SdT + \sum_i \mu_i dN_i \quad \dots(1.13)$$

Considerando $G=G(T,P,N_i)$, obtenemos las siguientes relaciones primarias:

$$\left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_{T,N_i} = V \quad \dots(1.14)$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{P,N_i} = -S \quad \dots(1.15)$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial N_i}\right)_{T,P,N_{j \neq i}} = \mu_i \quad \dots(1.16)$$

Estas relaciones primarias son un paso intermedio en la búsqueda de las relaciones de Maxwell. Basándose en el hecho de que las segundas derivadas parciales cruzadas de las funciones son independientes del orden que se escoja para diferenciar, por ejemplo:

$$\frac{\partial^2 G}{\partial T \partial P} = \frac{\partial^2 G}{\partial P \partial T} \quad \dots(1.17)$$

que aplicado a las ecuaciones 1.15 y 1.14, derivando con respecto a P y T respectivamente, resulta:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P \quad \dots(1.18)$$

que es una de las relaciones de Maxwell buscadas.

Mediante un proceso similar se pueden obtener las otras relaciones de Maxwell que se resumen en la tabla 1.1.

De las relaciones de Maxwell obtenidas, las derivadas de S y μ con respecto a T, P y V son las de mayor utilidad en el cálculo de propiedades.

Para obtener las derivadas de las otras propiedades termodinámicas con respecto a estas variables se deriva directamente la ecuación de la función con respecto a la variable que se desea. Para eliminar las derivadas de entropía y potencial químico se sustituyen las relaciones de Maxwell necesarias.

Tabla 1.1. Relaciones de las propiedades termodinámicas.

$$dU = TdS - PdV + \sum_L \mu_L dN_L$$

Relaciones primarias

$$\left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_{V,N} = T$$

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_{S,N} = -P$$

$$\left(\frac{\partial U}{\partial N_L}\right)_{S,V,N_{j \neq L}} = \mu_L$$

Relaciones de Maxwell

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_{S,N} = -\left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_{V,N}$$

$$\left(\frac{\partial \mu_L}{\partial S}\right)_{V,N} = \left(\frac{\partial T}{\partial N_L}\right)_{S,V,N_{j \neq L}}$$

$$\left(\frac{\partial \mu_L}{\partial V}\right)_{S,N} = -\left(\frac{\partial P}{\partial N_L}\right)_{S,V,N_{j \neq L}}$$

$$\left(\frac{\partial \mu_L}{\partial N_k}\right)_{S,V,N_{j \neq k}} = \left(\frac{\partial \mu_k}{\partial N_L}\right)_{S,V,N_{j \neq k}}$$

$$dH = TdS + VdP + \sum_L \mu_L dN_L \quad H = U + PV$$

Relaciones primarias

$$\left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_{P,N} = T$$

$$\left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_{S,N} = V$$

$$\left(\frac{\partial H}{\partial N_L}\right)_{S,P,N_{j \neq L}} = \mu_L$$

Relaciones de Maxwell

$$\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_{S,N} = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_{P,N}$$

$$\left(\frac{\partial \mu_L}{\partial S}\right)_{P,N} = \left(\frac{\partial T}{\partial N_L}\right)_{S,P,N_{j \neq L}}$$

$$\left(\frac{\partial \mu_L}{\partial P}\right)_{S,N} = -\left(\frac{\partial V}{\partial N_L}\right)_{S,P,N_{j \neq L}}$$

$$\left(\frac{\partial \mu_L}{\partial N_k}\right)_{S,P,N_{j \neq k}} = \left(\frac{\partial \mu_k}{\partial N_L}\right)_{S,P,N_{j \neq k}}$$

Tabla 1.1. Continuación.

$dA = -SdT - PdV + \sum \mu_i dN_i$	$A = U - TS$
-------------------------------------	--------------

Relaciones primarias

$$\left(\frac{\partial A}{\partial T}\right)_{V,N} = -S \qquad \left(\frac{\partial A}{\partial V}\right)_{T,N} = -P \qquad \left(\frac{\partial A}{\partial N_i}\right)_{T,V,N_{j \neq i}} = \mu_i$$

Relaciones de Maxwell

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{T,N} = \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{V,N} \qquad \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial T}\right)_{V,N} = -\left(\frac{\partial S}{\partial N_i}\right)_{T,V,N_{j \neq i}}$$

$$\left(\frac{\partial \mu_i}{\partial V}\right)_{T,N} = -\left(\frac{\partial P}{\partial N_i}\right)_{T,V,N_{j \neq i}} \qquad \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial N_k}\right)_{T,V,N_{j \neq k}} = \left(\frac{\partial \mu_k}{\partial N_i}\right)_{T,V,N_{j \neq i}}$$

$dG = -SdT + VdP + \sum \mu_i dN_i$	$G = H - TS$
-------------------------------------	--------------

Relaciones primarias

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{P,N} = -S \qquad \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_{T,N} = V \qquad \left(\frac{\partial G}{\partial N_i}\right)_{T,P,N_{j \neq i}} = \mu_i$$

Relaciones de Maxwell

$$\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_{T,N} = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{P,N} \qquad \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial T}\right)_{P,N} = -\left(\frac{\partial S}{\partial N_i}\right)_{T,P,N_{j \neq i}}$$

$$\left(\frac{\partial \mu_i}{\partial P}\right)_{T,N} = \left(\frac{\partial V}{\partial N_i}\right)_{T,P,N_{j \neq i}} \qquad \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial N_k}\right)_{T,P,N_{j \neq k}} = \left(\frac{\partial \mu_k}{\partial N_i}\right)_{T,P,N_{j \neq i}}$$

Además se pueden utilizar las definiciones de calor específico:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = C_V \qquad \dots (1.18)$$

$$\left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P = C_P \qquad \dots (1.20)$$

Estas derivadas se resumen en la tabla 1.2.

Tabla 1.2. Derivadas de las funciones termodinámicas.

F	$\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{P, N_i}$	$\left(\frac{\partial F}{\partial P}\right)_{T, N_i}$	$\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V, N_i}$	$\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T, N_i}$
U	$C_p - P \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P$	$-T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P - P \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T$	C_v	$T \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V - P$
H	C_p	$V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P$	$C_v + V \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V$	$T \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V + V \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T$
S	$\frac{C_p}{T}$	$-\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P$	$\frac{C_v}{T}$	$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V$
G	$-S$	V	$-S + V \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V$	$V \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T$
A	$-S - P \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P$	$-P \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T$	$-S$	$-P$
μ_i	$-\bar{S}_i$	\bar{V}_i	$-\left(\frac{\partial S}{\partial N_i}\right)_{T, V, N_j \neq i}$	$-\left(\frac{\partial P}{\partial N_i}\right)_{T, V, N_j \neq i}$
$\ln f_i$	$-\frac{H_i - H_i^0}{RT^2}$	$\frac{\bar{V}_i}{RT}$	$\frac{\left(\frac{\partial U}{\partial N_i}\right)_{T, V, N_j \neq i} - H_i^0}{-RT^2}$	$\frac{\left(\frac{\partial P}{\partial N_i}\right)_{T, V, N_j \neq i}}{-RT^2}$

1.2. EVALUACION DE PROPIEDADES DE GASES IDEALES.

El primer paso es seleccionar un estado de referencia. Lo más común es tomar los componentes puros como gases ideales a 25°C y 1 atmósfera, utilizando la entalpía y entropía de formación estándar, h_f^0 y s_f^0 . La variación con respecto a la temperatura se obtiene utilizando las derivadas de la tabla 1.2 e integrando de 25°C hasta T, manteniendo P constante:

$$h_i^0(T, 1 \text{ atm}) = h_f^0 + \int_{25^\circ\text{C}}^T C_p^0 dT \quad \dots (1.21)$$

$$s^f(T, 1 \text{ atm}) = s_{\text{ref}}^f + \int_{25^\circ\text{C}}^T \frac{C_{p,i}^f}{T} dT \quad \dots (1.22)$$

La ecuación para el potencial químico del componente puro como gas ideal será:

$$\mu_{i,\text{puro}}^f(T, 1 \text{ atm}) = h_i^f(T, 1 \text{ atm}) - T s_i^f(T, 1 \text{ atm}) \quad \dots (1.23)$$

$$\mu_{i,\text{puro}}^f(T, 1 \text{ atm}) = h_{\text{ref}}^f - T s_{\text{ref}}^f + \int_{25^\circ\text{C}}^T C_{p,i}^f dT - T \int_{25^\circ\text{C}}^T \frac{C_{p,i}^f}{T} dT \quad \dots (1.24)$$

Para obtener la variación con respecto a P se sustituye la ecuación de estado del gas ideal:

$$PV = RT \quad \dots (1.25)$$

en las derivadas con respecto a P de la tabla 1.2. Se obtiene:

$$\left(\frac{\partial h_i^f}{\partial P} \right)_T = 0 \quad \dots (1.26)$$

$$\left(\frac{\partial s_i^f}{\partial P} \right)_T = - \frac{R}{P} \quad \dots (1.27)$$

Al integrar desde 1 atmósfera hasta P manteniendo T constante, el resultado es:

$$h_i^f(T, P) = h_{\text{ref}}^f + \int_{25^\circ\text{C}}^T C_{p,i}^f dT \quad \dots (1.28)$$

$$s_i^f(T, P) = s_{\text{ref}}^f + \int_{25^\circ\text{C}}^T \frac{C_{p,i}^f}{T} dT - R \ln \left(\frac{P}{1 \text{ atm}} \right) \quad \dots (1.29)$$

Como el calor de mezclado de gases ideales a T y P constantes es cero, las propiedades para mezclas de gases ideales son:

$$h^f(T, P) = \sum_i x_i \left[h_{\text{ref},i}^f + \int_{25^\circ\text{C}}^T C_{p,i}^f dT \right] \quad \dots (1.30)$$

$$s^f(T,P) = \sum_i x_i \left[s_{f,i} + \int_{25^\circ\text{C}}^T \frac{C_{p,i}^f}{T} dT - R \ln \left(\frac{P x_i}{1 \text{ atm}} \right) \right] \quad \dots(1.31)$$

y el potencial químico de la mezcla de gases ideales es:

$$\mu^f(T,P) = h^f(T,P) - T s^f(T,P) \quad \dots(1.32)$$

El potencial químico del componente i en la mezcla se obtiene de:

$$\mu_i^f(T,P) = \left[\frac{\partial}{\partial n_i} N_T \mu^f(T,P) \right]_{T,P,N_{j \neq i}} \quad \dots(1.33)$$

Sustituyendo la ecuación 1.32 y diferenciando se obtiene:

$$\mu_i^f(T,P) = h_{f,i} - T s_{f,i} + \int_{25^\circ\text{C}}^T C_{p,i}^f dT - T \int_{25^\circ\text{C}}^T \frac{C_{p,i}^f}{T} dT + RT \ln \left(\frac{P x_i}{1 \text{ atm}} \right) \quad \dots(1.34)$$

Los primeros cuatro términos de la derecha corresponden, según la ecuación 1.24, al potencial químico del componente puro evaluado a T y 1 atmósfera, quedando:

$$\mu_i^f(T,P) = \mu_{i,puro}^f(T,1 \text{ atm}) + RT \ln \left(\frac{P x_i}{1 \text{ atm}} \right) \quad \dots(1.35)$$

Si se evalúa la diferencia de potencial químico como gas ideal entre dos estados α y β a la misma temperatura y diferente presión parcial, el resultado es:

$$\mu_i^f [T, (P x_i)^\alpha] - \mu_i^f [T, (P x_i)^\beta] = RT \ln \frac{(P x_i)^\alpha}{(P x_i)^\beta} \quad \dots(1.36)$$

La ecuación anterior se extiende a gases reales y líquidos utilizando la definición de fugacidad, se obtiene:

$$\mu_i^\alpha - \mu_i^\beta = RT \ln \frac{\hat{f}_i^\alpha}{\hat{f}_i^\beta} \quad \dots(1.37)$$

y por analogía con la ecuación 1.36, la fugacidad del componente i en una mezcla de gases ideales es:

$$\hat{f}_i^g = P x_i \quad \dots(1.38)$$

En la tabla 1.3 se resume el cálculo de propiedades para gases ideales.

Tabla 1.3. Propiedades del gas ideal.

Datos: T, P, x_i

$$h^g(T, P) = \sum_i x_i \left[hf_{s,i} + \int_{25^\circ\text{C}}^T C_{p,i}^g dT \right]$$

$$s^g(T, P) = \sum_i x_i \left[sf_{s,i} + \int_{25^\circ\text{C}}^T \frac{C_{p,i}^g}{T} dT - R \ln \left(\frac{P x_i}{1 \text{ atm}} \right) \right]$$

$$\mu^g(T, P) = hf_{s,i} - T sf_{s,i} + \int_{25^\circ\text{C}}^T C_{p,i}^g dT - T \int_{25^\circ\text{C}}^T \frac{C_{p,i}^g}{T} dT + RT \ln \left(\frac{P x_i}{1 \text{ atm}} \right)$$

$hf_{s,i}$ = Entalpia estándar de formación de i a 25°C y 1 atm.

$sf_{s,i}$ = Entropía estándar de formación de i a 25°C y 1 atm.

$C_{p,i}^g$ = Capacidad calorífica del gas ideal a presión constante

$$C_{p,i}^g = A_i + B_i T + C_i T^2 + D_i T^3$$

1.3. CALCULO DE LAS DESVIACIONES DE LA IDEALIDAD CON ECUACIONES DE ESTADO CUBICAS.

Para calcular propiedades termodinámicas con ecuaciones de estado, se utilizan las derivadas de la tabla 1.2, sustituyendo la ecuación de estado que se desea utilizar. Aplicando las derivadas con respecto a P manteniendo T constante a las desviaciones de las propiedades de las del gas ideal se obtiene:

$$\frac{\partial(h-h^f)}{\partial P} = V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{P,N} \quad \dots(1.39)$$

$$\frac{\partial(s-s^f)}{\partial P} = - \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{P,N} + \frac{R}{P} \quad \dots(1.40)$$

$$\frac{\partial(\ln \hat{f}_i / P x_i)}{\partial P} = \frac{\bar{V}_i}{RT} - \frac{1}{P} \quad \dots(1.41)$$

Conforme la presión del sistema disminuye, el comportamiento del sistema se aproxima a la idealidad, por lo tanto, es válido integrar las ecuaciones anteriores utilizando como límites 0 y P; las integrales que se deben resolver son:

$$h(T,P) = h^f(T,P) + \int_0^P \left[V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{P,N} \right] dP \quad \dots(1.42)$$

$$s(T,P) = s^f(T,P) + \int_0^P \left[- \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{P,N} + \frac{R}{P} \right] dP \quad \dots(1.43)$$

$$\ln \frac{\hat{f}_i}{P x_i} = \int_0^P \left[\frac{\bar{V}_i}{RT} - \frac{1}{P} \right] dP \quad \dots(1.44)$$

En estas ecuaciones se sustituye la ecuación de estado de la forma:

$$V = V(T, P, X) \quad \dots (1.45)$$

Las ecuaciones de estado cúbicas son derivadas de la de Van der Waals, y su forma es:

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{V^2 + ubV + wb^2} \quad \dots (1.46)$$

Para obtener las desviaciones de la idealidad con este tipo de ecuaciones, $P=P(T, V, N_i)$, es necesario utilizar las derivadas con respecto a V manteniendo T constante. El límite para el gas ideal corresponde, en vez de $P=0$, a $V=\infty$. Las ecuaciones análogas a 1.42, 1.43 y 1.44 son:

$$h(T, P) = h^f(T, P) + \int_V^{\infty} \left[P - T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{V, N} \right] dV + PV - NRT \quad \dots (1.47)$$

$$s(T, P) = s^f(T, P) + \int_V^{\infty} \left[\frac{NR}{V} - \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{V, N} \right] dV + NR \ln \frac{PV}{NRT} \quad \dots (1.48)$$

$$\ln \frac{\hat{f}_i}{P x_i} = \int_V^{\infty} \left[\frac{1}{RT} \left(\frac{\partial P}{\partial N_i} \right)_{T, V, N_{j \neq i}} - \frac{1}{V} \right] dV - \ln \frac{PV}{NRT} \quad \dots (1.49)$$

Las ecuaciones de estado cúbicas de Soave y de Peng-Robinson predicen con un buen nivel de precisión las propiedades de compuestos no polares. En la tabla 1.4 se muestran estas dos ecuaciones, así como los resultados obtenidos al resolver las integrales de las ecuaciones 1.47, 1.48 y 1.49. Además se incluyen las derivadas con respecto a temperatura y presión, necesarias en el algoritmo de cálculo presentado en el apéndice. Se ha utilizado una notación abreviada en donde, por ejemplo, dA_i quiere decir dA_i/dT cuando debe derivarse con respecto a temperatura o dA_i/dP cuando se trata de derivadas con respecto a presión.

Tabla 1.4. Ecuaciones de Estado cúbicas

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{V^2 - ubV + wb^2}$$

$$A = \frac{aP}{(RT)^2}$$

$$B = \frac{bP}{RT}$$

Parámetros para cada ecuación:

	<u>SOAVE</u>	<u>PENG-ROBINSON</u>
u =	1	2
w =	0	-1
$\Omega_a =$	0.42748023	0.45723553
$\Omega_b =$	0.06396005	0.077796074
$C_1 =$	0.48	0.37464
$C_2 =$	1.574	1.54226
$C_3 =$	-0.176	-0.26992

Para cada componentes:

$$a_i = C_1 + C_2 \omega_i + C_3 \omega_i^2 \quad \alpha_i = \left[1 + m_i \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_{ci}}} \right) \right]^2$$

$$A_i = \Omega_a \left(\frac{P}{P_{ci}} \right) \left(\frac{T_{ci}}{T} \right)^2 \alpha_i \quad B_i = \Omega_b \left(\frac{P}{P_{ci}} \right) \left(\frac{T_{ci}}{T} \right)$$

Constantes de la mezcla:

$$B = \sum_i x_i B_i$$

$$SUMA_i = \sum_j x_j \sqrt{A_i A_j} (1 - k_{ij})$$

$$A = \sum_i x_i SUMA_i$$

$$A' = \sum_i \sum_j x_i x_j \sqrt{A_i A_j} (1 - k_{ij}) \left[m_i \sqrt{\frac{T}{\alpha_i T_{ci}}} + m_j \sqrt{\frac{T}{\alpha_j T_{cj}}} \right] \frac{1}{Z}$$

Resolver la ecuación cúbica para obtener Z:

$$Z^3 - Z^2(1 + B - uB) + Z(A + wB^2 - uB^2 - uB) - wB^3 - wB^2 - AB = 0$$

Tabla 1.4. Continuación.

Calculo de propiedades:

SOAVE

PENG-ROBINSON

$$z = \ln \frac{Z+B}{Z}$$

$$z = \frac{1}{2\sqrt{2}} \ln \frac{Z+B(1+\sqrt{2})}{Z+B(1-\sqrt{2})}$$

$$H(T,P) = H^s(T,P) + NRT \left[Z - 1 - \left(\frac{A}{B} + \frac{A'}{B} \right) z \right]$$

$$S(T,P) = S^s(T,P) + NR \left[\ln(Z-B) - \frac{A'}{B} z \right]$$

$$\frac{\hat{f}_i}{P x_i} = \hat{\phi}_i = \text{EXP} \left[\frac{B_i}{B} (Z-1) - \ln(Z-B) + \frac{A}{B} \left(\frac{B_i}{B} - 2 \frac{\text{SUMA}_i}{A} \right) z \right]$$

Derivadas con respecto a temperatura:

$$d\alpha_i = -m_i \left[\frac{1}{T \alpha_i T} \left[1 + m_i \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T \alpha_i}} \right) \right] \right]$$

$$dA_i = A_i \left(\frac{d\alpha_i}{\alpha_i} - \frac{2}{T} \right)$$

$$dB_i = -\frac{B_i}{T}$$

$$dB = \sum_i x_i dB_i$$

$$d\text{SUMA}_i = \sum_j x_j \frac{A_i dA_j + A_j dA_i}{2\sqrt{A_i A_j}} (1 - k_{ij})$$

$$dA = \sum_i x_i d\text{SUMA}_i$$

$$dA' = \frac{1}{4} \sum_{i,j} x_i x_j \left[A'' + \sqrt{A_i A_j} \left[m_i \sqrt{\frac{\alpha_i T \alpha_j}{T}} \frac{\alpha_i - T d\alpha_i}{T \alpha_i \alpha_j^2} + m_j \sqrt{\frac{\alpha_j T \alpha_i}{T}} \frac{\alpha_j - T d\alpha_j}{T \alpha_j \alpha_i^2} \right] \right] (1 - k_{ij})$$

donde:

$$A'' = \frac{A_i dA_j + A_j dA_i}{2\sqrt{A_i A_j}} \left[m_i \sqrt{\frac{T}{\alpha_i T \alpha_i}} + m_j \sqrt{\frac{T}{\alpha_j T \alpha_j}} \right]$$

$$dZ = \frac{dB[Z^2(1-u) - Z(2wB - 2uB - u) + 3wB^2 + 2wB + A] + dA[B - Z]}{3Z^2 - 2Z(1+B-u) + A + wB^2 - uB^2 - uB}$$

SOAVE

PENG-ROBINSON

$$dz = \frac{dZ + dB}{Z+B} - \frac{dZ}{Z}$$

$$dz = \frac{ZdB - BdZ}{(Z+B(1+\sqrt{2}))(Z+B(1-\sqrt{2}))}$$

Tabla 1.4. Continuación

$$dH^m = \sum_i x_i Cp_i^m$$

$$dS^m = \sum_i x_i \frac{Cp_i^m}{T}$$

$$dH = dH^m + R \left[Z-1 - \frac{A+A'}{B} Z + T \left(dZ - \frac{BCA+A'}{B^2} dZ + BZ(CdA+dA') - Z(CA+A') dB \right) \right]$$

$$dS = dS^m + R \left[\frac{dZ-dB}{Z-B} - \frac{BA'dZ+BZdA'-A'ZdB}{B^2} \right]$$

$$d\hat{\phi}_i = \hat{\phi}_i \left(\frac{\phi_1}{B^2} - 2\frac{\phi_2}{A^2} - \frac{dZ-dB}{Z-B} \right)$$

donde: $\phi_1 = B_i B dZ + (BZ - BA'Z) dB_i + (B_i Z - B_i Z - 2AB_i Z/B) dB + Z B_i dA + AB_i dZ$

$\phi_2 = \text{SUMA}_i A dZ + Z A d \text{SUMA}_i + \text{SUMA}_i Z dA$

Derivadas con respecto a presión

$$dA_i = \frac{A_i}{P}$$

$$dB_i = \frac{B_i}{P}$$

$dB, d \text{SUMA}_i, dA, A'$ igual que d/dT

$$dA' = \frac{1}{4} \sum_i \sum_j x_i x_j A'' (1 - k_{ij})$$

dZ, dZ' igual que d/dT .

$$dH = RT \left(dZ - \frac{BCA+A'}{B^2} dZ + BZ(CdA+dA') - Z(CA+A') dB \right)$$

$$dS = R \left[\frac{dZ-dB}{Z-B} - \frac{BA'dZ+BZdA'-A'ZdB}{B^2} - \frac{1}{P} \right]$$

$\phi_1, \phi_2, d\hat{\phi}_i$ igual que d/dT

1.4. EQUILIBRIO FISICO.

Un sistema se encuentra en equilibrio cuando sus propiedades no cambian con el tiempo. Cualquier estado del sistema diferente al de equilibrio evolucionará hasta alcanzar éste. Según la segunda ley de la termodinámica, la entropía total de un sistema aislado y a volumen constante tiende a un valor máximo, y cuando este valor se alcanza ya no hay cambios en el sistema. Este punto corresponde en un sistema a T y P constantes que la energía de Gibbs sea mínima.

Si en un sistema cerrado formado por dos fases α y β se transfieren dN_i moles del componente i de la fase β a la fase α , manteniéndose T y P constantes, ver la figura 1.1; el cambio de G en el proceso será:

$$dG = \sum \left[\mu_i^\alpha - \mu_i^\beta \right] dN_i \quad \dots(1.50)$$

En el estado de equilibrio no debe haber cambio en las propiedades del sistema, es decir $dG=0$. Esto se cumple sólo si:

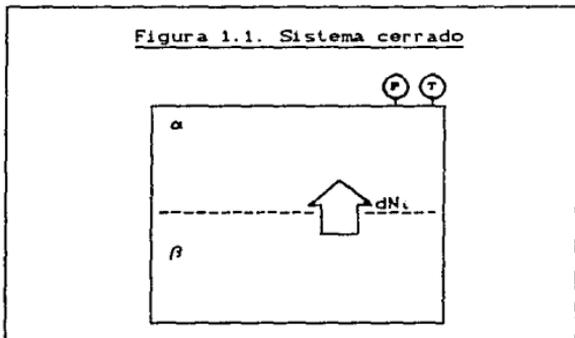
$$\mu_i^\alpha = \mu_i^\beta \quad \dots(1.51)$$

o bien, en términos de fugacidad (ver ecuación 1.37):

$$\hat{f}_i^\alpha = \hat{f}_i^\beta \quad \dots(1.52)$$

Para que un sistema se encuentre en equilibrio físico debe cumplirse la condición anterior para todos y cada uno de los componentes de la mezcla.

Figura 1.1. Sistema cerrado



1.4. EXPANSION FLASH.

Se tiene una corriente de proceso a ciertas condiciones de presión, temperatura y composición (T, P, z_i) y un flujo total en moles por unidad de tiempo F . Esta corriente se separa en dos fases en equilibrio, líquido y vapor, ambos a P y T . La composición del vapor es y_i y su flujo molar es V . Para el líquido su composición es x_i y su flujo molar es L . En la figura 1.2 se muestra un diagrama de esta separación.

En este proceso no ocurren reacciones químicas. El balance de materia global en el tanque será:

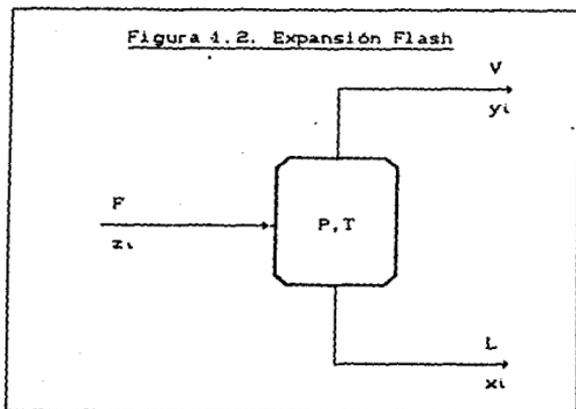
$$F = L + V \quad \dots(1.53)$$

y para cada uno de los componentes:

$$Fz_i = Lx_i + Vy_i \quad \dots(1.54)$$

Como las fases de salida se encuentran en equilibrio, debe satisfacerse la condición de equilibrio:

$$\hat{f}_i^L = \hat{f}_i^V \quad \dots(1.55)$$



Efectuando los balances de energía y entropía, se obtiene:

$$Fh = Lh^L + Vh^V \quad \dots(1.56)$$

$$Fs = Ls^L + Vs^V \quad \dots(1.57)$$

Si el número de componentes de la mezcla es n , el número de ecuaciones que se han planteado es $2n+2$ (n balances de materia, n relaciones de equilibrio, 1 balance de energía y 1 balance de entropía).

Si se dan como datos F y z_i , entonces las incógnitas son: $n-1$ composiciones del vapor y $n-1$ del líquido (la composición del otro componente se obtendrá por diferencia con la unidad), los flujos de líquido y vapor, la temperatura y presión. Esto nos da un total de $2n+2$ incógnitas.

Por lo tanto, el número de ecuaciones e incógnitas son iguales y el sistema tiene solución.

Si adicionalmente se conoce alguna o algunas de las incógnitas, por cada una de ellas que se conozca se debe eliminar una de las ecuaciones. En la tabla 1.5 se muestran los diferentes tipos de flash manejados en el programa desarrollado en este trabajo, sus datos e incógnitas.

Tabla 1.5. Tipos de flash.

No.	TIPO DE FLASH	DATOS	INCOGNITAS
1	T de Burbuja	$L=F; x_i=z_i; P$	$T; y_i; V=0$
2	T de Rocío	$V=F; y_i=z_i; P$	$T; x_i; L=0$
3	P de Burbuja	$L=F; x_i=z_i; T$	$P; y_i; V=0$
4	P de Rocío	$V=F; y_i=z_i; T$	$P; x_i; L=0$
5	Flash a T, P	$F; z_i; T; P$	$y_i; x_i; V; L$
6	Flash a T, (CV/F)	$F; V; z_i; T$	$P; y_i; x_i; L=F-V$
7	Flash a P, (CV/F)	$F; V; z_i; P$	$T; y_i; x_i; L=F-V$
8	Flash a P, h	$F; z_i; P; h$	$T; y_i; x_i; V; L$
9	Flash a P, s	$F; z_i; P; s$	$T; y_i; x_i; V; L$

Para tener un algoritmo general que resuelva todo tipo de flash, partiremos del balance de materia por componente, ecuación 1.54. Sustituyendo $L=F-V$, que viene de la ecuación 1.53, se obtiene:

$$Fz_i = (F-V)x_i + Vy_i \quad \dots(1.58)$$

La constante de equilibrio se define como:

$$k_i = \frac{y_i}{x_i} \quad \dots(1.59)$$

de tal modo que se cumplan las condiciones de equilibrio 1.55. Sustituyendo $y_i=k_i x_i$ en 1.58 se obtiene:

$$Fz_i = (F-V)x_i + V k_i x_i \quad \dots(1.60)$$

Rearreglando términos, se obtiene:

$$x_i = \frac{z_i}{1 + \frac{V}{F}(k_i - 1)} \quad \dots(1.61)$$

y de acuerdo con la ecuación 1.59, la composición del vapor será:

$$y_i = \frac{k_i z_i}{1 + \frac{V}{F}(k_i - 1)} \quad \dots(1.62)$$

donde el término (V/F) es conocido como *relación de vaporización*.

La constante de equilibrio, k_i , se obtiene de la relación 1.55, utilizando la definición del coeficiente de fugacidad, $\hat{\phi}_i$:

$$\hat{f}_i^V = P y_i \hat{\phi}_i^V \quad \dots(1.63)$$

$$\hat{f}_i^L = P x_i \hat{\phi}_i^L \quad \dots(1.64)$$

y sustituyendo en 1.55 se obtiene:

$$k_i = \frac{\hat{\phi}_i^L}{\hat{\phi}_i^V} \quad \dots(1.65)$$

Con las ecuaciones 1.61, 1.62 y 1.65 se pueden resolver los primeros 7 tipos de flash mencionados en la tabla 1.4. Para poder incluir los dos últimos, será necesario adicionar el balance de entalpía o de entropía:

$$Fq = Lq^L + Vq^V \quad \dots(1.66)$$

donde q es la entalpía o la entropía, según el caso.

En esta expresión se sustituye el balance de materia global, 1.53, y despejando la relación de vaporización da:

$$\frac{V}{F} = \frac{q - q^L}{q^V - q^L} \quad \dots(1.67)$$

que se sustituye en 1.61 y 1.62 para eliminarla como incógnita.

Si consideramos que la suma de composiciones debe ser la unidad, es decir:

$$\sum_i x_i = 1 \quad \dots(1.68)$$

$$\sum_i y_i = 1 \quad \dots(1.69)$$

se puede tomar como función objetivo:

$$\ln \frac{\sum_i y_i}{\sum_i x_i} = 0 \quad \dots(1.70)$$

Cuando se tengan todas las condiciones que cumplan esta única restricción, el flash estará resuelto.

En el apéndice se muestran los diagramas de flujo para resolver los 9 tipos de flash mencionados, y las ecuaciones relevantes en cada caso.

En algunas ocasiones la solución matemática no tendrá un significado real. Cuando esto ocurre, alguna de las variables del sistema se sale de un rango lógico, que debe ser:

$$0 \leq (V/F) \leq 1 \quad \dots(1.71)$$

$$x_i \geq 0 \quad \dots(1.72)$$

$$y_i \geq 0 \quad \dots(1.73)$$

En este caso no se tiene un equilibrio entre las fases, sino que sólo existe líquido o vapor y la relación de vaporización será 0 ó 1, respectivamente. Si se trata de un flash adiabático, h ó s constantes, la temperatura se obtiene del balance de entalpía o entropía, según el caso.

Como puede verse en el diagrama de flujo para la resolución del flash, ver apéndice, debe tomarse un valor inicial de las incógnitas. Cuando la inicialización no es buena pueden obtenerse

valores de la relación de vaporización que no cumplan con 1.71, pero que al ser utilizados en 1.61 para obtener las composiciones, éstas sí cumplan 1.68 y 1.69. Para cálculos intermedios, entonces, se pueden aceptar estos valores, pero se debe vigilar que el resultado final cumpla con la desigualdad 1.71.

Para tener composiciones positivas, el denominador de la ecuación 1.61 (que es igual al denominador de la ecuación 1.62) debe también ser positivo, es decir:

$$1 + \frac{V}{F} (k_i - 1) > 0 \quad \dots(1.74)$$

Para componentes ligeros, $k_i > 1$, la solución a la desigualdad es:

$$\frac{V}{F} > - \frac{1}{k_i - 1} \quad \dots(1.75)$$

y (V/F) puede tomar valores negativos. El valor mínimo que se puede aceptar para (V/F) será el más cercano a cero de estos valores, de modo que se garantice que todas las fracciones mol sean positivas.

Para componentes pesados, $k_i < 1$, la solución de la desigualdad 1.74 es:

$$\frac{V}{F} < \frac{1}{1 - k_i} \quad \dots(1.76)$$

y (V/F) puede tomar valores mayores que la unidad. El valor máximo de (V/F) que debe aceptarse es el que resulte más pequeño de entre los calculados con los componentes pesados, de modo que se garantice que todas las fracciones mol sean positivas.

1.6. CALCULO DE EQUIPOS DE PROCESO.

Utilizando los nueve tipos de flash antes mencionados, se pueden calcular algunos equipos encontrados comúnmente en los procesos. En la tabla 1.6 se muestran algunos ejemplos y se incluye el procedimiento de cálculo para cada equipo, que consiste en una serie de cálculos flash sucesivos.

Para calcular equipos no incluidos en la tabla 1.5 se puede utilizar un simulador de procesos con módulos específicos, por ejemplo torres de destilación y reactores químicos. Una vez conocidas las entradas y salidas del proceso, se pueden calcular aisladamente las propiedades de cada una de las corrientes involucradas y realizar el balance de exergía de manera externa.

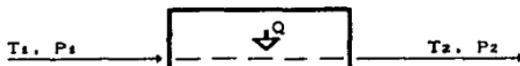
También se incluye un módulo para cálculo independiente de un *flash*, en el que se reportan los cambios de entalpía, entropía y exergía, así como de temperatura y presión. Esto nos servirá en el caso de equipos no considerados y sin cambio de composición.

Tabla 1.6. Cálculo de equipos de proceso

Procedimiento de cálculo para equipos de proceso con diferentes especificaciones.

En todos los casos se proporciona como dato las condiciones de la corriente de alimentación T_1, P_1, z_i y la presión de la corriente de salida P_2 . El primer cálculo, en todos los casos, es un *flash* tipo B a T_1 y P_1 con lo cual se conocen h_1, s_1 y e_{x1} .

INTERCAMBIADORES DE CALOR



CASO: ESPECIFICAR LA TEMPERATURA DE SALIDA, T_2

- a) *Flash* tipo B a T_2, P_2 con F y z_i
- b) $Q = F (h_2 - h_1)$

CASO: ESPECIFICAR CALOR INTERCAMBIADO, Q

- a) $h_2 = h_1 + Q/F$
- b) *Flash* tipo B a P_2, h_2 con F y z_i

Tabla 1.6. Continuación

INTERCAMBIADORES DE CALOR (Continuación)

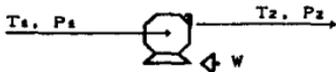
CASO: ESPECIFICAR EVAPORACION/CONDENSACION PARCIAL, (CV/F)₂

- a) Flash tipo 7 a P_2 , (CV/F)₂ con F y z_i
- b) $Q = F (h_2 - h_1)$

CASO: ESPECIFICAR EVAPORACION/CONDENSACION TOTAL, (T_2, T_2)

- a) Flash tipo 1 ó 2 a P_2 con z_i
- b) $Q = F (h_2 - h_1)$

BOMBAS



CASO: ESPECIFICAR EFICIENCIA, η

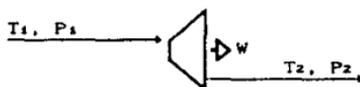
- a) $\Delta h^t = \frac{Z_1 R T_1}{P_1} (P_2 - P_1)$
- b) $\Delta h^r = \Delta h^t / \eta$
- c) $W = F \Delta h^r$
- d) $h_2 = h_1 + \Delta h^r$
- e) Flash tipo 8 a P_2 , h_2 con F y z_i

CASO: ESPECIFICAR TRABAJO, W

- a) $\Delta h^t = \frac{Z_1 R T_1}{P_1} (P_2 - P_1)$
- b) $\Delta h^r = W / F$
- c) $\eta = \Delta h^t / \Delta h^r$
- d) $h_2 = h_1 + \Delta h^r$
- e) Flash tipo 8 a P_2 , h_2 con F y z_i

Tabla 1.6. Continuación

TURBINAS



CASO: ESPECIFICAR EFICIENCIA, η

a) Flash tipo 9 a P_2 , z_1 con F y z_1

b) $\Delta h^t = h_{z^t} - h_1$

c) $\Delta h^r = \Delta h^t \eta$

d) $W = F \Delta h^r$

e) $h_{z^r} = h_1 + \Delta h^r$

f) Flash tipo 8 a P_2 , h_{z^r} con F y z_1

CASO: ESPECIFICAR TRABAJO, W

a) Flash tipo 9 a P_2 , z_1 con F y z_1

b) $\Delta h^t = h_{z^t} - h_1$

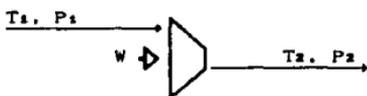
c) $\Delta h^r = W/F$

d) $\eta = \Delta h^r / \Delta h^t$

e) $h_{z^r} = h_1 + \Delta h^r$

f) Flash tipo 8 a P_2 , h_{z^r} con F y z_1

COMPRESORES



CASO: ESPECIFICAR EFICIENCIA, η

a) y b) igual que para turbinas

c) $\Delta h^r = \Delta h^t / \eta$

d), e) y f) igual que para turbinas

CASO: ESPECIFICAR TRABAJO, W

a), b) y c) igual que para turbinas

d) $\eta = \Delta h^t / \Delta h^r$

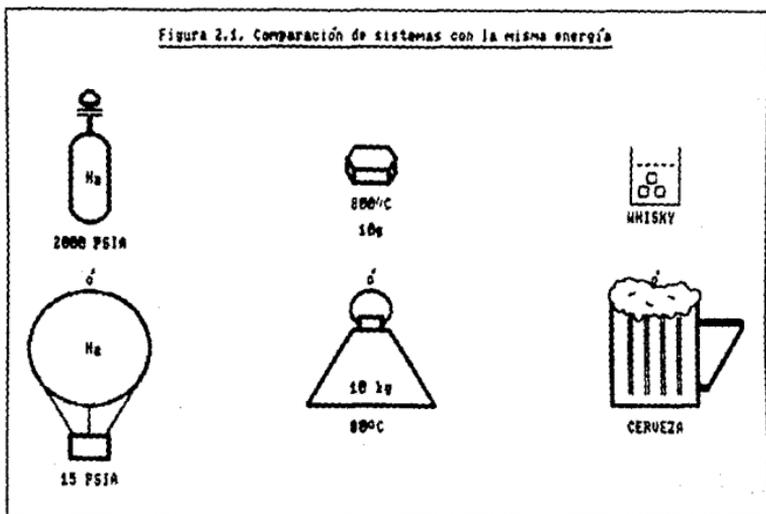
e) y f) igual que para turbinas

CAPÍTULO II. TRABAJO PERDIDO Y SEGUNDA LEY DE LA TERMODINÁMICA

2.1. SEGUNDA LEY DE LA TERMODINAMICA.

Antes de entrar directamente al concepto de la segunda ley, analizaremos algunos conceptos que serán útiles para su mejor entendimiento.

En la figura 2.1 se muestran diferentes pares de sistemas que contienen la misma cantidad de energía, sin embargo, nos cuestionamos si alguno es mejor que el otro para utilizar su energía en un proceso. Para responder esta pregunta se pueden distinguir dos características en las cuales nos basaremos para dar valor a la energía: *Cantidad y Potencial*.



Para que un proceso se lleve a cabo será necesario consumir energía, pero habrá que sacrificar potencial. En otras palabras, se necesita siempre que exista una fuerza impulsora del proceso como lo es la diferencia de temperaturas para la transmisión de calor. En la figura 2.2 se muestran diferentes procesos y la fuerza impulsora de éstos.

Figura 2.2. Fuerza impulsora de procesos

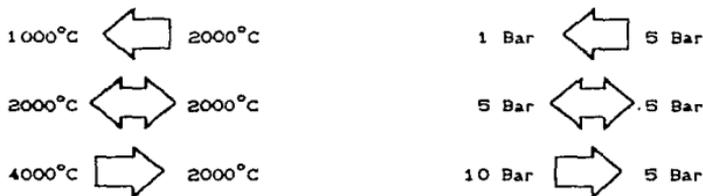
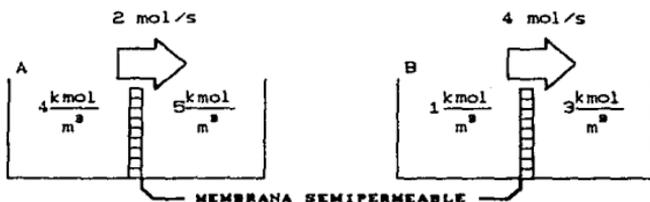


Figura 2.3. Difusión de agua por ósmosis



Un proceso ocurrirá con mayor velocidad mientras mayor sea la fuerza que lo impulsa. Por ejemplo, en el proceso de difusión de agua por ósmosis de la figura 2.3, la difusión será más rápida en el sistema B, que tiene una mayor diferencia de concentraciones.

Estos conceptos son aplicables, según la experiencia, a procesos prácticos. Si un proceso se pudiera llevar a cabo con una fuerza impulsora casi igual a cero, éste, sería un proceso ideal.

Para entender mejor lo que es un proceso ideal, analicemos un cilindro con un gas a presión, figura 2.4. Supongamos que el cilindro se encuentra en un baño a temperatura constante lo suficientemente grande para mantener el gas a esa temperatura, absorbiendo o cediendo el calor que sea necesario. El trabajo producido por el gas será:

$$W = -P_0 \Delta V \quad \dots (2.1)$$

En donde P_{op} es la presión que se opone al gas y está dada por el peso del pistón y de los objetos que se encuentran encima de él.

Figura 2.4. Expansión isotérmica

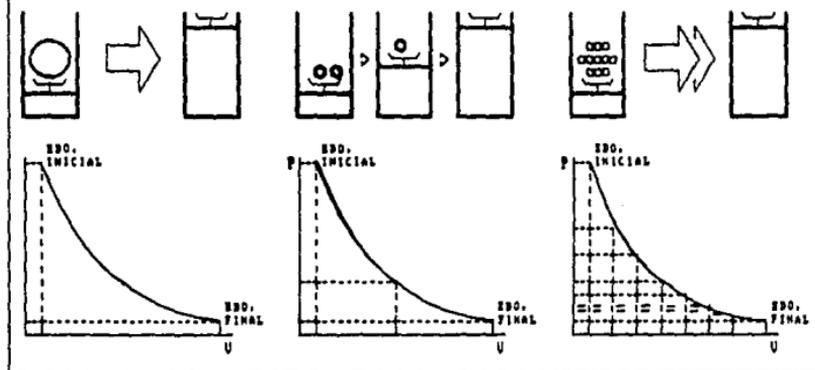
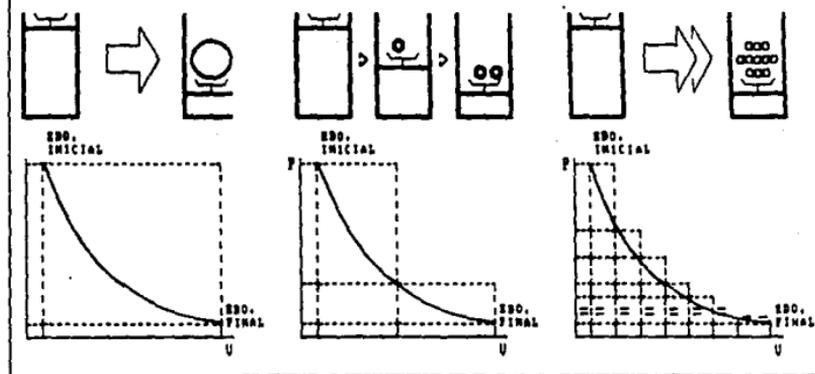


Figura 2.5. Compresión isotérmica



En la figura 2.4 la expansión del gas se ha realizado de tres maneras diferentes. En todos los casos se parte de la misma situación con el mismo peso encima del pistón. En el primer caso, el peso se suprime de un sólo golpe pasando a la condición final; en el segundo, el peso se suprime en dos etapas; y en el tercero, se suprime en muchas etapas. En todos los casos el estado final es el mismo.

En el diagrama P-V se muestra la trayectoria seguida por el gas desde su estado inicial hasta alcanzar el estado final. El área sombreada es el trabajo que se obtuvo durante la expansión.

Como se ve en la figura 2.4, conforme aumenta el número de etapas, el área que representa al trabajo se aproxima al área bajo la curva de la trayectoria isotérmica del gas.

Si se disminuye el tamaño de las pesas hasta un punto infinitesimal, el trabajo obtenido corresponde con el área bajo la isoterma. A este tipo de procesos se les conoce como ideales. El trabajo ideal es, como se puede apreciar, el máximo que puede ser extraído al sistema.

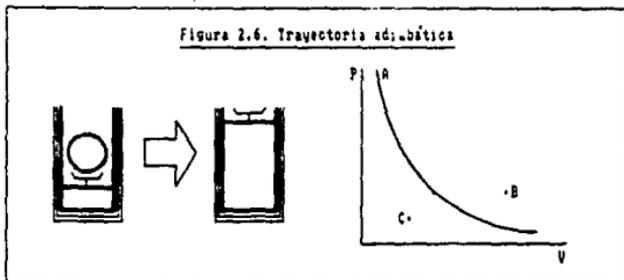
Operando el proceso anterior en el sentido inverso, el resultado es el mismo, con la única diferencia que el trabajo consumido siempre es mayor que el área bajo la curva, y el trabajo ideal es el mínimo necesario para comprimir el sistema. Ver figura 2.5.

Así, si realizamos los procesos de las figuras 2.4 y 2.5 simultáneamente, el trabajo ideal obtenido en uno será igual al invertido en otro. Esto es un proceso reversible.

Si el cilindro del ejemplo anterior se aísla, de modo que se impida la transferencia de calor, la trayectoria adiabática será la mostrada en la figura 2.6. Desde el estado A del sistema se puede alcanzar el estado B mediante un proceso adiabático irreversible.

Por otro lado, el estado C es inaccesible mediante cualquier proceso adiabático, ya sea reversible o irreversible.

Figura 2.6. Trayectoria adiabática



Analicemos ahora un proceso real de transferencia de calor como los mostrados en la figura 2.7. Definiremos para su estudio una función X , dada por:

$$X = \frac{Q}{T} \quad \dots(2.2)$$

En la figura 2.7A, para la fuente a 600K:

$$X_F = \frac{-3000}{600} = -5 \text{ kJ/K} \quad \dots(2.3)$$

y para el receptor de calor a 500K:

$$X_R = \frac{3000}{500} = 6 \text{ kJ/K} \quad \dots(2.4)$$

Al analizar todo el sistema, el resultado es:

$$X_{\text{tot}} = -5 + 6 = 1 \text{ kJ/K} \quad \dots(2.5)$$

En la figura 2.7B, tenemos la comparación entre un proceso real y uno ideal (fuerza impulsora igual a cero).

En la figura 2.7C, para la fuente de calor a 600K tenemos:

$$X_F = \frac{-3000}{600} = -5 \text{ kJ/K} \quad \dots(2.6)$$

y para el sumidero de este calor a 1000K:

$$X_M = \frac{3000}{1000} = 3 \text{ kJ/K} \quad \dots(2.7)$$

Para el sistema total, tenemos:

$$X_{\text{TOT}} = -5 + 3 = -2 \text{ kJ/K} \quad \dots(2.8)$$

El sentido común nos dice, sin embargo, que el proceso descrito en esta parte es imposible, ya que no se puede transferir calor de una temperatura baja a otra más alta. De los resultados anteriores se puede obtener la siguiente generalización:

$$X_{\text{TOT}} > 0 \quad \text{PROCESO REAL} \quad \dots(2.9)$$

$$X_{\text{TOT}} = 0 \quad \text{PROCESO IDEAL} \quad \dots(2.10)$$

$$X_{\text{TOT}} < 0 \quad \text{PROCESO IMPOSIBLE} \quad \dots(2.11)$$

A la función X se le conoce como entropía (S), su expresión general es:

$$dS = \frac{dQ_{\text{rev}}}{T} \quad \dots(2.12)$$

que es la ecuación para la segunda ley de la termodinámica.

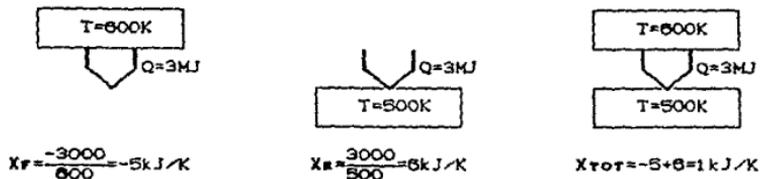
Las observaciones descritas previamente son resultados de las restricciones impuestas por esta ley, que de manera general se puede expresar como:

1. *Cualquier proceso que consista únicamente en transferencia de calor de una temperatura fría a una caliente es imposible.*

2. *La entropía es aquella propiedad que, en un proceso adiabático irreversible, siempre aumenta, y en uno adiabático reversible permanece constante.*

Figura 2.7. Procesos de transferencia de calor

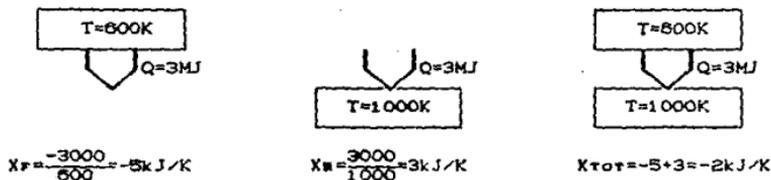
A.



B.



C.



2.2. TRABAJO MÍNIMO Y TRABAJO PERDIDO.

Supongamos que tenemos una máquina térmica como la mostrada en la figura 2.8. El balance de energía, según la primera ley de la termodinámica, nos dice que:

$$\Delta H = Q_c - Q_f - W \quad \dots (2.13)$$

donde W es la cantidad total de trabajo obtenida. Como el proceso es cíclico, $\Delta H=0$, y por lo tanto:

$$W = Q_c - Q_f \quad \dots(2.14)$$

Si definimos la eficiencia del ciclo como:

$$\eta = \frac{W_{\text{OBTENIDO}}}{Q_{\text{SUMINISTRADO}}} \quad \dots(2.15)$$

del balance de energía, 2.14, resulta:

$$\eta = \frac{W}{Q_c} = 1 - \frac{Q_f}{Q_c} \quad \dots(2.16)$$

y para un proceso reversible (ideal):

$$X_{\text{TOT}} = \frac{Q_f}{T_f} - \frac{Q_c}{T_c} = 0 \quad \dots(2.17)$$

y por lo tanto:

$$\eta = 1 - \frac{T_f}{T_c} \quad \dots(2.18)$$

que se conoce como *factor de Carnot*.

Para un proceso real:

$$X_{\text{TOT}} = \frac{Q_f}{T_f} - \frac{Q_c}{T_c} > 0 \quad \dots(2.19)$$

Como todas las cantidades son positivas se puede reorganizar la expresión anterior de la siguiente forma:

$$\frac{Q_f}{Q_c} > \frac{T_f}{T_c} \quad \dots(2.20)$$

Si se utiliza este resultado para obtener la eficiencia del proceso real se obtiene que:

$$\eta = \frac{W}{Q_c} = 1 - \frac{Q_f}{Q_c} < 1 - \frac{T_f}{T_c} \quad \dots(2.21)$$

Por lo tanto, la eficiencia del ciclo real es siempre menor que la del ciclo ideal (reversible).

Figura 2.8. Máquina térmica

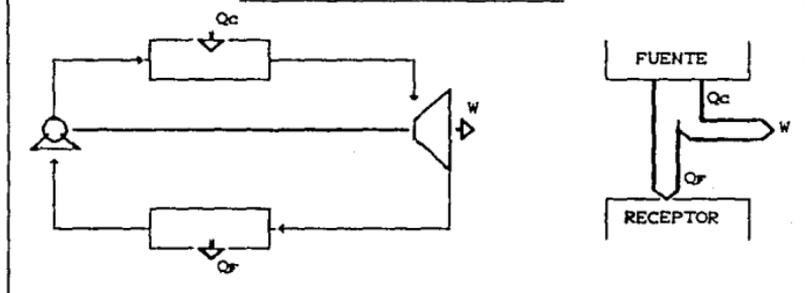
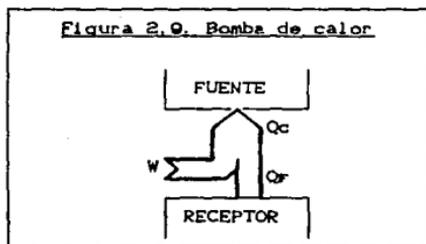


Figura 2.9. Bomba de calor



Si operamos este proceso en sentido inverso, tendremos una bomba de calor, ver la figura 2.9.

El balance de energía, en este caso es:

$$\Delta H = Q_f + W - Q_c \quad \dots(2.22)$$

y para un proceso reversible, el factor de carnot será:

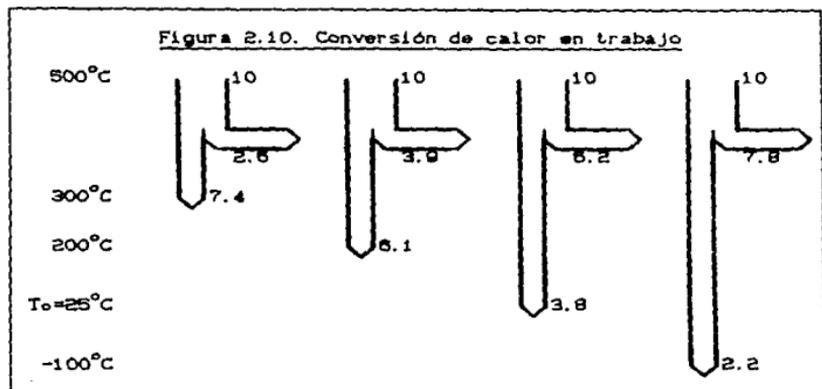
$$\eta = 1 - \frac{T_f}{T_c} \quad \dots(2.23)$$

que es el mismo que para la máquina térmica.

Conforme aumenta la diferencia entre la temperatura de la fuente y el sumidero de calor, es mayor la cantidad de trabajo que se puede obtener en una máquina térmica. Para calcularlo de manera sencilla se puede utilizar la ecuación:

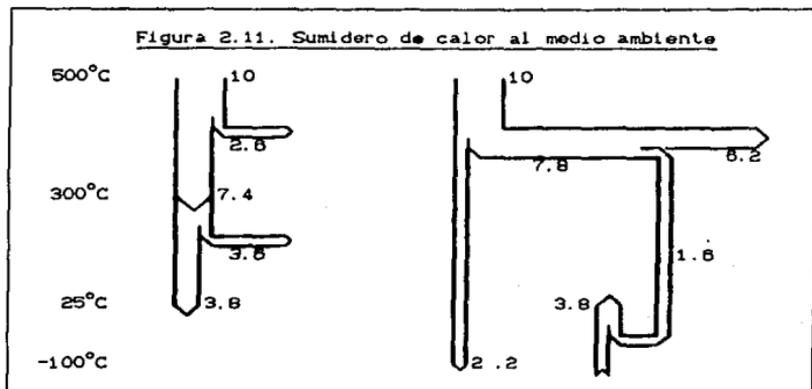
$$W = Q_c \left[1 - \frac{T_r}{T_c} \right] \quad \dots(2.24)$$

En la figura 2.10 se muestra el trabajo obtenido a diferentes temperaturas del receptor de calor para una misma fuente térmica. Nótese que a medida que disminuye la temperatura del sumidero de calor, aumenta la cantidad de trabajo obtenida.



Existe un límite inferior para la temperatura del sumidero de calor en el ejemplo anterior. Si la temperatura del receptor de calor es mayor que la del ambiente, será posible extraer mayor cantidad de trabajo a la corriente de proceso disminuyendo la temperatura del sumidero. Si la temperatura del receptor de calor es menor que la del medio ambiente, será necesario extraer el calor absorbido para evitar el calentamiento del receptor de calor y mantener su

temperatura mediante una bomba de calor. En la figura 2.11 se ilustra esta situación. Por lo tanto, el límite inferior de la temperatura del sumidero de calor es la temperatura ambiente.



Como ya se mencionó anteriormente, los procesos reales necesitan una fuerza impulsora para llevarse a cabo. Esto es a costa de sacrificar parte del potencial de la energía. Para un proceso práctico tendremos que:

$$W \leq Q_c \left(1 - \frac{T_f}{T_c} \right) \quad \dots(2.25)$$

cuando el trabajo es desarrollado por el sistema y:

$$W \geq Q_c \left(1 - \frac{T_f}{T_c} \right) \quad \dots(2.26)$$

cuando el trabajo es realizado sobre el sistema.

En las ecuaciones 2.25 y 2.26, la igualdad se cumple en procesos reversibles. La diferencia entre el trabajo ideal y el real es llamado *trabajo perdido*. Existen varios métodos para calcularlo, entre ellos está el uso de la *disponibilidad* o el uso de la *exergía*.

Todos los procesos requieren de servicios de calentamiento, enfriamiento y trabajo. Para suministrarlos acoplaremos el proceso como se muestra en la figura 2.12.

Se puede aprovechar el calor cedido durante el proceso para producir trabajo acoplando una máquina térmica con descarga al medio ambiente. Por otro lado, el calor requerido por el proceso se puede extraer del medio ambiente mediante una bomba de calor. Así, los servicios requeridos por el proceso se pueden considerar únicamente como una necesidad de trabajo. Ver figura 2.13.

Si todos los pasos del proceso se llevan a cabo de manera reversible, el trabajo neto será el trabajo mínimo asociado al proceso. La diferencia entre el trabajo mínimo y el consumido por un proceso real es el trabajo perdido.

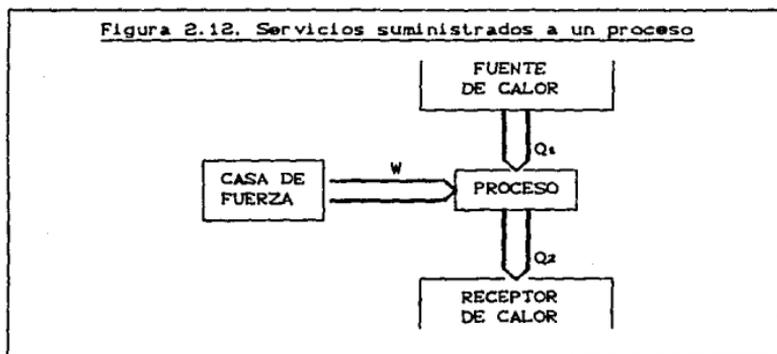
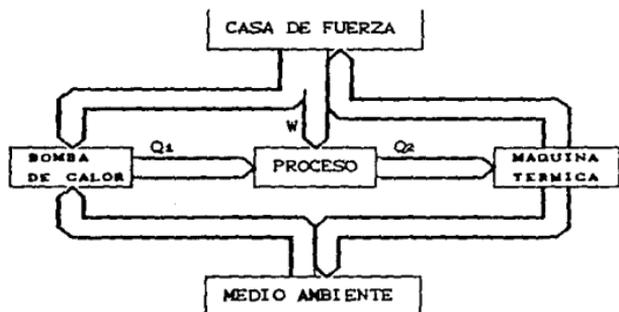


Figura 2.13. Trabajo neto requerido para un proceso



CAPÍTULO III. DISPONIBILIDAD Y EXERGÍA.

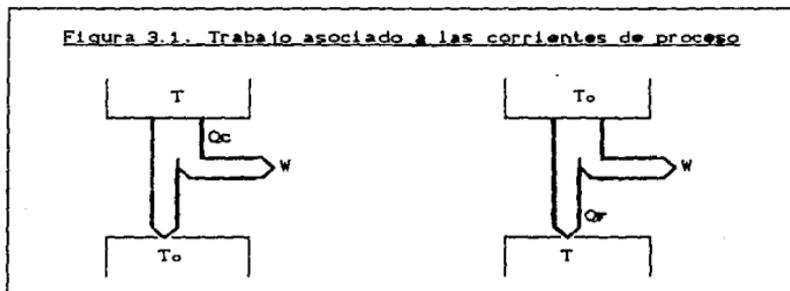
3.1. Disponibilidad.

Como se mencionó anteriormente, se pueden resumir todos los servicios requeridos por un proceso como una necesidad de trabajo. De la misma manera, se puede asociar un potencial para realizar trabajo a cada corriente de proceso. Para ilustrar esto, supongamos que la temperatura, T , de una corriente de proceso es mayor que la del medio ambiente. Si extraemos calor a la corriente hasta alcanzar el equilibrio térmico con el medio ambiente, este calor producirá una cantidad de trabajo dada por la ecuación 2.24.

Si la temperatura de la corriente está por debajo de la del ambiente también podemos asociarle una cantidad de trabajo. Para conseguirlo, se acopla una máquina térmica entre el medio ambiente y la corriente de proceso. El trabajo obtenido será:

$$W = Q_F \left[\frac{T_0}{T} - 1 \right] \quad \dots(3.1)$$

En la figura 3.1 se muestra el acoplamiento de una máquina térmica entre el medio ambiente y la corriente de proceso.



De manera análoga, cuando la presión de la corriente de proceso es diferente de la atmosférica, se puede obtener trabajo al llegar al equilibrio mecánico entre el sistema y el medio ambiente.

El trabajo combinado que se obtiene cuando se alcanzan simultáneamente el equilibrio térmico y mecánico con el medio ambiente se conoce como disponibilidad, y se designa con la letra *b*.

El tamaño del medio ambiente es tan grande que al efectuarse la transferencia de energía entre éste y la corriente de proceso, dicha transferencia se lleva a cabo a las condiciones ambientales, ya que sus propiedades intensivas se mantendrán constantes.

Para calcular la disponibilidad, el cambio mediante el cual la corriente de proceso se lleve a las condiciones de temperatura y presión del medio ambiente (T_0 y P_0) debe ser reversible.

El balance de energía para el sistema será:

$$\Delta H = Q + W \quad \dots(3.2)$$

y el balance de entropía:

$$\Delta S = \frac{Q}{T_0} \quad \dots(3.3)$$

donde ΔH y ΔS son las diferencias de entalpía y entropía, respectivamente, de los valores correspondientes a la corriente de proceso a sus condiciones iniciales, menos los valores que tienen a las condiciones del medio ambiente; Q es el calor cedido al medio ambiente y W es el trabajo que se obtiene durante el proceso.

Sustituyendo 3.3 en 3.2, se obtiene:

$$\Delta H = T_0 \Delta S + W \quad \dots(3.4)$$

y despejando el trabajo el resultado es:

$$W = \Delta H - T_0 \Delta S \quad \dots(3.5)$$

El trabajo que se obtiene fue definido como disponibilidad, de modo que:

$$B = \Delta H - T_0 \Delta S \quad \dots(3.6)$$

Efectuando directamente balances de disponibilidad a un proceso se obtendrá el trabajo mínimo y el trabajo perdido.

3.2. Exergía.

La exergía se define como el trabajo disponible en un fluido o masa como resultado de su desviación del punto de equilibrio con un estado o condición de referencia que se denomina *estado muerto*.

Cuando se alcanza el equilibrio físico de la corriente de proceso con el medio ambiente tenemos una disponibilidad $b=0$. Sin embargo, aún es posible extraer trabajo del sistema. Esto se logra haciendo reaccionar a la corriente de proceso con el medio ambiente hasta alcanzar el equilibrio químico. Esta reacción debe ocurrir de manera reversible.

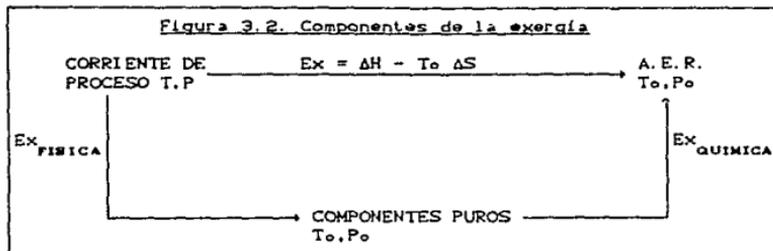
La exergía, por analogía con la disponibilidad, se define como:

$$Ex = \Delta H - T_0 \Delta S \quad \dots(3.7)$$

tomando las diferencias de entalpía y de entropía desde la corriente de proceso a sus condiciones de presión, temperatura y composición; hasta el punto de equilibrio térmico, químico y mecánico con un estado de referencia denominado *Estado muerto*. En este estado, también conocido como *Ambiente Estable de Referencia (AER)*, no es posible extraer mayor cantidad de trabajo a la corriente de proceso.

Cuando en un proceso no existe reacción química ni desalojo de materiales a la atmósfera, el AER se anula. Por este motivo nos interesa conocer las diferencias de exergía más que su valor absoluto.

Al realizar balances de exergía se puede y conviene separar el valor de ésta en dos contribuciones, sin que deban tener un significado real: exergía física y exergía química. En la figura 3.2 se muestra esta separación.



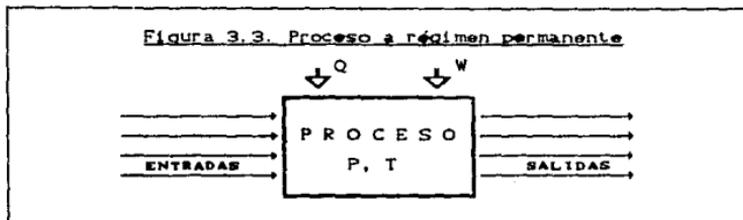
Exergía Física. Es el valor de la exergía obtenido durante el cambio desde la corriente de proceso a sus condiciones de temperatura, presión y composición; hasta los componentes puros a las condiciones de temperatura y presión del AER. En este cambio se realiza un proceso de mezclado, de calentamiento-enfriamiento y de expansión-compresión. Este término es igual a la disponibilidad, definida en la sección anterior.

Exergía Química. Es el valor de la exergía obtenido por la reacción química desde los componentes puros que forman la corriente de proceso hasta llegar al punto de equilibrio químico con el medio ambiente. Esta reacción ocurre a las condiciones de temperatura y presión del AER (T_o, P_o).

Por el tipo de proceso de que se tratan, la exergía química es de un orden de magnitud unas mil veces mayor que la exergía física. Al realizar balances de exergía, la componente química se anulará en los procesos en los que no ocurren reacciones químicas. Esto nos reitera la conveniencia de manejar las dos contribuciones por separado y utilizar la exergía química sólo en caso de que ocurra reacción química.

3.3. BALANCES DE ENERGÍA, TRABAJO MÍNIMO Y TRABAJO PERDIDO.

En la sección 2.2 se habló de *trabajo mínimo* y de *trabajo perdido*. Estos valores se pueden obtener a partir de los balances de energía, entropía y exergía.



Para un proceso cualquiera a régimen permanente (figura 3.3.), el balance total de energía será:

$$Q + W = \Delta H_{\text{TOT}} \quad \dots(3.8)$$

donde:

$$\Delta H_{\text{TOT}} = \sum_{\text{Sal}} \dot{M} h_s - \sum_{\text{Ent}} \dot{M} h_e \quad \dots(3.9)$$

Además, el balance global de entropía es:

$$\Delta S_{\text{Generación}} = \Delta S_{\text{TOT}} - \frac{Q}{T} \quad \dots(3.10)$$

donde:

$$\Delta S_{\text{TOT}} = \sum_{\text{Sal}} \dot{M} s_s - \sum_{\text{Ent}} \dot{M} s_e \quad \dots(3.11)$$

El calor suministrado al proceso tiene una equivalencia como trabajo mecánico, que estará dada por la ecuación 2.24, utilizando la temperatura ambiente como la del sumidero de calor. Si sumamos esta cantidad al trabajo real utilizado, podemos expresar todos los servicios del proceso como un *trabajo equivalente*, que es:

$$W_{\text{eq}} = W + Q \left(1 - \frac{T_0}{T} \right) \quad \dots(3.12)$$

donde W y Q son el trabajo y el calor reales suministrados al proceso y T es la temperatura de la fuente térmica que proporciona el calor.

El trabajo mínimo necesario para realizar el proceso será el consumido por el proceso ideal (reversible). En este caso, el balance de energía está dado por la ecuación 3.8 y el balance de entropía por la ecuación 3.10 con el término de generación igual a cero, esto es:

$$\Delta S_{TOT} = \frac{Q}{T} \quad \dots(3.13)$$

Al sustituir las ecuaciones 3.8 y 3.13 en la ecuación 3.12 se obtiene:

$$(W_{eq})_{min} = \Delta H_{TOT} - T_0 \Delta S_{TOT} \quad \dots(3.14)$$

o bien, en términos de exergía:

$$(W_{eq})_{min} = \Delta Ex_{TOT} \quad \dots(3.15)$$

donde:

$$\Delta Ex_{TOT} = \sum_{Sal} \dot{M} e_{exs} - \sum_{Ent} \dot{M} e_{exs} \quad \dots(3.16)$$

El trabajo perdido es, como ya se mencionó, la diferencia entre el trabajo equivalente real y el mínimo, es decir:

$$LW = W_{eq} - (W_{eq})_{min} \quad \dots(3.17)$$

Utilizando las ecuaciones 3.8, 3.12 y 3.14 obtenemos:

$$LW = T_0 \left[\Delta S_{TOT} - \frac{Q}{T} \right] \quad \dots(3.18)$$

y sustituyendo el balance de entropía 3.10, resulta:

$$LW = T_0 \Delta S_{Generación} \quad \dots(3.19)$$

Este resultado nos indica que el trabajo perdido en procesos es causado por la generación de entropía, que es una medida de las irreversibilidades.

Resumiendo, en un proceso real dado el análisis exerético tiene la siguiente secuencia de cálculo:

- 1.- Calcular ΔH_{T0r} , ΔS_{T0r} y ΔE_{T0r} con las ecuaciones 3.9, 3.11 y 3.16; respectivamente.
- 2.- Calcular el trabajo mínimo con la ecuación 3.15.
- 3.- Efectuar el balance de energía dado por la ecuación 3.8 y determinar W y Q.
- 4.- Calcular el trabajo equivalente real con la ecuación 3.12. La temperatura, T, corresponde a la fuente térmica que proporciona el calor, Q.
- 5.- Calcular el trabajo perdido con la ecuación 3.17.

3.4. CALCULO DE LA EXERGIA FISICA DE UNA CORRIENTE.

En el capítulo I se describió el método de cálculo de entalpía y entropía a partir de los compuestos puros a 25°C y 1 atm. Si se escoge como ambiente estable de referencia la atmósfera a 25°C y 1 atm, entonces, la entalpía y entropía del capítulo I puede servir para calcular la exergía física.

En este caso se calculan las propiedades termodinámicas (entalpía, h y entropía, s) según el método que se resume en la tabla 1.4, utilizando las propiedades del gas ideal de la tabla 1.3. La exergía física quedará dada por la expresión:

$$Ex_f = H - T_0 S \quad \dots (3.20)$$

En el cálculo de H y S para la ecuación anterior se deben omitir los términos $h_{f,i}$ y $s_{f,i}$ en el cálculo de la entalpía y entropía de gas ideal.

3.5. CALCULO DE LA EXERGIA QUIMICA DE UNA CORRIENTE.

Como es lógico, la exergia o capacidad de producir trabajo de una sustancia por el hecho de estar en desequilibrio con el medio ambiente depende de la temperatura, presión y composición de éste. Antes de calcular el valor de la exergia química será necesario definir convenientemente el AER, según los siguientes criterios:

- Se debe adoptar un compuesto de referencia para cada elemento químico.
- Los componentes de referencia adoptadas deben ser componentes comunes del medio ambiente.
- Los parámetros medios que se adopten para el medio ambiente (temperatura, presión y composición) deben tomarse como el valor de exergia química igual a cero.

Al aplicar los criterios anteriores se tendrán ventajas tales como:

- Las especies existentes en el medio ambiente no pueden ser tratadas como fuentes naturales de energía, ya que no tienen la capacidad de producir trabajo, y por lo tanto el valor de exergia igual a cero es lógico.
- La medición de la concentración de los componentes del medio ambiente puede realizarse con una precisión relativamente alta.
- El cálculo de las pérdidas externas de exergia debidas a descargas a la atmósfera será directamente el valor de la exergia calculada.

Para procesos de combustión y gasificación se pueden hacer simplificaciones importantes al AER, como es el adicionar a la fracción mol del nitrógeno la del argón, que se comporta como inerte en estos casos. Por otro lado, se puede considerar aire saturado y tomar directamente la presión parcial del agua como su presión de vapor a la temperatura ambiente.

Para los procesos donde los componentes manejados son fracciones del petróleo, formadas por hidrocarburos contaminados con compuestos de azufre, será necesario utilizar un AER que contenga carbono, hidrógeno, oxígeno, nitrógeno y azufre. Este se puede completar adicionando yeso, calcita y agua como fases condensadas al aire. El AER resultante se muestra en la tabla 3.1.

Tabla 3.1. Ambiente estable de referencia

Temperatura: T_0
 Presión: P_0
 Composición: Aire saturado de vapor de agua
 Agua líquida
 Yeso
 Calcita

AIRE

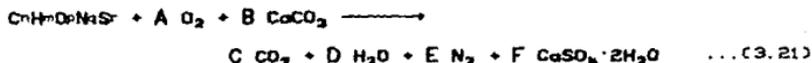
<u>Componente</u>	<u>Facción mol</u>	<u>Fase estable para:</u>
N_2	$0.7898(1-x_{H_2O})$	Nitrógeno
O_2	$0.2099(1-x_{H_2O})$	Oxígeno
CO_2	$0.0003(1-x_{H_2O})$	Carbono
H_2O	Pv_{apH_2O}/P_0	

FASES CONDENSADAS

Agua líquida como fase estable para el hidrógeno.
 Yeso, $CaSO_4 \cdot 2H_2O$, como fase estable para el azufre.
 Calcita, $CaCO_3$, como fase estable para el calcio.

Como se puede apreciar, se tuvo que incluir una fase estable para el calcio, ya que éste se introdujo en el AER al utilizar yeso como fase estable para el azufre.

Una vez definida la composición de medio ambiente, deben hacerse reaccionar componentes de éste con una corriente de proceso de fórmula $C_nH_mO_pN_qS_r$, de modo que los productos obtenidos sean también componentes del AER. La reacción en cuestión es:



Balaceando la ecuación química se obtiene:

$$A = \frac{1}{4} (m + 4n + 3r - 2p)$$

$$B = r$$

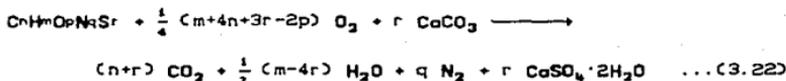
$$C = n + r$$

$$D = \frac{1}{2} (m - 4r)$$

$$E = q$$

$$F = r$$

Sustituyendo estos valores en (3.21) queda:



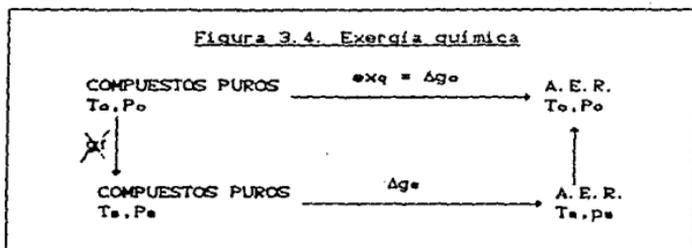
Para calcular la exergía química será necesario calcular los cambios de entalpía y entropía para la reacción a las condiciones de temperatura y presión del medio ambiente y aplicar la definición de exergía, que corresponde al cambio de energía libre de la reacción a estas condiciones:

$$exq = \Delta g_o = \Delta h_o - T_o \Delta s_o \quad \dots(3.23)$$

Las tablas de calores y energías de formación están basados típicamente en el valor arbitrario referido a los elementos puros en su forma más estable a 25°C (298.15K) y 1 atm. Para hacer el cálculo de la exergía química utilizando estas tablas se debe seguir la ruta mostrada en la figura 3.4.

De acuerdo a esta ruta, será necesario corregir los datos obtenidos a 25°C y 1 atm (T_o, P_o).

Figura 3.4. Exergía química



Primeramente, tenemos que, a las condiciones ambientales:

$$exq = \Delta g_o \quad \dots (3.24)$$

$$exq = \Delta h_o - T_o \Delta s_o \quad \dots (3.25)$$

Para calcular el calor de reacción a una temperatura diferente de T_o , según la ruta de la figura 3.3 se tendrá:

$$\Delta h_o = \int_{T_o}^{T_s} C_{pr} dT + \Delta h_s + \int_{T_s}^{T_o} C_{pp} dT \quad \dots (3.26)$$

$$\Delta h_o = \Delta h_s + \int_{T_s}^{T_o} \Delta C_p dT \quad \dots (3.27)$$

donde C_{pr} y C_{pp} son la suma de los calores específicos de los reactivos y de los productos, respectivamente, de la reacción 3.22 multiplicados por los coeficientes estequiométricos respectivos, y

$$\Delta C_p = C_{pp} - C_{pr} \quad \dots (3.28)$$

Igualmente, el cambio de entropía de la reacción será:

$$\Delta s_o = \int_{T_o}^{T_s} \frac{C_{pr}}{T} dT + \Delta s_s + \int_{T_s}^{T_o} \frac{C_{pp}}{T} dT \quad \dots (3.29)$$

$$\Delta s_o = \Delta s_e + \int_{T_e}^{T_o} \frac{\Delta C_p}{T} dT \quad \dots(3.30)$$

Sustituyendo 3.27 y 3.30 en 3.25:

$$ex_q = \Delta h_e - T_o \Delta s_e + \int_{T_e}^{T_o} \left(1 - \frac{T_o}{T} \right) \Delta C_p dT \quad \dots(3.31)$$

De la definición de energía libre:

$$\Delta g_e = \Delta h_e - T_e \Delta s_e \quad \dots(3.32)$$

$$\Delta s_e = \frac{\Delta h_e - \Delta g_e}{T_e} \quad \dots(3.33)$$

que aplicado a 3.31 da:

$$ex_q = \Delta h_e - \frac{T_o}{T_e} (\Delta h_e - \Delta g_e) + \int_{T_e}^{T_o} \left(1 - \frac{T_o}{T} \right) \Delta C_p dT \quad \dots(3.34)$$

reordenando términos:

$$ex_q = \frac{T_o}{T_e} \Delta g_e + \left(1 - \frac{T_o}{T_e} \right) \Delta h_e + \int_{T_e}^{T_o} \left(1 - \frac{T_o}{T} \right) \Delta C_p dT \quad \dots(3.35)$$

En esta ecuación para el cálculo de la exergía química se incluye la temperatura ambiente, la cual tiene variaciones diarias, geográficas y estacionales. Para fines de análisis termodinámico, sin embargo, conviene considerar una media, que según se aproxime a 25°C el segundo y tercer términos de la ecuación 3.35 tienden a cero y el cociente T_o/T_e se acerca a la unidad.

Se puede, entonces, aproximar el valor de la exergía química al calculado a 25°C para valores de T_o cercanos. La ecuación 3.21 se simplifica a:

$$ex_q \approx ex_{qs} = \Delta g_e \quad \dots(3.36)$$

Esta simplificación es equivalente a decir que el cambio en la energía libre de reacción no varía en un intervalo pequeño de temperatura.

Si tomamos la expresión para la energía libre de formación propuesta por Yaws y Chiang³:

$$g_f = A + B T + C T^2 \quad \dots(3.37)$$

y para una reacción química:

$$\Delta g_r = g_f \text{ productos} - g_f \text{ reactivos} \quad \dots(3.38)$$

Combinando 3.37 y 3.38 según las proporciones estequiométricas se obtiene una expresión para el cálculo de la energía libre de reacción como función de la temperatura:

$$\Delta g_r = \Delta A + \Delta B T + \Delta C T^2 \quad \dots(3.39)$$

Diferenciando esta expresión se obtiene:

$$d\Delta g_r = \Delta C T \, dT \quad \dots(3.40)$$

Dividiendo 3.40 entre 3.39 se obtiene el error relativo inherente a la suposición de considerar la energía libre de reacción como independiente de la temperatura:

$$\text{Err} = \frac{d\Delta g_r}{\Delta g_r} = \frac{\Delta C T}{\Delta A + \Delta B T + \Delta C T^2} dT \quad \dots(3.41)$$

La reacción química que se lleva a cabo con el medio ambiente es esencialmente una reacción de combustión. Tomando como ejemplo la combustión de metano:



y tomando los datos de la tabla 3.2, la energía libre de la reacción es:

$$\Delta g_r = -901.578 + 3.7338 \times 10^{-3} T - 2.5116 \times 10^{-6} T^2 \quad \dots(3.43)$$

³ Hydrocarbon Processing, Noviembre 1988, PP. 84-84

Sustituyendo estos datos en 3.41, con $T = 298.15K$:

$$\text{Err} = \pm 6.5337 \times 10^{-6} dT \quad \dots(3.44)$$

Si consideramos un diferencial de temperatura de $15^{\circ}C$, es decir una temperatura ambiente entre 10 y $40^{\circ}C$, el error relativo en el cálculo de A_{gr} , según 3.44, es de $\pm 0.0098\%$. En la tabla 3.3 se muestran los errores calculados para la combustión de otros hidrocarburos.

Tabla 3.3. Energías libres de formación.

$$g_f = A + B T + C T^2$$

NOMBRE	FORMULA	A	B	C
Oxígeno	O_2	0.0	0.0	0.0
Dióxido de carbono	CO_2	-393.36	-3.8212×10^{-5}	1.3322×10^{-6}
Agua	H_2O	-241.74	4.17×10^{-2}	7.4281×10^{-6}
Metano	CH_4	-75.262	7.925×10^{-2}	1.87×10^{-5}
Fenol	C_6H_6O	-97.896	2.114×10^{-1}	1.998×10^{-5}
Ciclooctano	C_8H_{16}	-131.71	7.2244×10^{-1}	6.2236×10^{-5}
1Ciclohexilhexadec	$C_{22}H_{44}$	-473.34	2.0702	1.3439×10^{-4}

Tabla 3.3. Errores en el cálculo de energía libre de reacción.

REACCION	A_{gr} kJ/mol	Err (%)
$CH_4 + 2O_2 \longrightarrow CO_2 + 2H_2O$	-800.7	± 0.0098
$C_6H_6O + 7O_2 \longrightarrow 6CO_2 + 3H_2O$	-3019.1	± 0.0512
$C_8H_{16} + 12H_2O \longrightarrow 8CO_2 + 8H_2O$	-5073.4	± 0.12
$C_{22}H_{44} + 33O_2 \longrightarrow 22CO_2 + 22H_2O$	-13882.2	± 0.13

El error resultante no es grande y se puede utilizar como valor para la exergía química el cambio de energía libre de la reacción a $25^{\circ}C$ y 1 Atm. Este número puede ser calculado una sola vez y almacenado en un banco de datos como *Exergía Química Estándar*. Este valor es el que se adopta en el presente trabajo.

Para poder incluir otro tipo de procesos como refrigeración, será necesario ampliar el AER, definiendo una fase estable para los halógenos. Estos se encuentran principalmente como iones en el agua de mar. El cálculo de propiedades termodinámicas en este estado se sale de los objetivos del presente trabajo, por lo que se tomarán directamente los valores de exergía química estándar reportados por Morris y Szargut⁴.

Estos autores reportan la exergía química de formación de los elementos en su forma más estable a 25°C y 1 Atm. Toman como fases de referencia al aire con una humedad relativa de 70%, agua de mar y componentes de la litósfera. El AER resultante se muestra en la tabla 3.4.

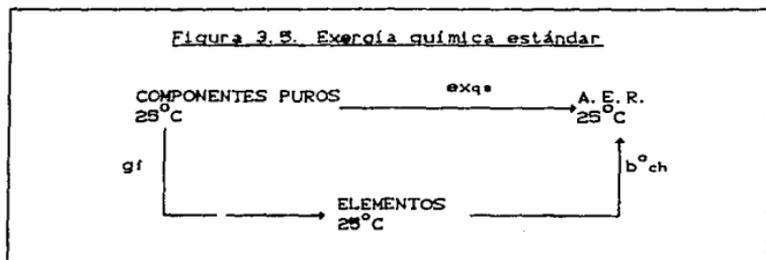
Tabla 3.4. Exergía química de formación estándar.

EXERGIA QUIMICA ESTANDAR PARA ESPECIES EN EL AIRE (25°C, 1atm)			
ESPECIE/A. E. R.	boch [kJ/mol]	ELEMENTO	exqe [kJ/mol]
N ₂	0.72	1/2 N ₂ g	0.360
O ₂	3.97	1/2 O ₂ g	1.985
CO ₂	19.87	C grafito	410.260
H ₂ O g	9.49	1/2 H ₂ g	118.045

EXERGIA QUIMICA ESTANDAR DE ESPECIES EN AGUA DE MAR (25°C, 1atm)			
ESPECIE/A. E. R.	gef [kJ/mol]	ELEMENTO	exqe [kJ/mol]
SO ₄ ²⁻	-744.63	S rómbico	609.50
F ⁻	-278.82	1/2 F ₂ g	233.15
Cl ⁻	-131.26	1/2 Cl ₂ g	61.90
Br ⁻	-103.97	1/2 Br ₂ l	50.00
IO ₃ ⁻	-129.00	1/2 I ₂ s	87.35

⁴ Energy, Vol. 11, No. 8 pp. 729-735, 1986

Para calcular la exergía química estándar a partir de estos datos, el camino que es necesario seguir es el mostrado en la figura 3.5.



Según esta ruta, la exergía química estándar se calculará como:

$$exq_i = gf_i + \sum_j v_{ij} b^{\circ}ch_j \quad \dots (3.45)$$

donde v_{ij} es el número de átomos de cada especie j en el compuesto i y $b^{\circ}ch_j$ es el valor de la exergía química estándar para el átomo j . Estos valores se calcularon y almacenaron en el banco de datos utilizado. La exergía química para una mezcla será:

$$exq = \sum x_i exq_i \quad \dots (3.46)$$

La ventaja de utilizar estos datos, además de tener un AER más completo, radica en que no es necesario plantear una reacción química, ya que el medio ambiente es tan grande que sus propiedades intensivas no cambiarán durante la reacción. Sin embargo, con este AER se obtienen resultados que no cumplen las recomendaciones antes mencionadas: para $Co(NO_2)_2$, $NaNO_2$, HNO_3 y para los óxidos de nitrógeno se calculan valores de exergía química positivos y relativamente altos. Esto nos indica que la formación de estos compuestos a partir del medio ambiente en forma espontánea es termodinámicamente favorable, pero no debe ser motivo de preocupación, ya que esta reacción está bloqueada desde el punto de vista cinético.

3.5. CALCULO DE LA EXERGIA TOTAL DE UNA CORRIENTE.

Para obtener las pérdidas externas de exergia debidas al desalojo de una corriente de proceso a la atmósfera, bastará con igualar éstas al valor absoluto de la exergia, que se calcula como:

$$ex = ex_f + ex_q \quad \dots(3.47)$$

donde ex_f está dada por la ecuación 3.20 y ex_q por la ecuación 3.46.

CAPÍTULO IV. MÉTODOS PARA REALIZAR BALANCES DE EXERGÍA

En este capítulo se presentarán dos métodos para realizar el balance de exergía. En el primero se calcula el cambio de exergía total en un bloque o equipo de proceso sin determinar por separado las exergías de cada corriente; en el segundo, el cálculo se hace a través de la determinación de la exergía de cada corriente.

4.1. METODO A TRAVES DE LA UNIDAD.

Al efectuar análisis termodinámico de procesos nos interesa conocer el cambio de exergía a través de los equipos en cuestión. Este valor se puede conocer sin que sea necesario calcular la exergía total de cada corriente que entra o sale del proceso.

Para cualquier proceso, como se vio en el capítulo anterior, el cambio de exergía se calcula de acuerdo con la ecuación:

$$\Delta Ex_{TOT} = \Delta H_{TOT} - T_0 \Delta S_{TOT} \quad \dots (4.1)$$

donde ΔH_{TOT} y ΔS_{TOT} son las diferencias de entalpia y entropía, respectivamente, de las corrientes de salida menos las correspondientes a las corrientes de entrada, es decir:

$$\Delta H_{TOT} = \sum_{Sal} \dot{M} h_s - \sum_{Ent} \dot{M} h_e \quad \dots (4.2)$$

$$\Delta S_{TOT} = \sum_{Sal} \dot{M} s_s - \sum_{Ent} \dot{M} s_e \quad \dots (4.3)$$

En muchas situaciones no es posible calcular el cambio de exergía dado por la ecuación 4.1, porque no se dispone de información para calcular el cambio de entropía de la ecuación 4.3. Sin embargo, el cambio de entalpia, ΔH_{TOT} , siempre es posible conocerlo porque basta con un balance de energía para calcularlo. En el método a través de la unidad se calcula el cambio de exergía sin el conocimiento del cambio de entropía, cuando se dispone del balance de materia y energía para un equipo, sección o un proceso completo.

El fundamento de este procedimiento se presenta a continuación:

Considerando a la entropía como una función de temperatura y presión, $S=S(T,P)$, el cambio diferencial de entropía será:

$$ds = \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_P dT + \left(\frac{\partial s}{\partial P}\right)_T dP \quad \dots(4.4)$$

Según las derivadas de la tabla 1.2:

$$\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_P = \frac{C_p}{T} \quad \dots(4.5)$$

$$\left(\frac{\partial s}{\partial P}\right)_T = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P \quad \dots(4.6)$$

Si utilizamos la forma general:

$$PV = ZRT \quad \dots(4.7)$$

y aplicamos la derivada 4.6 se obtiene:

$$\left(\frac{\partial s}{\partial P}\right)_T = -\left[\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{ZRT}{P}\right)\right]_P = -\frac{R}{P}\left(\frac{\partial ZT}{\partial T}\right)_P \quad \dots(4.8)$$

Se puede, además, considerar un valor medio del factor de compresibilidad entre los estados inicial y final del sistema, quedando:

$$\left(\frac{\partial s}{\partial P}\right)_T = -\frac{Z_m R}{P} \quad \dots(4.9)$$

Sustituyendo 4.5 y 4.9 en 4.4, se obtiene:

$$ds = \frac{C_p}{T} dT - \frac{Z_m R}{P} dP \quad \dots(4.10)$$

integrando esta expresión queda:

$$\int_{s_1}^{s_2} ds = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p}{T} dT - Z_m R \int_{P_1}^{P_2} \frac{dP}{P} \quad \dots(4.11)$$

para resolver esta integral utilizaremos el valor de la capacidad calorífica media, dada por:

$$C_{pm} = \frac{\int_{T_1}^{T_2} C_p dT}{T_2 - T_1} = \frac{\Delta h}{\Delta T} \quad \dots(4.12)$$

La integral 4.11 queda como:

$$\int_{s_1}^{s_2} ds = C_{pm} \int_{T_1}^{T_2} \frac{dT}{T} - Z_{mR} \int_{P_1}^{P_2} \frac{dP}{P} \quad \dots(4.13)$$

y la solución es:

$$\Delta s = C_{pm} \ln \frac{T_2}{T_1} - Z_{mR} \ln \frac{P_2}{P_1} \quad \dots(4.14)$$

Sustituyendo 4.12. en 4.14 obtenemos:

$$\Delta s = \Delta h \frac{\ln(T_2/T_1)}{\Delta T} - Z_{mR} \ln \frac{P_2}{P_1} \quad \dots(4.15)$$

Finalmente, utilizando la media logarítmica de temperaturas absolutas, dada por:

$$T_{LM} = \frac{T_2 - T_1}{\ln(T_2/T_1)} \quad \dots(4.18)$$

la diferencia de entropía será:

$$\Delta s = \frac{\Delta h}{T_{LM}} - Z_{mR} \ln \frac{P_2}{P_1} \quad \dots(4.17)$$

Sustituyendo este resultado en la definición de exergia, 3.7, obtenemos:

$$\Delta ex = \Delta h \left[1 - \frac{T_0}{T_{LM}} \right] + Z_{mR} T_0 \ln \frac{P_2}{P_1} \quad \dots(4.18)$$

o bien, en términos absolutos:

$$\Delta Ex = \Delta H \left[1 - \frac{T_0}{T_{LM}} \right] + Z_{mR} T_0 \ln \frac{P_2}{P_1} \quad \dots(4.19)$$

Utilizando esta expresión puede realizarse el balance de exergia a partir de datos del balance de energía. A este método se le conoce como método a través de la unidad. Debe tenerse presente, sin embargo, que en este procedimiento se han efectuado varias simplificaciones:

- 1.- Se utiliza el valor de la capacidad calorífica media.
- 2.- Se utiliza el valor medio del factor de compresibilidad. Para gases se puede emplear la media aritmética y para líquidos es necesario utilizar la media logarítmica.
- 3.- En el término de exergia física se considera que los términos por cambio de temperatura y presión son mucho mayores que el término por mezclado de corrientes.

4.2. METODO DEL CONOCIMIENTO DE LA CORRIENTE.

En este método se deben calcular las exergias absolutas de cada una de las corrientes que intervienen en el proceso. Para realizar el balance de exergia se utilizan las mismas reglas que para el balance de energía, es decir:

$$\Delta Ex = \sum_{Sal} \dot{M} ex_e - \sum_{Ent} \dot{M} ex_e \quad \dots(4.20)$$

para un proceso a régimen permanente.

La exergia de cada una de las corrientes de proceso se calcula mediante el método descrito en el capítulo anterior..

Si separamos los términos de exergia de la ecuación 4.20 en sus componentes física y química, tendremos que:

$$\Delta Ex_f = \sum_{Sal} \dot{M} ex_{f,e} - \sum_{Ent} \dot{M} ex_{f,e} \quad \dots(4.21)$$

$$\Delta Ex_q = \sum_{sal} M_{s,i} ex_{q,s} - \sum_{Ent} M_{e,i} ex_{q,e} \quad \dots(4.22)$$

Para procesos en los que no existe reacción química, la ecuación 4.20 resulta:

$$\Delta Ex_q = 0 \quad \dots(4.23)$$

y el valor obtenido con la ecuación 4.20 es el mismo que se obtiene al utilizar la ecuación 4.21. En estos casos se puede realizar el balance de exergía física o de disponibilidad e igualar el resultado al cambio total de exergía.

Cuando se analiza un proceso en el que exista una o más reacciones químicas, el valor obtenido mediante la aplicación de la ecuación 4.22 es mucho mayor que el calculado para la exergía física, es decir:

$$\Delta Ex_q \gg \Delta ex_f \quad \dots(4.24)$$

Para un análisis rápido, y sólo como una aproximación, podemos valernos de esta diferencia y evaluar un proceso mediante un balance de exergía química.

Es muy frecuente, en procesos reales, que las reacciones químicas se lleven a cabo a temperaturas altas, y al utilizar la simplificación anterior puede incurrirse en un error significativo. En estos casos deben calcularse ambas componentes de la exergía y realizar el balance con los valores de exergía totales obtenidos para cada corriente.

Como se mencionó en el capítulo II, para que un proceso se lleve a cabo será necesario sacrificar potencial. Desde el punto de vista del análisis exergético este potencial significa trabajo perdido.

Cuando se obtiene una diferencia de exergía negativa de la ecuación 4.20, el sistema disminuyó su potencial y el cambio es el trabajo máximo que podría ser obtenido.

Cuando se aumenta el potencial de un sistema, la diferencia de exergía es positiva y corresponde al trabajo mínimo necesario para impulsar el proceso.

El trabajo perdido es:

$$LW = W_{eq} - \Delta Ex \quad \dots(4.26)$$

que siempre resultará un valor positivo.

En ambos métodos, a través de la unidad y del conocimiento de la corriente, se puede aplicar la ecuación 4.25, que es el objetivo fundamental del análisis termodinámico de procesos.

4.3. ESTRATEGIAS PARA OPERACIONES UNITARIAS.

En todos los casos, al utilizar el método del conocimiento de la corriente, el balance de exergía se calcula de la misma manera. Cuando usamos el método a través de la unidad, pueden obtenerse expresiones particulares para diferentes operaciones unitarias.

PROCESO A BAJA PRESION Y ALTA TEMPERATURA

En este caso, puede suponerse un comportamiento de gas ideal, la ecuación 4.19 queda como:

$$\Delta Ex = \Delta H \left[1 - \frac{T_o}{T_{LM}} \right] + NRT_o \ln \frac{P_2}{P_1} \quad \dots(4.26)$$

que será aplicable, por ejemplo, a procesos de gasificación y combustión.

PROCESO ISOBARICO

El término de presiones de la ecuación 4.19 es cero, el cambio de exergía será:

$$\Delta Ex = \Delta H \left(1 - \frac{T_o}{TLM} \right) \quad \dots(4.27)$$

Como ejemplo de este tipo de procesos tenemos la evaporación de un componente puro.

PROCESO ISOENTALPICO

El primer término de la ecuación 4.19 es cero, de modo que:

$$\Delta Ex = ZmNRT_o \ln \frac{P_2}{P_1} \quad \dots(4.28)$$

El ejemplo clásico para este caso es una válvula de expansión.

PROCESO ISOTERMICO

En este caso no es necesario calcular la media logarítmica de temperaturas, la ecuación 4.19 queda:

$$\Delta Ex = \Delta H \left(1 - \frac{T_o}{T} \right) + ZmNRT_o \ln \frac{P_2}{P_1} \quad \dots(4.29)$$

En la mayoría de los casos puede suponerse isotérmico el comportamiento de una bomba, donde se aplicará esta ecuación.

MEZCLADO DE CORRIENTES

Para este proceso el cambio de entalpia es el ocurrido debido al mezclado, el término de presiones se puede sustituir por fugacidades, quedando:

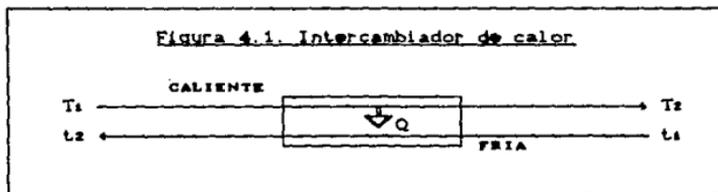
$$\Delta Ex = \Delta H_{\text{MEZCLADO}} \left(1 - \frac{T_0}{T_{LM}} \right) + RT_0 \sum_i N_i \ln \frac{1}{f_i} \quad \dots(4.30)$$

INTERCAMBIADORES DE CALOR

En este caso intervienen dos corrientes de proceso tal como se muestra en la figura 4.1.

El cambio total de exergía en el equipo es la suma de los cambios de exergía para cada corriente. El resultado es:

$$\Delta Ex = \Delta H_c \left(1 - \frac{T_0}{T_{LM}} \right) + Z_{m_c} N R T_0 \ln \frac{P_2}{P_1} + \Delta H_f \left(1 - \frac{T_0}{T_{LM}} \right) - Z_{m_f} n R T_0 \ln \frac{P_2}{P_1} \quad \dots(4.31)$$



El balance de energía para el intercambiador es:

$$Q = \Delta H_f = \Delta H_c \quad \dots(4.32)$$

de modo que la ecuación 4.31 queda:

$$\Delta Ex = QT_0 \left(\frac{1}{T_{LM}} - \frac{1}{T_{LM}} \right) + Z_{m_c} N R T_0 \ln \frac{P_2}{P_1} + Z_{m_f} n R T_0 \ln \frac{P_2}{P_1} \quad \dots(4.33)$$

que es aplicable a cualquier intercambiador de calor.

Normalmente, la caída de presiones en estos equipos no es muy grande, por lo que se puede simplificar la ecuación anterior como:

$$\Delta Ex = Q T_o \left(\frac{1}{T_{LM}} - \frac{1}{T_{LM}} \right) \quad \dots(4.34)$$

BOMBAS, TURBINAS Y COMPRESORES ADIABATICOS

El balance de energía para estos equipos es:

$$\Delta H = W \quad \dots(4.35)$$

y el trabajo perdido esta definido por la ecuación 4.25. Utilizando las ecuación 4.19 y 4.35 el trabajo perdido será:

$$LW = Z_m N R T_o \ln \frac{P_2}{P_1} - \Delta H \frac{T_o}{T_{LM}} \quad \dots(4.36)$$

que nos muestra directamente la energía perdida por irreversibilidades durante estas operaciones.

REACTORES

Al utilizar el método a través de la unidad puede aplicarse la simplificación que se manejó en el inciso anterior, ecuación 4.24. Para reacciones en fases condensadas, el término de presiones no tendrá una contribución significativa. Sin embargo, para fase gaseosa, el cambio de entropía debido a la presión será:

$$\Delta S_p = R \ln \prod \left(\frac{P_i}{P_o} \right)^{\nu_i} = R \ln K_p \quad \dots(4.37)$$

donde K_p es la constante de equilibrio de la reacción en fase gaseosa, evaluada como función de las presiones.

Sustituyendo 4.37 como el término de presiones en la ecuación 4.19 y tomando el cambio de entalpía de reacción se obtiene:

$$\Delta Ex = \Delta H_r \left[1 - \frac{T_o}{T_{LM}} \right] - RT_o \ln K_p \quad \dots (4.38)$$

El segundo término de esta ecuación será cero para reacciones que ocurran en fases condensadas.

4.4. INTERPRETACION DE RESULTADOS

Hasta aquí hemos estudiado cómo calcular la exergía y cómo realizar balances de exergía. Para ilustrar el uso que se puede dar a los resultados comparemos el análisis al utilizar balances de energía y de exergía a un proceso de producción de energía eléctrica. Ver figura 4.2.

En la figura 4.3 se muestran los diagramas de Sankey, energético, y de Grassman, exergético, para el proceso descrito. En ambos casos se parte de 100 unidades de energía, o exergía, de entrada en el combustible.

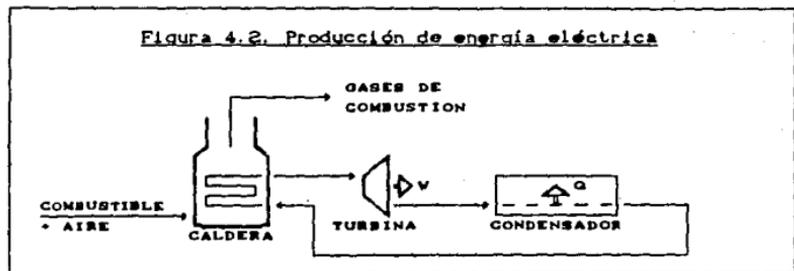
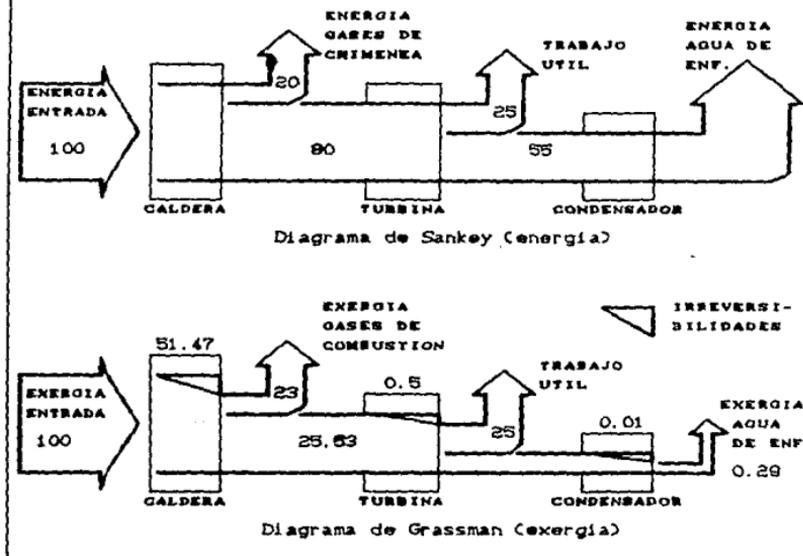


Figura 4.3. Diagramas de Sankey y de Grassman



El diagrama de Sankey, energía, nos indica que en el condensador se pierden 55 unidades de energía de cada 100 que entran al proceso. Para disminuir esta pérdida debe proponerse una solución que modifique la condensación.

El diagrama de Grassman, exergía, nos indica que la reacción de combustión es la principal causa de las irreversibilidades. La solución, según este diagrama, será modificar la combustión.

Es cierto que la mayor cantidad de energía se pierde en el agua de enfriamiento. Esto no debe preocuparnos ya que el valor de la exergía nos indica que la energía que se pierde está degradada y su potencial para realizar trabajo es mínimo.

Como se mencionó anteriormente, todos los procesos requieren una cantidad de trabajo para llevarse a cabo. Al disminuir esta cantidad de trabajo repercutirá en los costos de operación del proceso, que también disminuyen.

El análisis exergético, como se mencionó anteriormente, no nos indica las modificaciones que se deben efectuar al proceso para reducir el trabajo utilizado, pero sí indica en qué sección del proceso es necesario fijar la atención porque representa el mayor potencial. En el caso anterior, por ejemplo, el balance de exergía nos indica que la mayor parte de las pérdidas ocurren durante la combustión. Las modificaciones que se hagan al proceso deben idearse desde un punto de vista ingenieril, para garantizar que su operación sea factible. Una vez que se modifica el proceso deben repetirse los balances de exergía y comparar contra el proceso original.

CAPÍTULO V. MÉTODO A TRAVÉS DE LA UNIDAD

(SEPARACIÓN PROPANO-PROPILENO)

5.1. PRESENTACION DEL PROBLEMA.

Para ilustrar el método de análisis termodinámico a través de la unidad descrito en la sección 4.1, utilizaremos como ejemplo un sistema de separación propano-propileno.

Durante el análisis calcularemos los equipos del proceso aisladamente, utilizando las ecuaciones 4.19 y 4.25 para calcular el cambio de exergía y el trabajo perdido, respectivamente. Para los casos particulares tratados en la sección 4.3 se sustituye el uso de la ecuación 4.19 por la ecuación simplificada. Utilizaremos un valor de la temperatura ambiente $T_0=25^\circ\text{C}$.

Se requiere obtener una corriente de propileno con 98.9% de pureza a partir de una mezcla que contiene 35.2% en mol de propano y 64.8% de propileno. Se alimentan 363,220 moles/h de esta mezcla a 287.2K y 8.3 Bar.

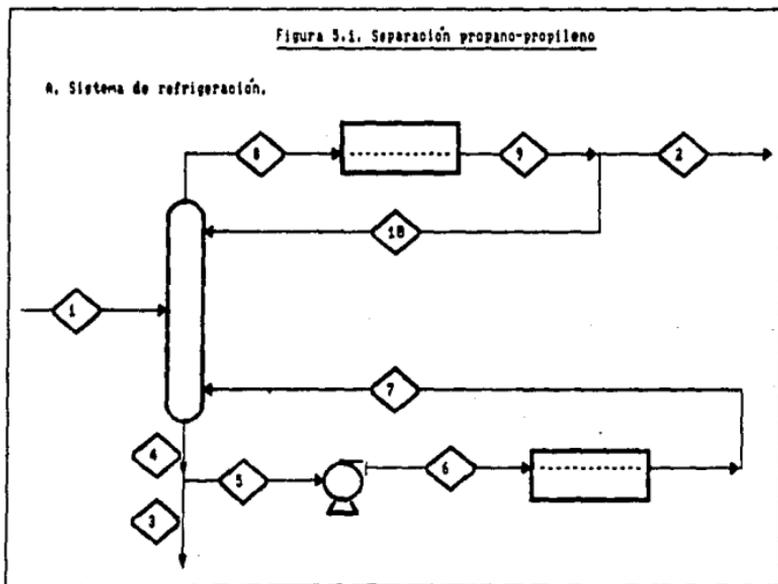
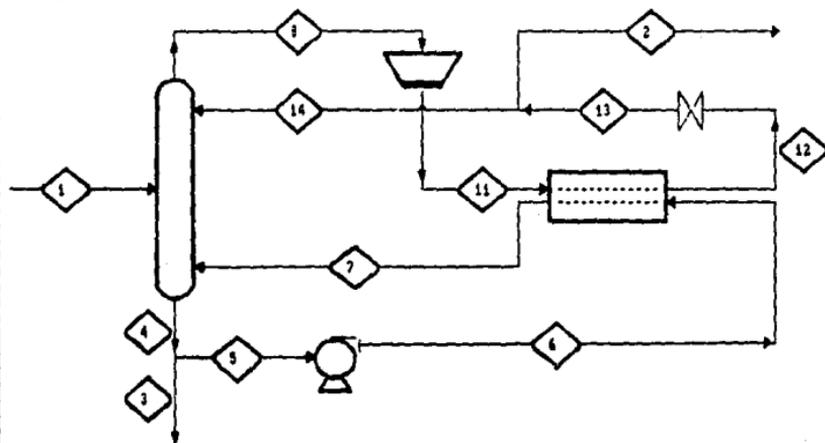
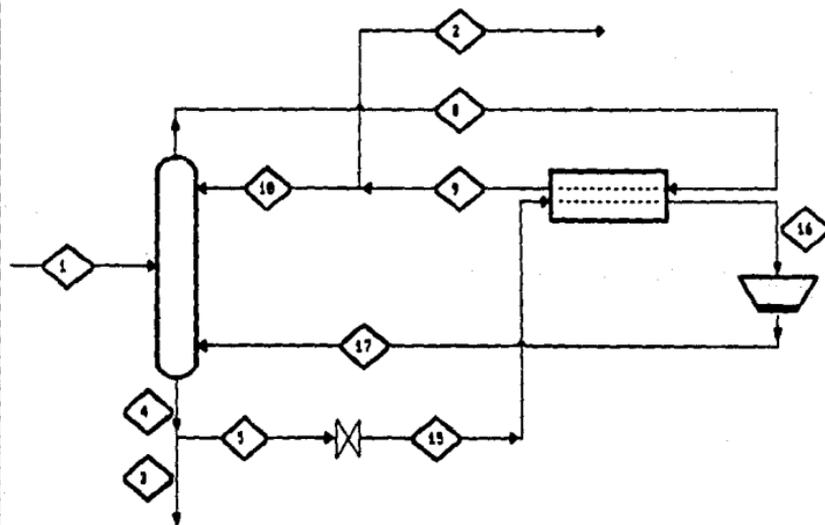


Figura 5.1. Condensación

B. Bomba de calor.



C. Expansión del líquido de los fondos.



Para llevar a cabo esta separación se proponen tres esquemas de destilación diferentes³ mostrados en la figura 5.1. Los balances de materia y energía se realizaron de manera externa y no son el propósito de este ejemplo. Los resultados se presentan directamente en la tabla 5.1. Corrientes con el mismo número en los tres esquemas corresponden a las mismas condiciones.

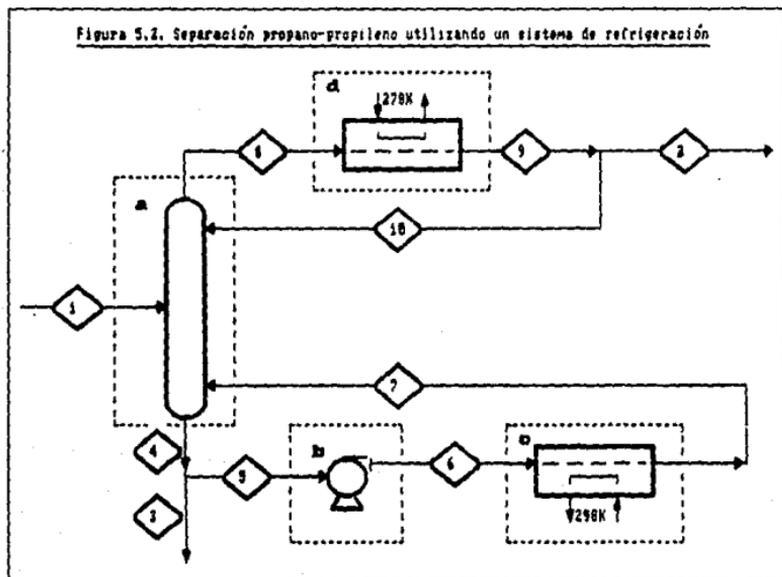
Tabla 5.1. Balance de energía sistema propano-propileno

CORR	gmol/h	T [K]	P [Bar]	H [MJ/h]	%C ₃ H ₆
1	363,220	287.20	8.300	-14,709.294	35.2
2	224,480	283.18	7.831	657.037	0.1
3	138,740	291.80	8.287	-15,392.380	92.0
4	4,591,347	291.80	8.287	-509,362.780	92.0
5	4,452,807	291.80	8.287	-493,990.380	92.0
6	4,452,807	291.86	8.800	-493,959.470	92.0
7	4,452,807	291.95	8.300	-426,083.920	92.0
8	4,489,606	285.40	8.331	83,152.141	0.1
9	4,489,606	283.18	7.831	13,140.753	0.1
10	4,265,126	283.18	7.831	12,483.716	0.1
11	4,489,606	301.94	11.000	86,793.823	0.1
12	4,489,606	292.83	10.500	17,918.269	0.1
13	4,489,606	283.18	7.831	17,918.269	0.1
14	4,265,126	283.18	7.831	17,261.232	0.1
15	4,452,807	274.14	5.000	-493,990.380	92.0
16	4,452,807	287.92	4.500	-424,059.430	92.0
17	4,452,807	319.00	8.300	-415,325.930	92.0

³ Jiménez M., Ricardo. Tesis F. Q. UNAM 1990

5.2. CASO A. UTILIZANDO UN SISTEMA DE REFRIGERACION.

En la figura 5.1A se muestra un sistema de destilación tradicional en donde los servicios requeridos por el condensador y el rehevridor se proporcionan de manera externa. Debido a los niveles de temperatura que se manejan, será necesario utilizar un sistema de refrigeración acoplado al condensador. La temperatura promedio del medio de enfriamiento es de 278K, considerando un ΔT mínimo en el condensador de 8.2K. El calor suministrado al rehevridor se proporciona por una fuente a 298K, considerando un ΔT mínimo en el rehevridor de 8.2K. En la figura 5.2 se muestran los diferentes partes del proceso para su análisis.



a) TORRE DE DESTILACION

El balance de energía en la torre estará dado por:

$$\Delta H = H_4 + H_6 - H_1 - H_7 - H_{10} \quad \dots(5.1)$$

y sustituyendo los datos de la tabla 5.1 se obtiene:

$$\Delta H = 1078.88 \text{ MJ/h} \quad \dots(5.2)$$

El cambio de exergía será:

$$\Delta Ex = \Delta H \left[1 - \frac{T_0}{T_{LM}} \right] \quad \dots(5.3)$$

Como las temperaturas de las corrientes involucradas no se alejan mucho entre sí, tomaremos el valor medio aritmético de temperaturas como la media logarítmica de las temperaturas absolutas, es decir:

$$T_{LM} \cong T_{AM} = 287.9 \text{ K} \quad \dots(5.4)$$

Entonces, el cambio de exergía en la torre, sustituyendo los resultados de 5.2 y 5.4 en la ecuación 5.3, resulta:

$$\Delta Ex = 1078.88 \left[1 - \frac{298.15}{287.9} \right] = -38.403 \text{ MJ/h} \quad \dots(5.5)$$

En este caso W y Q son cero, por lo cual $W_{eq}=0$ y el trabajo perdido es:

$$LW = W_{eq} - \Delta Ex = 0 - (-38.403) = 38.403 \text{ MJ/h} \quad \dots(5.6)$$

b) BOMBA PARA FONDOS

El balance de energía es:

$$W = H_6 - H_5 = 30.91 \text{ MJ/h} \quad \dots(5.7)$$

y el trabajo perdido, según la ecuación 4.36, será:

$$LW = \Delta H \frac{T_0}{T_{LM}} - Z_m N R T_0 \ln \frac{P_6}{P_5} \quad \dots(5.8)$$

La media logarítmica del factor de compresibilidad, calculado con la ecuación de estado de Soave es:

$$Z_m = 0.0333 \quad \dots(5.9)$$

y el trabajo perdido en la bomba es:

$$\begin{aligned}
 LW &= 30.91 \frac{208.15}{201.63} - (0.0333)(4452607)(8.3144 \times 10^{-6})(208.15) \ln \frac{8.8}{5.287} \\
 &= 9.485 \text{ MJ/h} \qquad \dots (5.10)
 \end{aligned}$$

c) REHERVIDOR

El calor requerido por el rehervidor es:

$$Q = H_7 - H_6 = 68875.55 \text{ MJ/h} \qquad \dots (5.11)$$

Despreciando el efecto de la caída de presión en el rehervidor, el cambio de exergía se calcula con la ecuación 4.34:

$$\Delta Ex = Q T_0 \left(\frac{1}{T_{LM}} - \frac{1}{T_{LM}} \right) \qquad \dots (5.12)$$

sustituyendo valores se obtiene:

$$\begin{aligned}
 \Delta Ex &= (68875.55)(208.15) \left(\frac{1}{208.15} - \frac{1}{201.6} \right) = -1473.664 \text{ MJ/h} \\
 &\dots (5.13)
 \end{aligned}$$

El trabajo perdido es:

$$LW = -\Delta Ex = 1473.664 \text{ MJ/h} \qquad \dots (5.14)$$

Esta cantidad de trabajo perdido se debe a la transferencia de calor a través de un gradiente de temperaturas. Como el calentamiento es externo, la cantidad de calor suministrado tiene, como se vio anteriormente (sección 3.3), una equivalencia como trabajo dada por la ecuación 2.24:

$$W_{eq} = Q \left(1 - \frac{T_0}{T} \right) \qquad \dots (5.15)$$

y en este caso, el trabajo equivalente al suministro de calor es:

$$W_{eq} = 68875.55 \left(1 - \frac{208.15}{208.15} \right) = 0 \qquad \dots (5.16)$$

d) CONDENSADOR

El calor que será necesario remover es:

$$Q = H_h - H_e = 70011.388 \text{ MJ/h} \quad \dots(5.17)$$

El cambio de exergía, utilizando la ecuación 4.34, es:

$$\Delta Ex = (70011.388)(298.15) \left[\frac{1}{294.28} - \frac{1}{278} \right] = -1658.971 \text{ MJ/h} \quad \dots(5.18)$$

y el trabajo perdido debido a la transferencia de calor es:

$$LW = 1658.971 \text{ MJ/h} \quad \dots(5.19)$$

Como el enfriamiento se lleva a cabo mediante una corriente externa al proceso, también se debe considerar el trabajo equivalente necesario para producir el refrigerante, que se calcula con la ecuación 3.1:

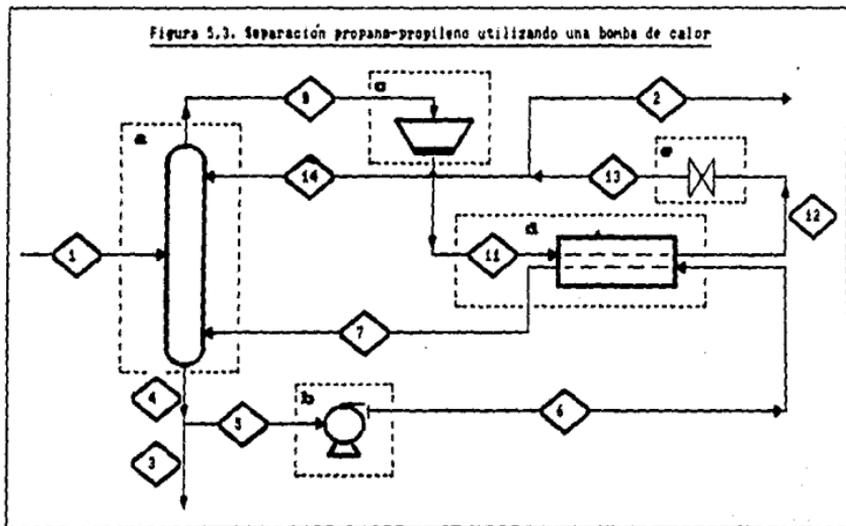
$$W_{eq} = Q_r \left[\frac{T_o}{T_F} - 1 \right] = 70011.388 \left[\frac{298.15}{278} - 1 \right] = 5074.568 \text{ MJ.h} \quad \dots(5.20)$$

que es el trabajo mínimo requerido por un circuito de refrigeración ideal (reversible) para suministrar el refrigerante requerido.

En la tabla 5.2 se resumen todos los resultados del análisis para comparar las diferentes alternativas.

5.3. CASO B. UTILIZANDO UNA BOMBA DE CALOR.

En esta modificación al proceso (figura 5.1B) se eliminan los servicios de calentamiento y de enfriamiento. Para lograrlo se comprime el vapor del domo de la torre aumentando su temperatura. El vapor comprimido se condensa y su calor se aprovecha en el rehervidor. Finalmente, el condensado se expande a través de una válvula y se separa en destilado y recirculación. En la figura 5.3 se muestran las diferentes secciones del proceso para su análisis.



a) TORRE

El balance energía en la torre es:

$$\Delta H = H_4 + H_6 - H_1 - H_7 - H_{14} = -3698.637 \text{ MJ/h} \quad \dots(5.21)$$

y el trabajo perdido será:

$$LW = -3698.637 \left[1 - \frac{298.15}{287.9} \right] = 131.681 \text{ MJ/h} \quad \dots(5.22)$$

b) BOMBA DE FONDOS

No hay cambios con respecto al caso anterior, por lo que se toman directamente los resultados obtenidos para el sistema de destilación tradicional calculados previamente:

$$W = 30.91 \text{ MJ/h} \quad \dots(5.7)$$

$$LW = 9.485 \text{ MJ/h} \quad \dots(5.10)$$

c) COMPRESOR

El balance de energía para el compresor es:

$$W = H_{11} - H_6 = 3641.682 \text{ MJ/h} \quad \dots(5.23)$$

El trabajo perdido se calcula utilizando la ecuación 4.36, es decir:

$$LW = \Delta H \frac{T_o}{T_{LM}} - Z_m R T_o \ln \frac{P_{11}}{P_6} \quad \dots(5.24)$$

Utilizando la ecuación de estado de Soave, el factor de compresibilidad medio es:

$$Z_m = 0.84 \quad \dots(5.25)$$

y el trabajo perdido:

$$LW = 3641.682 \frac{298.15}{293.0} - (0.84)(4489606)(8.3144 \times 10^{-6})(298.15) \ln \frac{11}{8.331}$$
$$= 1100.058 \text{ MJ/h} \quad \dots (5.28)$$

d) REHERVIDOR

Para comenzar, verifiquemos el balance de energía:

$$Q = H_7 - H_6 \stackrel{?}{=} H_{11} - H_{12} \quad \dots (5.27)$$

$$68875.55 = 68875.554 \quad \dots (5.28)$$

El cambio de exergía debido a la transferencia de calor a través de un gradiente de temperaturas se calcula mediante la ecuación 4.34, quedando:

$$\Delta Ex = (68875.55)(298.15) \left[\frac{1}{297.27} - \frac{1}{291.0} \right] = -1268.623 \text{ MJ/h}$$
$$\dots (5.29)$$

y el trabajo perdido es:

$$LW = 1268.623 \text{ MJ/h} \quad \dots (5.30)$$

En este caso no debe calcularse una cantidad de trabajo equivalente a la fuente de calor, ya que ésta forma parte del mismo proceso.

e) VALVULA DE EXPANSION

Verificando el balance de energía:

$$H_{12} \stackrel{?}{=} H_{13} \quad \dots (5.31)$$

$$17918.269 = 17918.269 \quad \dots (5.32)$$

El cambio de exergía está dado por la ecuación 4.28:

$$\Delta Ex = Z_m R T_o \ln \frac{P_{13}}{P_{12}} \quad \dots (5.33)$$

El factor de compresibilidad medio, utilizando la ecuación de estado de Soave, es:

$$Z_m = 0.0331 \quad \dots (5.34)$$

El cambio de exergía es:

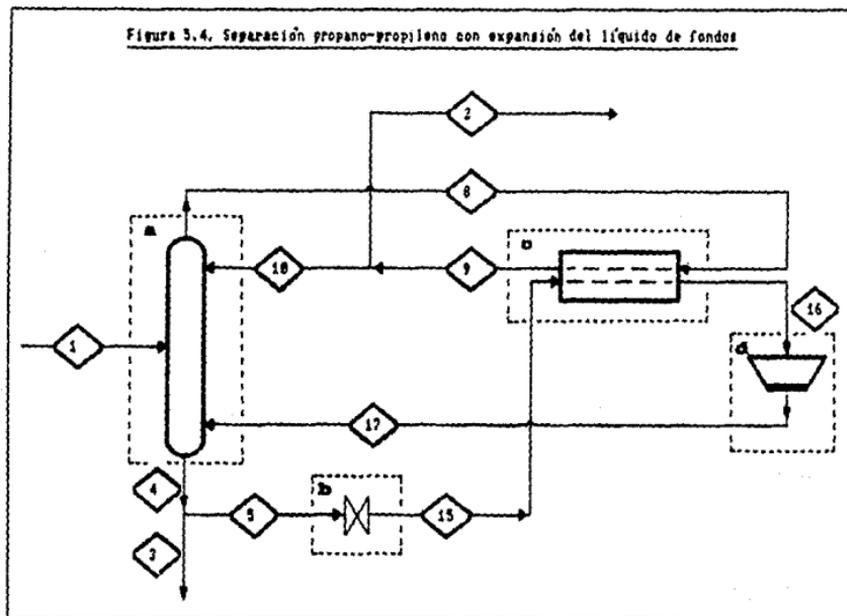
$$\begin{aligned} \Delta Ex &= (0.0331)(4489606)(8.3144 \times 10^{-6})(298.15) \ln \frac{7.831}{10.5} \\ &= -107.961 \text{ MJ/h} \quad \dots (5.35) \end{aligned}$$

y el trabajo perdido:

$$LW = 107.961 \text{ MJ/h} \quad \dots (5.36)$$

5.4. CASO C. EXPANSION DEL LIQUIDO DE FONDOS.

En esta alternativa (figura 5.1C) también se eliminan los servicios de calentamiento y enfriamiento. A diferencia del caso anterior, la modificación al proceso original se hace con la corriente de fondos. El líquido saturado de los fondos se expande en una válvula hasta llegar a una temperatura inferior a la del vapor del domo. Esta corriente se evapora aprovechando el calor cedido en el condensador. El vapor resultante se recomprime a la presión de operación del fondo de la torre y se recircula. En la figura 5.4 se muestran las diferentes secciones del proceso para su análisis.



a) TORRE

El balance de energía en la torre es:

$$\Delta H = H_4 + H_6 - H_1 - H_{10} - H_{17} = -8679.111 \text{ MJ/h} \quad \dots(5.37)$$

y el trabajo perdido será:

$$LW = -(-8679.111) \left[1 - \frac{298.15}{302.65} \right] = 129.347 \text{ MJ/h} \quad \dots(5.38)$$

b) VALVULA DE EXPANSION

Verificando el balance de energía:

$$H_5 \stackrel{?}{=} H_{15} \quad \dots(5.39)$$

$$-493990.38 = -493990.38 \quad \dots(5.40)$$

El trabajo perdido se calcula directamente como:

$$LW = -Z_m R T_o \ln \frac{P_{15}}{P_5} \quad \dots(5.41)$$

El factor de compresibilidad medio, utilizando la ecuación de estado de Soave, es:

$$Z_m = 0.0698 \quad \dots(5.42)$$

y el trabajo perdido es:

$$\begin{aligned} LW &= -(0.0698)(4452607)(8.3144 \text{ J}^{\circ}\text{K}^{-1}\text{mol}^{-1})(298.15) \ln \frac{5}{8.287} \\ &= 389.091 \text{ MJ/h} \quad \dots(5.43) \end{aligned}$$

c) CONDENSADOR

Para corroborar los datos del balance de energía, debe cumplirse que:

$$Q = H_{16} - H_{15} \stackrel{?}{=} H_e - H_v \quad \dots(5.44)$$

$$69930.95 \cong 70011.388 \quad \dots(5.45)$$

el error relativo es de 0.115%, que es un valor razonablemente pequeño.

El trabajo perdido es:

$$LW = -(70011.388)(298.15) \left(\frac{1}{284.28} - \frac{1}{280.98} \right) = 863.75 \text{ MJ/h} \quad \dots(5.46)$$

En este caso tampoco se requiere calcular un trabajo equivalente al calor intercambiado entre dos corrientes de proceso.

d) COMPRESOR

El trabajo consumido por el compresor es:

$$W = H_{17} - H_{16} = 8733.5 \text{ MJ/h} \quad \dots(5.47)$$

y el trabajo perdido, según la ecuación 4.38 es:

$$LW = \Delta H \frac{T_o}{T_{LM}} - Z_m N R T_o \ln \frac{P_{17}}{P_{16}} \quad \dots(5.48)$$

Utilizando la ecuación de estado de Soave, el factor de compresibilidad medio es:

$$Z_m = 0.903 \quad \dots(5.49)$$

y el trabajo perdido:

$$\begin{aligned} LW &= 8733.5 \frac{298.15}{305.2} - (0.903)(4452807)(8.314472)(298.15) \ln \frac{4.5}{8.3} \\ &= 2485.883 \text{ MJ/h} \quad \dots(5.50) \end{aligned}$$

Tabla 5.2. Análisis termodinámico sistema propano-propileno

A. Trabajo perdido

TRABAJO PERDIDO (MJ/h)	A	B	C
TORRE	38.403	131.881	129.347
BOMBA	9.485	9.485	
REHERVIDOR	1.473.684	1.288.623	
CONDENSADOR	1.858.971		863.750
COMPRESOR		1.100.058	2.485.883
VALVULA DE EXPANSION		107.961	389.091
TOTAL	3.180.523	2.617.808	3.668.071

B. Trabajo equivalente alimentado al proceso

TRABAJO EQUIVALENTE (MJ/h)	A	B	C
BOMBA	30.910	30.910	
REHERVIDOR	0.000		
CONDENSADOR	5.074.566		
COMPRESOR		3.841.882	8.733.500
TOTAL	5.105.476	3.872.592	8.733.500

5.5. INTERPRETACION DE RESULTADOS.

Según el análisis efectuado a las tres alternativas de proceso para la separación propano-propileno, podemos concluir que la mejor alternativa es el caso B, que consiste en incluir una bomba de calor al proceso. Este resultado se ve claramente en la tabla 5.2. El trabajo perdido es menor que en los otros casos y, además, el trabajo equivalente suministrado al proceso también es menor.

Analizando independientemente cada uno de los equipos, observamos que una de las pérdidas de exergía más importantes es la que ocurre debido a la transferencia de calor a través de un gradiente de temperaturas. Además, la pérdida de trabajo útil aumenta al disminuir la temperatura de transferencia de calor. Si a esto le sumamos que para extraer calor a temperaturas más bajas que la del ambiente es necesario incluir un sistema de refrigeración al proceso, se refuerza el argumento para evitar, dentro de lo posible, trabajar a estos niveles de temperatura.

Otro aspecto importante que puede deducirse del proceso estudiado es la conveniencia de integrar el proceso energéticamente, es decir tratar de disminuir el consumo de servicios al proceso.

En cuanto al equipo necesario para llevar a cabo la separación, el que mayor cantidad de operaciones unitarias requiere es el caso A (destilación tradicional), si consideramos al circuito de refrigeración. En los otros dos casos, el equipo que puede impactar fuertemente en los costos es el compresor. Sin embargo, en el circuito de refrigeración del caso A se utiliza un compresor que quedará disponible para el caso B al eliminar el enfriamiento externo al condensador.

Finalmente, debemos tener presente que el óptimo energético no será necesariamente el mismo que el óptimo económico. Podemos tomar al primero como una aproximación para obtener las condiciones de proceso que nos lleven a obtener el segundo, y sugerirnos modificaciones al proceso.

CAPITULO VI. MÉTODO DEL CONOCIMIENTO DE LA CORRIENTE
(PLANTA DE PRODUCCIÓN DE AMONIACO)

6.1. DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA.

Con el fin de ejemplificar el método de análisis termodinámico del conocimiento de la corriente, estudiaremos algunas partes de una planta de producción de amoníaco.

En esta planta se incluyen varios reactores, en los que se podrá apreciar el efecto que tiene la exergía química en la cantidad de trabajo perdido. Las diferentes partes del proceso se presentan por bloques con los balances de materia y energía correspondientes. En los cálculos se utilizó el programa de computadora desarrollado en esta tesis y que se incluye en el apéndice.

La planta cuenta con un sistema de generación de vapor que permite recuperar parte del calor que se pierde en el proceso, y que suministra calor y trabajo al mismo. Cuando se intercambia calor entre el proceso y el sistema de generación de vapor, únicamente se calcula la cantidad de trabajo equivalente asociada al calor suministrado o retirado, tal como se vió en la sección 3.3. Cuando se suministra trabajo al proceso, éste corresponde directamente al suministro de exergía.

Durante el análisis, algunos equipos se calcularon mediante una simulación rigurosa; y otros, en cambio, utilizando el concepto de caja negra; con el propósito de ilustrar diferentes opciones de cálculo. Los resultados se analizaron en cada caso tomando en cuenta el cambio de exergía global. La temperatura ambiente utilizada es de 25°C (530.67°R).

Las secciones de la planta analizadas se muestran en la figura 6.1, dividiendo con una línea punteada los diferentes bloques analizados.

Figura 6.1. Planta de producción de amoníaco.

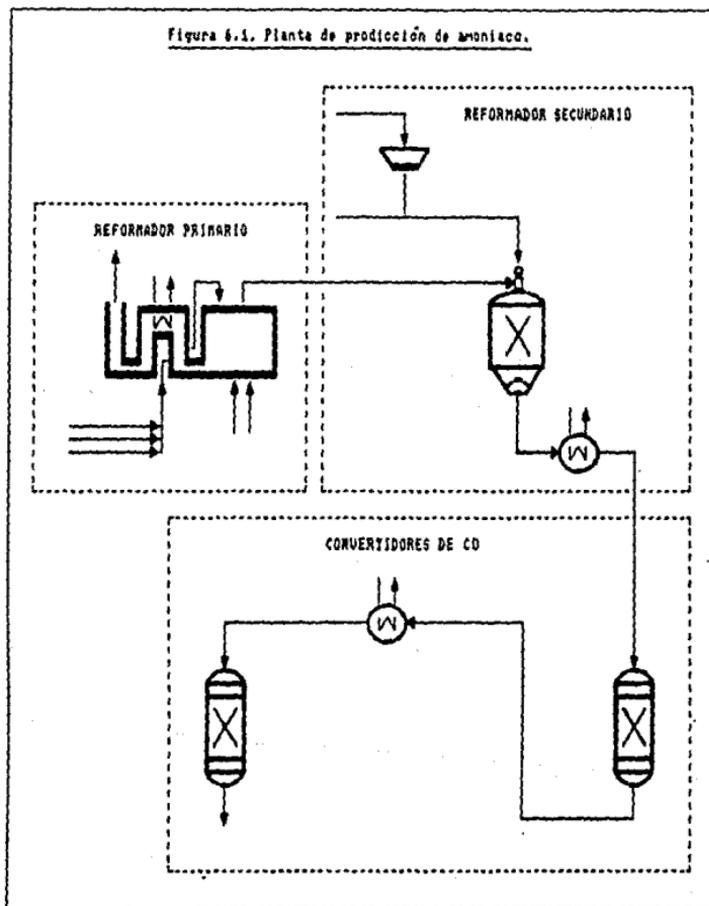
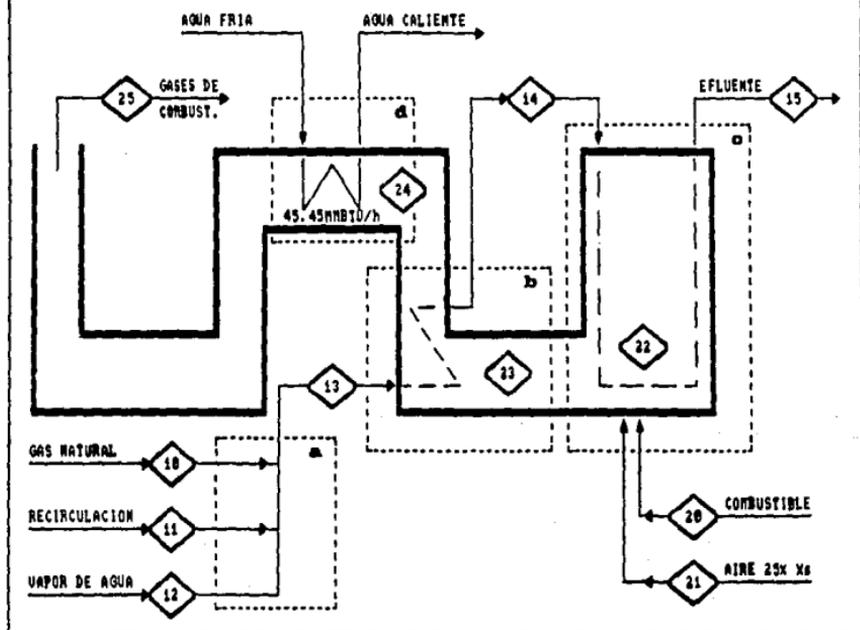


Figura 6.2. Línea de producción de vapor.

	REFORMADOR PRIMARIO	CONVERTIDORES DE CG	REFORMADOR SECUNDARIO
T (°F)	240	365.6	569.2
Q (BTU/h)	206.45	338.2	574.6
Q (BTU/h°F)	0.3533	0.5232	0.774
358,384 h/h			
ΔH (MMBTU/h)	45.4503	82.8158	299.3678
ΔB (MMBTU/h°F)	5.95166E-2	8.78561E-2	2.743578E-1
ΔE (MMBTU/h)	13.5895	35.6661	152.1166

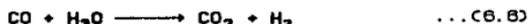
Figura 6.3. Reformador primario.



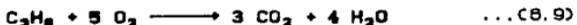
6.2. REFORMADOR PRIMARIO.

En este reactor (figura 6.3) se produce hidrógeno y monóxido de carbono a partir de gas natural y vapor de agua. Como la reacción es endotérmica, en el mismo equipo se quema gas natural, utilizando un 25% de exeso de aire con respecto a la cantidad estequiométrica, para suministrar el calor requerido. Además, se precalienta la mezcla de reacción y se genera vapor utilizando el calor de los gases de combustión.

Las reacciones que se llevan a cabo en el lecho catalítico del reactor son:



La combustión de gas natural para el suministro de calor está dada por las reacciones:



A continuación se presentan los resultados de los balances de materia, energía y exergía para este reactor:

REFORMADOR PRIMARIO

CORRIENTE		10	11	12	13
DEFINICION DE CORRIENTE:		GAS NATURAL	RECIRC.	VAPOR	MEZCLADO
T	[F] =	60.0000	231.0000	700.0000	544.1172
P	[PSIA] =	600.0000	600.0000	575.0000	575.0000
FLUJO	[lbmol/h] =	3621.1000	151.9000	13031.0000	16804.0000
Ex total	[MMBTU/h] =	1337.6607	12.5506	121.8924	1457.7490
Ex fisica	[MMBTU/h] =	13.5711	0.5227	69.8984	69.6376
Ex quimica	[MMBTU/h] =	1324.0896	12.0279	51.9940	1388.1114
H	[MMBTU/h] =	-119.2685	0.1088	-1294.8713	-1413.6448
S	[MMBTU/hF] =	-0.1005	-0.0007	-0.1531	-0.2269
Factor compresibiliada	=	0.9191	1.0194	0.9352	0.9286

COMPOSICION [Fraccion mol]

OXIGENO					
NITROGENO			0.246215		0.002226
ARGON			0.003292		0.000030
HIDROGENO			0.739302		3.006683
MONOXIDO DE CARBONO					
DIOXIDO DE CARBONO		0.000801			0.000173
METANO		0.971086	0.011192		0.209361
ETANO		0.027588			0.000095
PROPANO		0.000442			0.005945
ISOBUTANO		0.000028			0.000006
n-BUTANO		0.000055			0.000012
AGUA				1.000000	0.775470
TOTAL		1.000000	1.000000	1.000000	1.000000

DIFERENCIAS ENTRE CORRIENTES

13-(10+11+12)

dT	[F] =				
dP	[PSIA] =				
dEx total	[MMBTU/h] =				-14.3547
dEx fisica	[MMBTU/h] =				-14.3547
dEx quimica	[MMBTU/h] =				0.0000
dH	[MMBTU/h] =				0.3862
ds	[MMBTU/hF] =				0.0275

REFORMADOR PRIMARIO

CORRIENTE		14	15	20	21
DEFINICION DE CORRIENTE:		PRECALENT.	EFLUENTE RP	COMBUSTIBLE	AIRE
T	[F] =	950.0000	1568.0000	60.0000	60.0000
P	[PSIA] =	650.0000	485.0000	15.0000	15.0000
FLUJO	[lbmol/h] =	16804.0000	21654.8000	1359.8129	16653.7275
Ex total	[MMBTU/h] =	1496.8416	1719.6450	497.0052	1.0757
Ex fisica	[MMBTU/h] =	108.7302	201.2926	-0.1501	-10.1995
Ex quimica	[MMBTU/h] =	1388.1114	1518.3523	497.1553	11.2752
H	[MMBTU/h] =	-1341.3757	-1005.2100	-44.3355	-15.6375
S	[MMBTU/hF] =	-0.1650	0.0462	-0.0271	0.0141
Factor compresibilida	=	0.9842	1.0051	0.9979	0.9997

COMPOSICION [Fraccion mol]

OXIGENO					0.208333
NITROGENO	0.002226	0.001727			0.773810
ARGON	0.000030	0.000023			0.009921
HIDROGENO	0.006683	0.393589			
MONOXIDO DE CARBONO		0.054805			
DIOXIDO DE CARBONO	0.000173	0.057331	0.000801		
METANO	0.209361	0.059964	0.971086		
ETANO	0.000095		0.027588		
PROPANO	0.005945		0.000442		
ISOBUTANO	0.000006		0.000028		
n-BUTANO	0.000012		0.000055		
AGUA	0.775470	0.432560			0.007937
TOTAL	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000

DIFERENCIAS ENTRE CORRIENT

		14-13	15-14
dT	[F] =	405.8828	618.0000
dP	[PSIA] =	-25.0000	-65.0000
dEx total	[MMBTU/h] =	39.0926	222.8033
dEx fisica	[MMBTU/h] =	39.0926	92.5625
dEx quimica	[MMBTU/h] =	0.0000	130.2409
dH	[MMBTU/h] =	72.2691	336.1657
dS	[MMBTU/hF] =	0.0618	0.2112

REFORMADOR PRIMARIO

CORRIENTE		22	23	24	25
DEFINICION DE CORRIENTE:		T FLAMA	COMBUSTION	COMBUSTION	COMBUSTION
T	[F] =	3820.6571	1114.4914	600.0000	280.0000
P	[PSIA] =	15.0000	15.0000	15.0000	15.0000
FLUJO	[lbmol/h] =	18032.8648	18032.8648	18032.8648	18032.8648
Ex total	[MMBTU/h] =	341.8628	76.2075	33.7125	15.9886
Ex fisica	[MMBTU/h] =	312.5198	46.8645	4.3695	-13.3542
Ex quimica	[MMBTU/h] =	29.3430	29.3430	29.3430	29.3430
H	[MMBTU/h] =	-59.9729	-396.1386	-468.4078	-513.8581
S	[MMBTU/hF] =	0.2780	0.1467	0.0912	0.0395
Factor compresibilidad	=	1.0001	1.0003	1.0002	0.9996
COMPOSICION [Fraccion mol]					
OXIGENO		0.038480	0.038480	0.038480	0.038480
NITROGENO		0.714629	0.714629	0.714629	0.714629
ARGON		0.009162	0.009162	0.009162	0.009162
HIDROGENO					
MONOXIDO DE CARBONO					
DIOXIDO DE CARBONO		0.077562	0.077562	0.077562	0.077562
METANO					
ETANO					
PROPANO					
ISOBUTANO					
n-BUTANO					
AGUA		0.160167	0.160167	0.160167	0.160167
TOTAL		1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
DIFERENCIAS ENTRE CORRIENT					
		22-(20+21)	23-22	24-23	25-24
dT	[F] =	3760.6571	-2706.1657	-514.4914	-340.0000
dP	[PSIA] =	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
dEx total	[MMBTU/h] =	-156.2181	-266.6553	-42.4950	-17.7237
dEx fisica	[MMBTU/h] =	322.8696	-266.6553	-42.4950	-17.7237
dEx quimica	[MMBTU/h] =	-479.0876	0.0000	0.0000	0.0000
dH	[MMBTU/h] =	0.0000	-336.1657	-72.2691	-45.4503
dS	[MMBTU/hF] =	0.2911	-0.1314	-0.0555	-0.0517

Para calcular el cambio de exergía total en el reformador primario, aplicaremos el concepto de caja negra. Utilizando la ecuación 4.20 se obtiene:

$$\Delta Ex = \sum_{SAL} Ex_{Sal} - \sum_{ENT} Ex_{Ent} \quad \dots(6.12)$$

$$\Delta Ex_{RP} = (Ex_{25} + Ex_{15} + Ex_{Cal}) - (Ex_{10} + Ex_{11} + Ex_{12} + Ex_{20} + Ex_{21} + Ex_{Fria}) \quad \dots(6.13)$$

No disponemos de los valores de exergía de las corrientes de agua que se precalientan. Sin embargo, podemos calcular este cambio utilizando tablas de vapor. En la figura 6.2 se muestra la rama de agua y producción de vapor que aprovecha calor del proceso. Según las condiciones que se presentan, el cambio de exergía del agua que se precalienta es:

$$\Delta H = 45.4503 \text{ MMBTH/h} \quad \dots(6.14)$$

$$\Delta S = 5.95166 \times 10^{-2} \text{ MMBTU/h}^\circ R \quad \dots(6.15)$$

$$\Delta Ex = 45.4503 - (536.67)(5.95166 \times 10^{-2}) = 13.5095 \text{ MMBTU/h} \quad \dots(6.16)$$

Sustituyendo valores en la ecuación 6.13 se obtiene:

$$\Delta Ex_{RP} = -221.0414 \text{ MMBTU/h} \quad \dots(6.17)$$

En este equipo no tenemos suministro de calor ni de trabajo, por lo que:

$$W_{eq} = 0 \quad \dots(6.18)$$

$$(W_{eq})_{min} = -221.0414 \text{ MMBTU/h} \quad \dots(6.19)$$

$$LW = 221.0414 \text{ MMBTU/h} \quad \dots(6.20)$$

A continuación se efectuará el análisis termodinámico separando las diferentes contribuciones al trabajo perdido. En todos los casos, para las fronteras especificadas en la figura 6.3.; Q y W son cero. W_{eq} real es cero; y el trabajo perdido, LW, es igual al cambio de exergía, ΔEx , pero con signo contrario.

a) MEZCLADO DE CORRIENTES DE REACCION.

El cambio de exergía debido al mezclado de las corrientes 10, 11 y 12, que se encuentran a diferentes condiciones de presión y temperatura, para formar la mezcla de reacción, corriente 13, será:

$$\Delta Ex_{10,11,12 \rightarrow 13} = Ex_{13} - Ex_{10} - Ex_{11} - Ex_{12} = -14.3547 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.21)$$

que representa 0.40% de las pérdidas totales de exergía en el reformador primario.

b) PRECALENTAMIENTO DE LA MEZCLA DE REACCION.

El cambio de exergía para la mezcla de reacción es:

$$\Delta Ex_{13 \rightarrow 14} = Ex_{14} - Ex_{13} = 39.0928 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.22)$$

Este cambio de exergía positivo se compensa con el enfriamiento de los gases de combustión. Para éstos, el cambio de exergía es:

$$\Delta Ex_{23 \rightarrow 24} = Ex_{24} - Ex_{23} = -42.4050 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.23)$$

y el cambio total de exergía debido a la transferencia de calor es:

$$\Delta Ex_{\text{PREC}} = \Delta Ex_{13 \rightarrow 14} + \Delta Ex_{23 \rightarrow 24} = -3.4020 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.24)$$

que representa 1.54% del cambio total de exergía en el equipo.

c) REACCION QUIMICA

En esta sección del reformador primario tenemos dos reacciones químicas y transferencia de calor simultáneamente. El cambio de exergía debido a la reacción de producción de hidrógeno es:

$$\Delta Ex_{14 \rightarrow 15} = 222.8033 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.25)$$

que se divide en:

$$\Delta Ex_{14 \rightarrow 15} = 130.2409 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.26)$$

$$\Delta Ex_{14 \rightarrow 15} = 92.5624 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.27)$$

En la reacción de combustión tenemos que, a la temperatura de flama adiabática:

$$\Delta Ex_{\text{COMB}} = -156.2181 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.28)$$

y sus componentes son:

$$\Delta Ex_{\text{COMB}} = -479.0878 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.29)$$

$$\Delta Ex_{\text{COMB}} = 322.8695 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.30)$$

Además, el cambio de exergía de los gases de combustión al ceder calor es:

$$\Delta Ex_{22 \rightarrow 23} = -266.6553 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.31)$$

Finalmente, el cambio total de exergía en la zona de reacción es:

$$\Delta Ex_{\text{REAC}} = \Delta Ex_{14 \rightarrow 15} + \Delta Ex_{\text{COMB}} + \Delta Ex_{22 \rightarrow 23} = \boxed{-199.0701} \quad \dots (6.32)$$

que representa 90.08% del cambio total de exergía en el reformador primario. Dividiendo este cambio de exergía en sus dos componentes, es decir:

$$\Delta Ex_{\text{REAC}} = -348.8467 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.33)$$

$$\Delta Ex_{\text{REAC}} = 149.7766 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.34)$$

se nota claramente el efecto mayor de la exergía química.

Además, 156.2189 MMBTU/h (78.47%) se pierden durante la reacción de combustión de gas natural.

d) PRECALENTAMIENTO DE AGUA

La exergía cedida por los gases de combustión es:

$$\Delta Ex_{24 \rightarrow 25} = -17.7237 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.35)$$

y el cambio de exergía calculado para el agua es, según la ecuación 6.16:

$$\Delta Ex_{AGUA} = 13.5095 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.36)$$

y el cambio de exergía debido a la transferencia de calor es:

$$\Delta Ex_{PREC-AGUA} = \Delta Ex_{24 \rightarrow 25} + \Delta Ex_{AGUA} = -4.2142 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.37)$$

que representa 1.91% del cambio de exergía total en el equipo.

En la tabla 6.1 se resumen los cambios de exergía en el reformador primario por secciones, incluyendo la contribución que tienen al cambio total.

Tabla 6.1. Cambios de exergía en el reformador primario

<u>SECCION</u>	<u>ΔEx (MMBTU/h)</u>	<u>%</u>
a) Mezclado de corrientes de reacción	-14.3547	6.49
b) Pre calentamiento mezcla de reacción	-3.4024	1.54
c) Reacción química	-199.0701	90.06
d) Pre calentamiento de agua	-4.2142	1.91
TOTAL	-221.0419	100.00

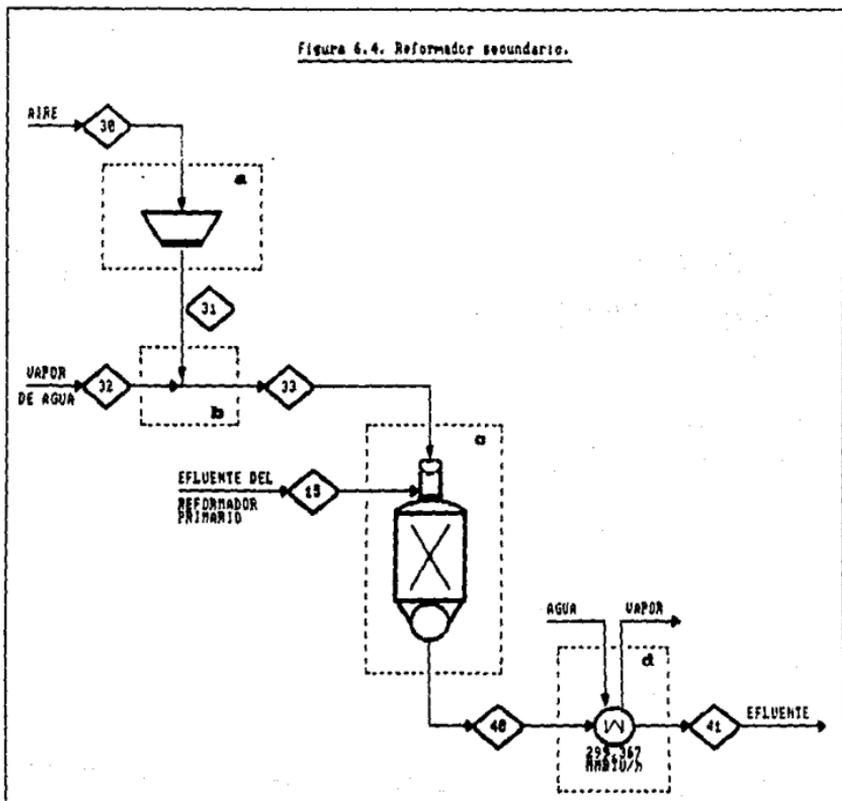
Además de estas pérdidas de exergía deberá considerarse el desalajo de los gases de combustión hacia la atmósfera (-15.9888 MMBTU/h). Las demás corrientes que cruzan la frontera de este equipo son materias primas o corrientes involucradas en otros pasos del proceso y su exergía es aprovechada posteriormente. Así, el trabajo perdido en el reformador primario es:

$$LW = W_{eq} - \Delta Ex = 0 - (-221.0414 - 15.9888)$$

$$LW = 237.0302 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.38)$$

6.3. REFORMADOR SECUNDARIO.

Figura 6.4. Reformador secundario.



En este reactor (figura 5.4) se alimenta una corriente de aire y vapor de agua junto con la corriente de salida del reformador primario. El objetivo de este reactor es aumentar la cantidad de hidrógeno que se utilizará más adelante en la reacción de síntesis de amoníaco. El reactor está aislado, de modo que la reacción ocurre en forma adiabática.

Las reacciones químicas involucradas son:



Dentro de este proceso consideraremos la compresión del aire y el mezclado de corrientes. Los resultados de los balances de materia, energía y exergía se presentan a continuación:

REFORMADOR SECUNDARIO

CORRIENTE		15	30	31	32
DEFINICION DE CORRIENTE:		EFLUENTE R.P.	AIRE	AIRE COMPR.	VAPOR
T	{ F } =	1568.0000	60.0000	1296.9506	700.0000
P	{ PSIA } =	485.0000	15.0000	485.0000	475.0000
FLUJO	{ lbmol/h } =	21654.8000	5142.3120	5142.3120	469.3880
Ex total	{ MMBTU/h } =	1719.6450	0.3322	38.1113	4.3249
Ex fisica	{ MMBTU/h } =	201.2926	-3.1494	34.6298	2.4520
Ex quimica	{ MMBTU/h } =	1518.3523	3.4815	3.4815	1.8729
H	{ MMBTU/h } =	-1005.2100	-4.8285	34.8755	-46.5972
S	{ MMBTU/hF } =	0.0462	0.0044	0.0079	-0.0053
Factor compresibilidad:	=	1.0051	0.9997	1.0106	0.9469

COMPOSICION {Fraccion mol}					
OXIGENO			0.208333	0.208333	
NITROGENO		0.001727	0.773810	0.773810	
ARGON		0.000023	0.009921	0.009921	
HIDROGENO		0.393589			
MONOXIDO DE CARBONO		0.054805			
DIOXIDO DE CARBONO		0.057331			
METANO		0.059964			
AQUA		0.432560	0.007937	0.007937	1.000000
TOTAL		1.000000	1.000000	1.000000	1.000000

DIFERENCIAS ENTRE CORRIENTES

			31-30
dT	{ F } =		1236.9506
dP	{ PSIA } =		470.0000
dEx total	{ MMBTU/h } =		37.7792
dEx fisica	{ MMBTU/h } =		37.7792
dEx quimica	{ MMBTU/h } =		0.0000
dH	{ MMBTU/h } =		39.7040
dS	{ MMBTU/hF } =		0.0036

REFORMADOR SECUNDARIO

CORRIENTE		33	40	41
DEFINICION DE CORRIENTE:		MEZCLADO	EFLUENTE RS	EFLUENTE RS
T	[F] =	1219.8631	1904.1147	700.0000
P	[PSIA] =	470.0000	450.0000	430.0000
FLUJO	[lbmol/h] =	5611.7000	28672.4000	28672.4000
Ex total	[MMBTU/h] =	40.5300	1700.6431	1494.1877
Ex física	[MMBTU/h] =	35.1755	313.5021	107.0467
Ex química	[MMBTU/h] =	5.3544	1387.1409	1387.1409
H	[MMBTU/h] =	-11.7217	-1016.9317	-1316.2987
S	[MMBTU/hF] =	0.0062	0.1633	-0.0098
Factor compresibilidad:	=	1.0102	1.0052	0.9994
COMPOSICION	[Fraccion mol]			
OXIGENO		0.190905		
NITROGENO		0.709090	0.140086	0.140086
ARGON		0.009088	0.001796	0.001796
HIDROGENO			0.356353	0.356353
MONOXIDO DE CARBONO			0.080363	0.080363
DIOXIDO DE CARBONO			0.047527	0.047527
METANO			0.002089	0.002089
AGUA		0.090917	0.371786	0.371786
TOTAL		1.000000	1.000000	1.000000
DIFERENCIAS ENTRE CORRIENTES		33-(31+32)	40-(15+33)	41-40
dT	[F] =			-1204.1147
dP	[PSIA] =			-20.0000
dEx total	[MMBTU/h] =	-1.9063	-59.5318	-206.4554
dEx física	[MMBTU/h] =	-1.9063	77.0339	-206.4554
dEx química	[MMBTU/h] =	0.0000	-136.5658	0.0000
dH	[MMBTU/h] =	0.0000	0.0000	-299.3670
dS	[MMBTU/hF] =	0.0036	0.1109	-0.1731

Primero calcularemos el balance de exergía global para todo el bloque presentado:

$$\Delta Ex_{AS} = (Ex_{41}) - (Ex_{15} + Ex_{90} + Ex_{32}) + \Delta Ex_{DOMO} \quad \dots (6.43)$$

donde $\Delta Ex_{DOMO} = Ex_{VAP} - Ex_{LIQ}$.

Consultando nuevamente la figura 6.2 para obtener el cambio de exergía en el domo de generación de vapor, obtenemos:

$$\Delta H = 299.3670 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.44)$$

$$\Delta S = 2.743578 \times 10^{-1} \text{ MMBTU/h}^\circ R \quad \dots (6.45)$$

$$\Delta Ex_{DOMO} = 299.3670 - (536.67)(2.743578 \times 10^{-1}) = 152.1166 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.46)$$

Así, el cambio de exergía total para esta sección de la planta es:

$\Delta Ex_{AS} = -77.9977 \text{ MMBTU/h}$	$\dots (6.47)$
---	----------------

El análisis termodinámico separando las diferentes contribuciones de cada sección se muestra a continuación:

a) COMPRESION DE AIRE.

El cambio de exergía en este equipo, que corresponde con el trabajo mínimo requerido, es:

$$\Delta Ex_{90-91} = 37.7792 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.48)$$

El balance de energía nos indica, para un compresor adiabático, que:

$$\Delta H = W = 39.7040 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.49)$$

y la eficiencia del compresor utilizado es:

$$\eta = \frac{\Delta Ex}{\Delta H} = \frac{37.7792}{39.7040} = 0.9515 \quad \dots (6.50)$$

Al analizar este equipo no debe considerarse el cambio de exergía, sino el trabajo perdido, el cual será:

$$LW = W_{eq} - \Delta Ex = 39.7040 - 37.7792 = 1.9284 \text{ MMBTU/h} \quad \dots(6.51)$$

Este trabajo perdido representa 1.64% del trabajo perdido total en esta sección del proceso.

b) MEZCLADO DE CORRIENTES.

El cambio de exergía debido al mezclado de las corrientes 31 y 32 para formar la corriente 33 es:

$$\Delta Ex_{31,32 \rightarrow 33} = -1.9063 \text{ MMBTU/h} \quad \dots(6.52)$$

que representa 1.02% del trabajo perdido total.

c) REACTOR ADIABATICO

En este reactor no existe transferencia de calor, por lo que todo el calor generado por la reacción química es absorbido por los productos de la reacción. El cambio de exergía es:

$$\Delta Ex_{REAC} = -50.5318 \text{ MMBTU/h} \quad \dots(6.53)$$

que es 50.58% del trabajo perdido en la sección del reformador secundario.

El cambio de exergía se puede separar en sus dos contribuciones como:

$$\Delta Ex_{REAC} = -136.5057 \text{ MMBTU/h} \quad \dots(6.54)$$

$$\Delta Ex_{REAC} = 77.0339 \text{ MMBTU/h} \quad \dots(6.55)$$

d) GENERACION DE VAPOR

El cambio de exergía del efluente del reformador secundario es:

$$\Delta Ex_{40+41} = -206.4554 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.56)$$

y el cambio de exergía en la generación de vapor es, según la ecuación 6.48:

$$\Delta Ex_{\text{DOMO}} = 152.1166 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.57)$$

El cambio de exergía total durante la transferencia de calor es:

$$\Delta Ex_{\text{GEN. VAP}} = \Delta Ex_{40+41} + \Delta Ex_{\text{DOMO}} = -54.3388 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.58)$$

que representa 46.16% del trabajo perdido en esta sección de la planta.

En la tabla 6.2 se resumen los cambios de exergía, trabajo perdido y contribuciones de cada sección para el reformador secundario.

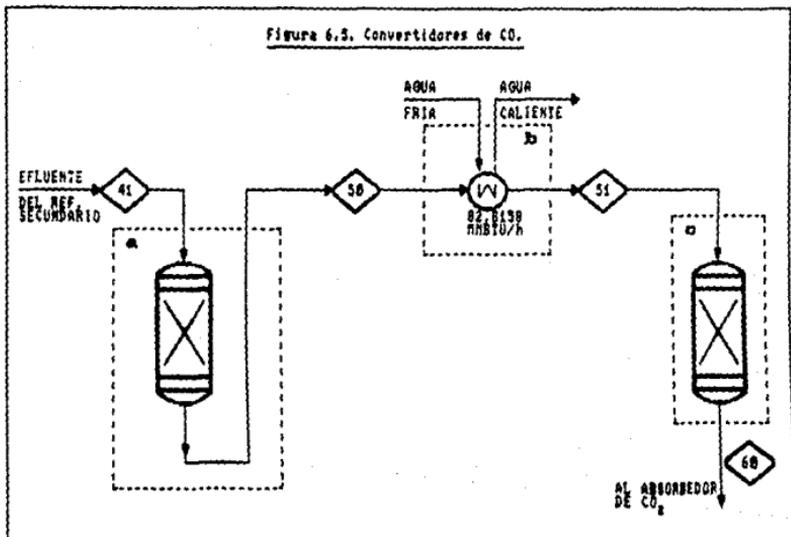
Tabla 6.2. Trabajo perdido en el reformador secundario

<u>SECCION</u>	<u>ΔEx [MMBTU/h]</u>	<u>LW [MMBTU/h]</u>	<u>%LW</u>
a) Compresor de aire	37.7792	1.9284	1.64
b) Mezcla de corrientes	-1.9063	1.9063	1.62
c) Reactor adiabático	-59.5318	59.5318	50.58
d) Generación de vapor	-54.3388	54.3388	46.16
TOTAL	-77.9977	117.7053	100.00

6.4. CONVERTIDORES DE CO.

En esta sección del proceso tenemos dos reactores y un intercambiador de calor intermedio (figura 6.5). Ambos son reactores adiabáticos y su propósito es transformar el CO a CO₂.

La reacción que se lleva a cabo en ambos reactores es:



A continuación se presentan los balances de materia, energía y exergía para estos equipos:

CONVERTIDORES DE CO

CORRIENTE		41	50	51	60
DEFINICION DE CORRIENTE:		EFLUENTE RS	CO ALTA T	CO ALTA T	CO BAJA T
T	[F] =	700.0000	817.0576	466.0000	501.7447
P	[PSIA] =	430.0000	430.0000	410.0000	400.0000
FLUJO	[lbmol/h] =	28672.4000	28672.4000	28672.4000	28672.4000
Ex total	[MMBTU/h] =	1494.1877	1491.0098	1447.4143	1445.7847
Ex fisica	[MMBTU/h] =	107.0467	124.6690	81.0735	85.5502
Ex química	[MMBTU/h] =	1387.1409	1366.3408	1366.3408	1360.2345
H	[MMBTU/h] =	-1316.2987	-1316.2987	-1399.1145	-1399.1145
S	[MMBTU/hF] =	-0.0098	-0.0039	-0.0770	-0.0739
Factor compresibilidad:	=	0.9994	1.0030	0.9931	0.9958
COMPOSICION [Fraccion mol]					
OXIGENO					
NITROGENO		0.140086	0.140086	0.140086	0.140086
ARGON		0.001796	0.001796	0.001796	0.001796
HIDROGENO		0.356353	0.415731	0.415731	0.433162
MONOXIDO DE CARBONO		0.080363	0.020985	0.020985	0.003554
DIOXIDO DE CARBONO		0.047527	0.106904	0.106904	0.124336
METANO		0.002089	0.002089	0.002089	0.002089
AGUA		0.371786	0.312408	0.312408	0.294977
TOTAL		1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
DIFERENCIAS ENTRE CORRIENTES					
dT	[F] =		117.0576	-351.0576	35.7447
dP	[PSIA] =		0.0000	-20.0000	-10.0000
dEx total	[MMBTU/h] =		-3.1779	-43.5955	-1.6296
dEx fisica	[MMBTU/h] =		17.6223	-43.5955	4.4767
dEx química	[MMBTU/h] =		-20.8002	0.0000	-6.1063
dH	[MMBTU/h] =		0.0000	-82.8158	0.0000
dS	[MMBTU/hF] =		0.0059	-0.0731	0.0030

El cambio de exergía global para esta sección del proceso es:

$$\Delta Ex_{CONV} = Ex_{60} - Ex_{41} + \Delta Ex_{AGUA} \quad \dots(8.60)$$

Tomando los datos de la figura 8.2 para obtener el balance de exergía para el agua obtenemos:

$$\Delta H = 82.8158 \text{ MMBTU/h} \quad \dots(8.61)$$

$$\Delta S = 8.78561 \text{E-2 MMBTU/h}^{\circ}R \quad \dots(8.62)$$

$$\Delta Ex_{AGUA} = 82.8158 - (538.67)(8.78561 \text{E-2}) = 35.6661 \text{ MMBTU/h} \quad \dots(8.63)$$

Sustituyendo valores, el cambio de exergía global para esta sección es:

$$\Delta Ex_{CONV} = -12.7360 \text{ MMBTU/h} \quad \dots(8.64)$$

En esta parte del proceso existen tres contribuciones al trabajo perdido, que son:

a) CONVERTIDOR DE CO A ALTA TEMPERATURA.

El cambio de exergía en este reactor es:

$$\Delta Ex_{41+50} = -3.1779 \text{ MMBTU/h} \quad \dots(8.65)$$

que representa 24.95% de las pérdidas de trabajo útil en esta sección del proceso.

Separando el cambio de exergía en sus dos contribuciones, tenemos:

$$\Delta Ex_{41+50} = -20.8002 \text{ MMBTU/h} \quad \dots(8.66)$$

$$\Delta Ex_{41+50} = 17.6223 \text{ MMBTU/h} \quad \dots(8.67)$$

b) PRECALENTADOR DE AGUA.

El cambio de exergía de la corriente de proceso al ceder su calor es:

$$\Delta Ex_{30 \rightarrow 51} = -43.5955 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.68)$$

El cambio de exergía del agua al calentarse es, de la ecuación 6.63:

$$\Delta Ex_{\text{AGUA}} = 35.0661 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.69)$$

Para la transferencia de calor, el cambio total de exergía es:

$$\Delta Ex_{\text{PREC}} = -7.0294 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.70)$$

que representa 62.26% del cambio total de exergía en esta sección del proceso.

c) CONVERTIDOR DE CO A BAJA TEMPERATURA.

El cambio de exergía en este reactor es:

$$\Delta Ex_{51 \rightarrow 60} = -1.6206 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.71)$$

que representa 12.79% del trabajo perdido en esta sección del proceso.

Separando el cambio de exergía en sus dos contribuciones, tenemos:

$$\Delta Ex_{a_{51 \rightarrow 60}} = -0.1063 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.72)$$

$$\Delta Ex_{r_{51 \rightarrow 60}} = 4.4787 \text{ MMBTU/h} \quad \dots (6.73)$$

En la tabla 6.3 se resumen las pérdidas de exergía en cada sección y su contribución al trabajo perdido total.

Tabla 6.3. Cambios de exergía en los convertidores de CO

<u>SECCION</u>	<u>ΔEx [MMBTU/h]</u>	<u>%</u>
a) Convertidor de CO alta temperatura	-3.1770	24.05
b) Pre calentador de agua	-7.0294	52.28
c) Convertidor de CO baja temperatura	-1.6296	12.70
TOTAL	-12.7359	100.00

6.5. INTERPRETACION DE RESULTADOS.

De las tres partes del proceso estudiadas, el reformador primario representa la mayor cantidad de trabajo perdido. Dentro de éste, identificamos a la zona de reacción como la principal causa de las irreversibilidades.

Existen dos reacciones químicas en esta zona: la de producción de hidrógeno y la de combustión de gas natural. En la primera, la mezcla reaccionante gana calor y aumenta su exergía. La segunda reacción cede el calor necesario para la primera y pierde exergía. Sin embargo, la ganancia de exergía en la reacción de formación de hidrógeno no compensa las pérdidas de exergía durante la combustión. A continuación se presentan posibles soluciones para mejorar esta sección del reformador primario:

- Disminuir el exeso de aire durante la combustión. Con esto se disminuye la cantidad de gas natural quemado, y las pérdidas por el desalajo de los gases de chimenea bajan. La temperatura de flama adiabática será mayor y los gases de combustión tendrán un mayor potencial.

- Precalentar el gas natural y el aire. Este aspecto refuerza al anterior y disminuye el consumo de gas natural como combustible.
- Disminuir la temperatura de la reacción de producción de hidrógeno. Esto con el propósito de sustituir el medio de calentamiento. Puede utilizarse el calor cedido por la corriente de salida del reformador secundario y así se disminuye el consumo de gas natural. Esta solución representa modificar las condiciones de la catálisis de la reacción y representa un gran trabajo de desarrollo de tecnología.

La siguiente pérdida de trabajo más importante está en la generación de vapor. Claramente se observa que el problema está en el alto gradiente de temperaturas. La media logarítmica de la diferencia de temperaturas es de 428.5°F. Este calor puede utilizarse, por ejemplo, para calentar la reacción de producción de hidrógeno en el reformador primario, con lo que se disminuye el consumo de combustible.

En estos dos puntos principales tenemos identificado el 89% de las pérdidas totales de trabajo.

Otra pérdida importante es la reacción adiabática en el reformador secundario, que representa 18.2% del total de trabajo perdido. Para modificar esta sección del proceso se requiere también cambiar las condiciones de reacción, entre ellas la catálisis.

Las demás secciones estudiadas significan entre todas 14.8% de las pérdidas totales de trabajo útil, por lo que no es necesario aplicarse demasiado en ellas.

CONCLUSIONES

Para calcular la exergía de una corriente de proceso basta con una pequeña adición a un programa de cálculo de propiedades termodinámicas. Sin embargo, el programa debe incluir los cálculos tradicionales de equilibrio de fases para determinar las condiciones las corrientes presentes en un proceso. La metodología para el cálculo de propiedades basada en ecuaciones de estado está plenamente probada y, por lo tanto, los valores de la exergía obtenidos serán igualmente confiables.

Al utilizar el AER propuesto por Morris y Szargut se podrán incluir 49 elementos diferentes, lo que nos permitirá calcular la exergía química de un gran número de compuestos. Además, si aplicamos las recomendaciones mencionadas para la selección de componentes del AER, podemos incluir casi cualquier elemento a éste, y calcular la exergía química del compuesto deseado.

En el cálculo de la exergía química pueden presentarse problemas cuando se manejan fracciones del petróleo. En este caso, generalmente, se definen pseudocomponentes mediante su temperatura de ebullición (TBP), densidad ($^{\circ}$ API), y masa molecular promedio; pero no se dispone de la fórmula exacta de los componentes. Ante esta situación se recomienda caracterizar al pseudocomponente como un compuesto puro de propiedades similares.

En este trabajo se presentaron dos técnicas diferentes para realizar el análisis termodinámico de procesos. En ambas, el procedimiento es tan sencillo como realizar balances de energía. El aspecto importante del análisis termodinámico de procesos es la interpretación de los resultados.

En el primer ejemplo se mostró la comparación entre diferentes alternativas para un mismo proceso. Este caso se presenta durante el diseño de una planta nueva, o la modificación de otra ya existente.

En el segundo ejemplo, el análisis se efectúa sobre las condiciones de operación en una planta existente, pero sólo en algunas partes de la planta. Aquí se puede ver claramente que mediante el análisis exergético se identifican las secciones de un proceso en las que debe fijarse la atención para disminuir el consumo de energéticos.

Para realizar el balance de exergía no se ha hecho a un lado el balance de energía. Ambos son importantes y el primero complementa al segundo.

Según los resultados obtenidos se puede generalizar que las principales causas de trabajo perdido se deben a:

- *Reacciones químicas desviadas del punto de equilibrio.* Esto es necesario, como se explicó en el capítulo II, para que la reacción ocurra. El valor de trabajo perdido en reactores no será totalmente recuperable, sino que sólo una parte de éste se puede disminuir según el nivel de avance tecnológico actual. Para que los resultados obtenidos en estos equipos sean comparables con otros equipos del proceso se recomienda definir un reactor práctico óptimo, el cual será único para cada caso particular. El reactor práctico óptimo será aquel que tenga las menores pérdidas de energía posibles y que sea técnicamente factible.
- *Transferencia de calor a través de gradientes altos.* Para poder reducir las pérdidas de trabajo por esta causa puede utilizarse el método del punto de pliegue o PINCH. Mediante este método se consigue una integración térmica dentro del proceso.
- *Mezclado de corrientes a diferentes condiciones.* Aunque este aspecto tiene un nivel de pérdida de trabajo útil menor que los dos anteriores, si tiene valores significativos. Para disminuirlo debe buscarse el mayor acercamiento entre las condiciones de las corrientes que se mezclarán.

Si se minimizan las pérdidas de trabajo debidas a los tres aspectos antes mencionados, se logrará disminuir el consumo de energéticos de manera significativa, que impactará directamente en los costos de operación del proceso.

En el análisis exergetico se tiene una gran herramienta para el ahorro de energía y optimización de procesos. Sin embargo, los balances de exergía por sí mismos no tendrán ningún significado. Los resultados deben analizarse correctamente para que sean de utilidad.

BELIOGRAFIA

1. Bazúa R., E.
Apuntes de Termodinámica.
Facultad de Química, UNAM. (1988)
2. Jiménez M., R.
Evaporación por Termocompresión
Tesis. Facultad de Química, UNAM. (1990)
3. Liaquat Ali
Structured Programming.
Chemical Engineering. Vol. 95, No. 14, pp. 111-116, (1988)
4. Molina, F.; Romero M., A.
Cálculo de Equilibrio Líquido-Líquido-Vapor para Sistemas Multicomponentes Utilizando Ecuaciones de Estado Cúbicas.
Tesis. Facultad de Química, UNAM. (1987)
5. Reid, R.C.; Prausnitz, J.M.; Poling, B.E.
The Properties of Gases and Liquids.
4a. ed., Mc. Graw-Hill, N.Y. (1987)
6. Smith, J.M.; Van Ness, H.C.
Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química.
1a. ed. McGraw-Hill, México (1988)
7. Yaws, C.L.; Chiang, P.Y.
Find Favorable Reactions Faster.
Hydrocarbon Processing. Vol. 67, No. 11, pp. 81-84, (1988)

Bibliografía recomendada sobre exergía.

8. Gaggioli, R.A.; Petit, P.J.
Use the Second Law, First
Chemtech. pp.496-506, Agosto (1977)
9. Keenan, J.H.
Availability and Irreversibility in Thermodynamics.
British Journal of Applied Physics.
Vol.2, pp.183-192, Julio (1951)
10. Kenney, W.F.
Energy Conservation in the Process Industries.
1a. ed. Academic Press, Inc. USA. (1984)
11. Linnhoff, B.
Thermodynamic Analysis for Process Design.
Short Course. University of Manchester, USA. (1983)
12. Lozano, M.A.; Valero, A.
Determinación de la Exergía para Sustancias de Interés Industrial.
Ingeniería Química. pp.119-128, Marzo (1986)
13. Morris, D.R.; Szargut, J.
Standard Chemical Exergy of Some Elements and Compounds on the Planet Earth.
Energy. Vol.11, No.8, pp.733-755, (1986)
14. de Nevers, N.
The Second Way to Use the Second Law.
Chemtech. pp.306-317, Mayo (1982)

Bibliografía adicional sobre exergía.

15. Ahern, J.E.
The Exergy Method of Energy Systems Analysis.
1a. ed. John Wiley & Sons, Inc. N.Y. (1980)
16. Denbigh, K.G.
The Second-Law Efficiency of Chemical Processes.
Chemical Engineering Science. Vol.6, No.1, pp.1-9, (1956)
17. Gaggioli, R.A.
The Concept of Available Energy.
Chemical Engineering Science.
Vol.16, pp.87-96, Diciembre (1981)
18. Lartigue G., J.; Herrera H., E.
¿Qué es la Exergía?
Gaceta Facultad de Química, UNAM. No.29, Mayo (1989)
19. Nelson, K.E.
Forget About Heat Losses, Stop Wasting Work.
Chemical Engineering. Vol.94, No.17, pp.143-146, (1987)
20. Rotstein, E.
Exergy Program Assesses Energy Status.
Oil & Gas Journal. pp.100-110, Marzo (1982)
21. Townsend, D.W.
Second Law Analysis in Practice.
The Chemical Engineer. pp.628-633, Octubre (1980)
22. Vervalin, C.H.
World Energy Outlook Through 2000
Hydrocarbon Processing. Vol.68, No.7, pp.15, (1989)

APÉNDICE. PROGRAMA PARA CÁLCULO DE EXERGÍA

El programa desarrollado en el presente trabajo está codificado y compilado en TURBOBASIC. El programa consta de varios subprogramas, los cuales se presentarán individualmente. Al final de este apéndice se incluyen los listados de cada uno de los subprogramas. El cálculo de propiedades termodinámicas se realiza utilizando las ecuaciones de estado de Soave y Peng-Robinson. Los equipos de proceso se calculan como se explicó en el capítulo I.

Para las subrutinas necesarias en el cálculo de una expansión flash, también se incluye un diagrama de flujo para su mayor entendimiento.

A continuación se presenta cada uno de los subprogramas que forman el programa principal:

EXERGIA.BAS

En este bloque se definen los subprogramas que se utilizarán y que el compilador interpretará como un solo programa.

CONSTAN.BAS

Este subprograma define los parámetros para el manejo de variables y los factores de conversión para los diferentes sistemas de unidades; invoca la subrutina para selección del sistema de unidades, tipo de cálculo y definición de la corriente inicial dados por el usuario; y controla el menú principal y la terminación del programa.

SISTEMA.BAS

En este subprograma se define el sistema de unidades, la ecuación de estado, iteraciones y convergencia dados por el usuario. Todos los parámetros que se alimentan tienen definidos valores por preasignación.

Aquí se pregunta al usuario el número de componentes a utilizar y se interacciona con el banco de datos para la alimentación de propiedades críticas y de calor específico. También se dimensionan las variables para cálculos posteriores.

DEFCORR. BAS

En este subprograma se preguntan los parámetros necesarios para definir una corriente de proceso. Existen 5 diferentes opciones: Temperatura de burbuja y rocío, presión de burbuja y rocío, y flash a T y P.

EXPFLASH. BAS

Desde esta subrutina se puede seleccionar el cálculo aislado de cualquiera de los 9 tipos de flash presentados en el capítulo I, utilizando una corriente de proceso previamente definida.

INTERCAM. BAS

Este subprograma pregunta los datos para manejar cualquiera de las 6 opciones de cambiadores de calor. También verifica que el tipo de cálculo seleccionado sea factible técnicamente. Por ejemplo, si se pide una condensación de líquido, se escuchará un tono de error.

BOMBA. BAS

En este subprograma se alimentan los parámetros para el cálculo de una bomba. La corriente de alimentación debe ser líquido y la presión de descarga debe ser mayor que la de entrada, en caso contrario se escuchará el tono de error. Se puede calcular el trabajo o la eficiencia de la bomba.

TURBCOMP.BAS

La corriente de alimentación debe ser vapor. Si la presión aumenta se calcula un compresor, si disminuye se calcula una turbina. Las opciones presentadas son el cálculo del trabajo o de la eficiencia.

BANCO.BAS

Este subprograma controla el archivo del banco de datos. A través de esta subrutina se leen componentes y se actualiza el banco de datos. También calcula la exergía química de formación estándar y la masa molecular al alimentar la fórmula de cada componente.

FLASH.BAS

En este subprograma se resuelve el *flash* necesario para el cálculo requerido por el usuario, indicándose el tipo de *flash* mediante la variable IFLASH. Se utilizan 4 subrutinas de cálculo, que son:

Inicialización para el flash. Se calcula un valor inicial para la incógnita a resolver mediante un método aproximado.

Validez de V/F. En esta subrutina se prueba que el valor de la relación de vaporización esté dentro de los límites permitidos para asegurar que todas las composiciones sean positivas. Con esto se detecta la existencia de una o dos fases a las condiciones de la corriente de proceso.

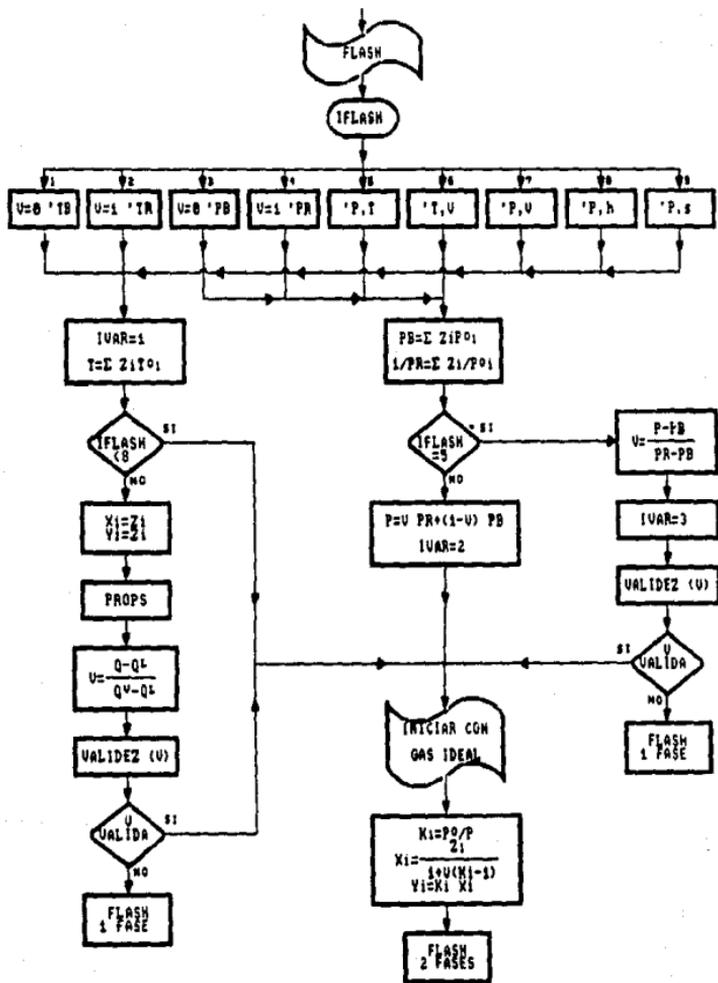
Flash 2 fases. Contiene el algoritmo de cálculo para resolver el *flash* cuando se detectaron dos fases.

Flash 1 fase. Contiene el algoritmo de cálculo para resolver el *flash* para una sola fase.

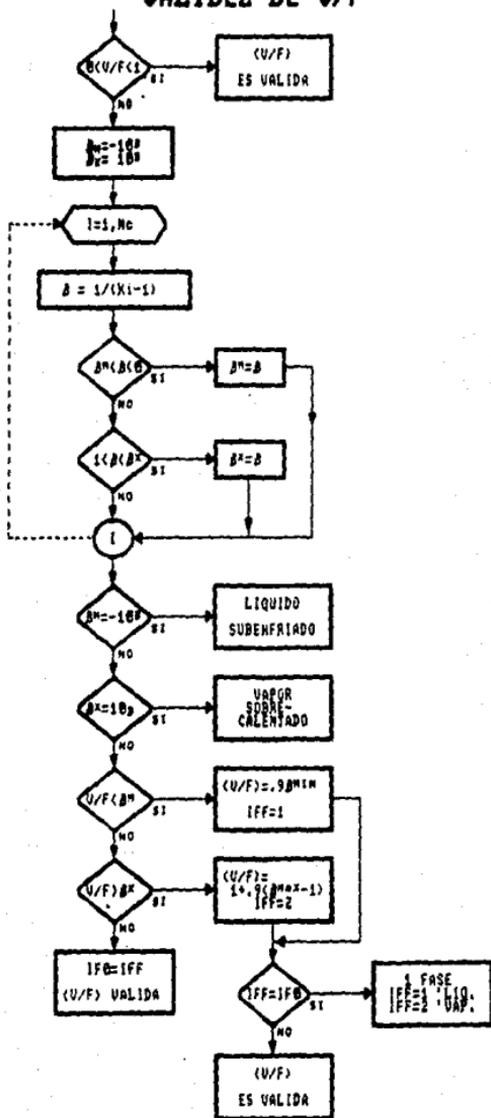
Al final, este subprograma muestra los resultados de cada iteración en pantalla para su rastreo.

A continuación se presentan los diagramas de flujo para estas cuatro subrutinas:

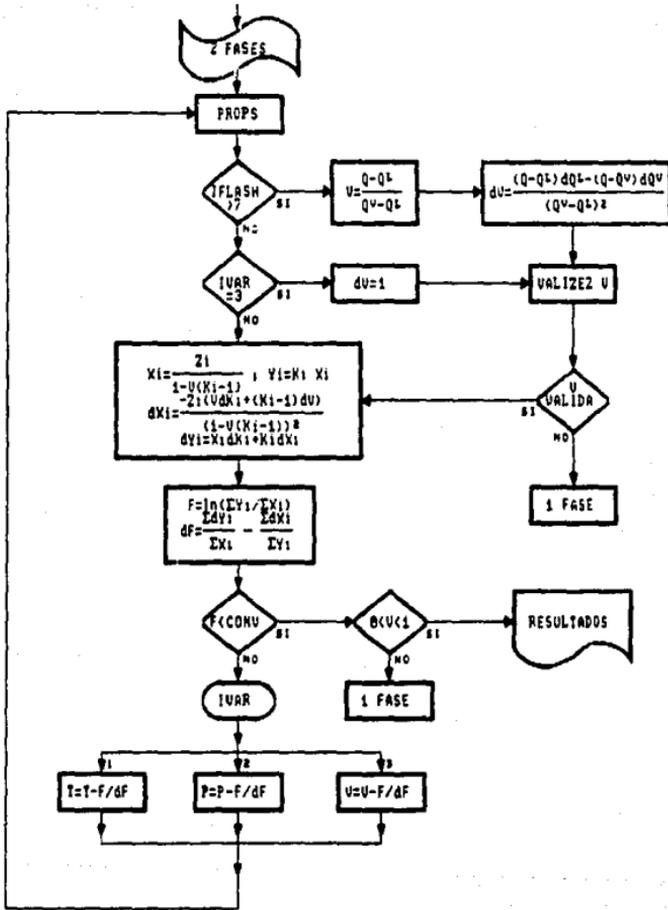
INICIALIZACION PARA EL FLASH



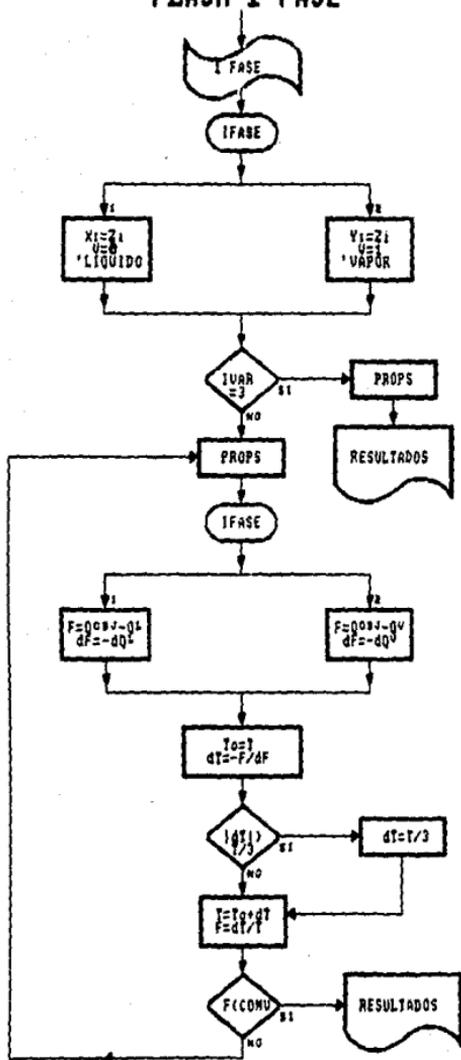
VALIDEZ DE U/F



FLASH 2 FASES



FLASH 1 FASE



PROPS. BAS

En este subprograma se calculan las propiedades de una corriente, incluyendo la constante de equilibrio, a partir de datos de presión, temperatura y composición. Se utiliza la ecuación de estado seleccionada en el subprograma SISTEMA.BAS. Las derivadas de las propiedades termodinámicas se calculan aparte, y sólo se calculan las derivadas con respecto a la variable que es incógnita, identificada como IVAR (T=1, P=2, V/F=3).

Se utiliza la misma subrutina para el cálculo de propiedades del líquido y del vapor, sólo cambia la indicación de la fase con la variable IFASE (L=1, V=2).

Las propiedades se calculan en las unidades estándar del programa, que son:

{Flujo} = gmol/h	{T} = K
{P} = Bar	{h},{ex} = J/gmol
{s} = J/gmol K	{Q},{W} = J/h
{Composición} = Fracción mol	

ZETAS. BAS

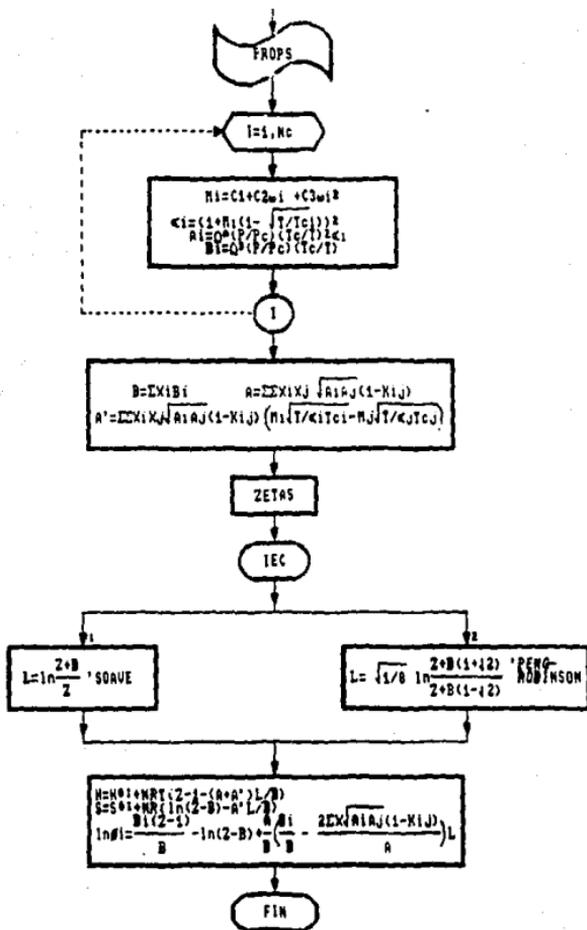
Este subprograma resuelve la ecuación cúbica para el factor de compresibilidad. Se utiliza un algoritmo para obtener la solución analítica de la ecuación. Una vez calculado el factor de compresibilidad, pasa por una subrutina que comprueba su validez. Cuando el factor de compresibilidad no es válido, se cuenta con un algoritmo para la extrapolación de éste, de acuerdo al algoritmo propuesto por Molina y Romero⁶.

Si el factor de compresibilidad es extrapolado, las propiedades termodinámicas no tendrán un valor práctico. Para evitar lo anterior, en la impresión de resultados se incluye un mensaje que indica cuál de las fases fue extrapolada.

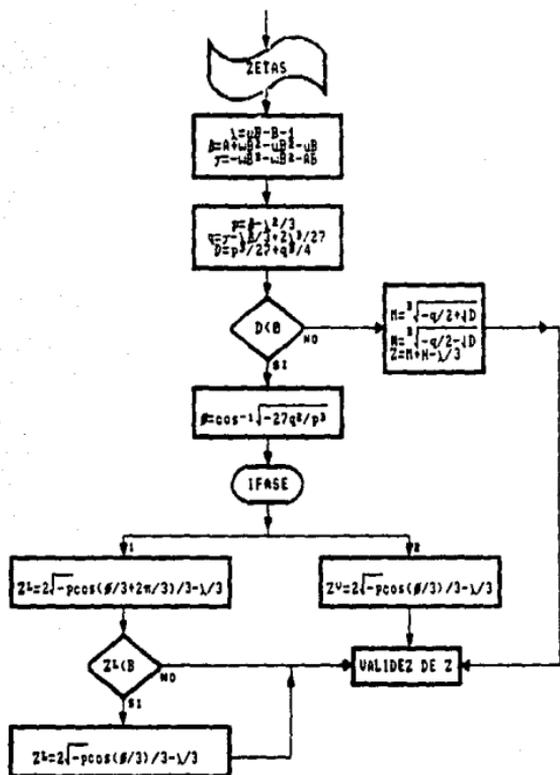
A continuación se presentan los diagramas de flujo para el cálculo de propiedades, el cálculo de Z's y para la validez de Z's:

⁶ Molina O., F.; Romero M., A. Tests F. Q. UNAM, 1987

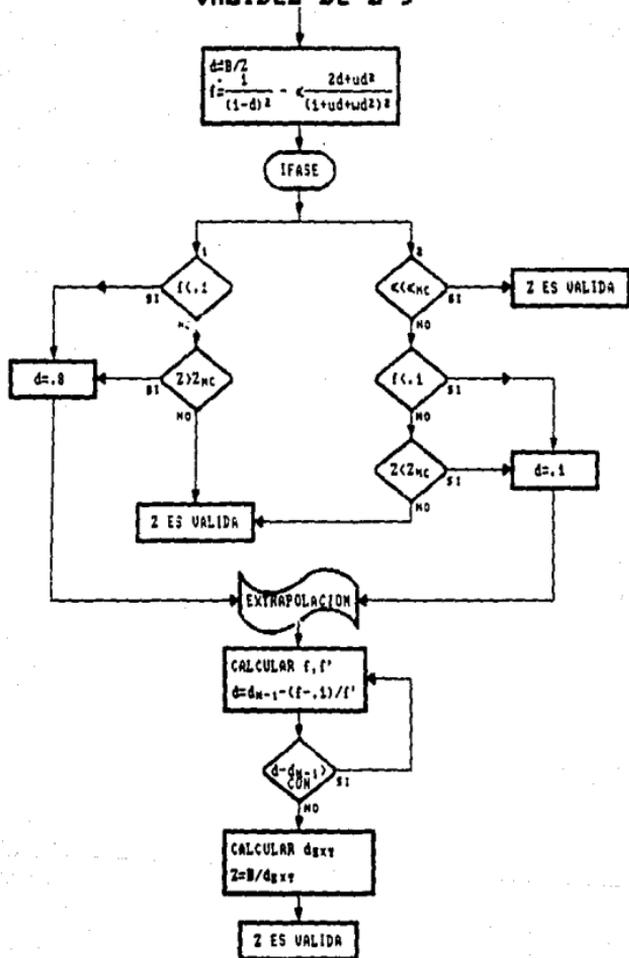
CALCULO DE PROPIEDADES



CALCULO DE Z' s



VALIDEZ DE Z' s



UTIL.BAS

Este subprograma cuenta con tres subrutinas que son:

Entrada de datos. Sirve para seleccionar una opción en cualquiera de los menús. Para la selección pueden utilizarse las flechas de movimiento del cursor y las teclas [HOME] y [END] para cambiar de opción. Se puede utilizar directamente el número de la opción deseada. Con la tecla [←] se selecciona la opción sombreada.

Borrado. Se puede borrar un renglón completo, o bien una sección de la pantalla. Puede llamarse a una pausa antes del borrado.

Conversión de unidades. Existen dos opciones. Primero, se convierten los datos de las unidades del usuario a las unidades estándar; después, se convierten los resultados de las unidades estándar a las seleccionadas por el usuario.

IMPRE.BAS

En este subprograma se presentan los resultados en pantalla. Si el usuario selecciona impresión de resultados, después de presentarse en pantalla, los resultados se imprimen en papel.

A continuación se presentan los listados de los subprogramas:

EXERGIA.BAS

RAFAEL GARCIA JOLLY, 1990

Programa para calcular balances de exergia en equipos de proceso. Este programa utiliza una subrutina de calculo de equilibrio y propiedades termodinamicas con ecuaciones de estado cubicas.

Para calcular los equipos de proceso considerados debe definirse la corriente de entrada como:

1. Liquido saturado (conociendo P).
2. Vapor saturado (conociendo P).
3. Liquido saturado (conociendo T).
4. Vapor saturado (conociendo T).
5. Mezcla liquido-vapor (conociendo T y V/F).
6. Mezcla liquido-vapor (conociendo P y V/F).
7. Corriente a T y P.

Para cada opcion de calculo de equipos o FLASH aislados se reportan los cambios de entalpia, entropia y exergia ocurridos. Tambien se reportan las propiedades absolutas y la fase de la corriente de salida.

Este programa se compila incluyendo las subrutinas siguientes:

§INCLUDE	"CONSTAN.BAS"	'Constantes necesarias
§INCLUDE	"SISTEMA.BAS"	'Definicion del sistema de calculo
§INCLUDE	"DEFCORR.BAS"	'Definicion de corriente
§INCLUDE	"EXPFLASH.BAS"	'Expansion FLASH
§INCLUDE	"INTERCAM.BAS"	'Intercambiadores de calor
§INCLUDE	"BOMBA.BAS"	'Bomba
§INCLUDE	"TURBCOMP.BAS"	'Turbinas y compresores
§INCLUDE	"BANCO.BAS"	'Manejador del banco de datos
§INCLUDE	"FLASH.BAS"	'Proceso iterativo para resolver el FLASH
§INCLUDE	"PROPS.BAS"	'Calculo de propiedades termodinamicas
§INCLUDE	"ZETAS.BAS"	'Calculo del factor de compresibilidad
§INCLUDE	"UTIL.BAS"	'Utilidades del programa
§INCLUDE	"IMPRES.BAS"	'Impresion de resultados

En el principio de cada subrutina se explica con mayor detalle su funcion.

GOTO 10 'Comienzo

CONSTAN.BAS

En esta subrutina se inicializan las constantes necesarias para calcular de propiedades, equipos de proceso y conversion de unidades.

Este programa contiene el menu principal, desde el cual controla las entradas a las demas subrutinas segun sea necesario.

10

'Presentacion

```

WIDTH 40
CLS
LOCATE 8,12
COLOR 7,0
PRINT "TIPO DE MONITOR:"
LOCATE 10,15
PRINT "COLOR"
LOCATE 11,15
PRINT "MONOCROMATICO"
COLOR 15,0
LOCATE 10,15
PRINT "C"
LOCATE 11,15
PRINT "M"
MONITOR$=""
WHILE MONITOR$ <> "C" AND MONITOR$ <> "M"
  MONITOR$=INKEY$
  IF MONITOR$="c" THEN MONITOR$="C"
  IF MONITOR$="m" THEN MONITOR$="M"
WEND

```

'Buho

```

B$="BR9R7BR9BU L25BU R25BU BL9NL7BE NR4BL9L4BH NR19BH NR21BH NR23BH"
U$="NR25BU NR25BU NR25BU NR25BU NR25BU NR25BU NR25BU R5BR6R3BR6R5BU"
H$="L4BL8L8L8L4BE R2BR9RBR9R2BU L2BL9L8L9L2BU R2BR9RBR9R2BU"
O$="BL11LBL11BU RBR9R3BR9RBU L23BU BR2R19BU BL2L15BU BR4R7"

```

'LETRAS

```

DIM L$(41)
L$(01)="MU2RU4FU3FU3FU3RD3ED3ED3ED3NL7ED4RNU2BR4" 'A
L$(02)="BU4U4EUND8FU2RER3FRND2FDBG9NU2RFR3ERNU2EUBF3BR" 'C
L$(03)="U12RND12R5FRND2FD8GNU2LGNL5E4NU4BF4" 'D
L$(04)="U12RND12R7BG6NR4BF6NL7BR4" 'E
L$(05)="U12RD12BR4" 'I
L$(06)="U12RD12R7BR4" 'L
L$(07)="U12RND12F5DNH4NE4UE5ND12RD12BR4" 'M
L$(08)="NU12RU11F9DNH8U11RD12BR4" 'N
L$(09)="BU4U4EUND8FU2RER3FRND2FDBUEU4BQ9BU2NU2RFR3ERNU2BFBR4" 'O
L$(10)="U12RND12R6FRND4FD2GLGL5RF6RNH5BR4" 'R
L$(11)="BU2URD2RFR3EREU2HND4LHL3HLHU2END4RER3FRD2RUBD10BR4" 'S

```

```

L$(12)="BR4U12NL4RNR4D12BR8"
L$(13)="BU4UBRD10ED2RF3ERU2FU10R08BF4"
L$(14)="BU10U2RD4ED3ED3ED3RU3FU3FU3FU3FU4RD28D10BR4"
L$(15)="UFU3FU3FUAGU3GU3QU8RTDHD3HD3HD4ED3ED3EDBR4"
L$(16)="BR8"
L$(17)="BR25"
't
'u
'v
'x
'Espacio
'E s p a c i o
'tetras
L$(18)="U2E2F2DNL4DBR2"
L$(19)="U4R3FGL3R3FQL3BR6"
L$(20)="BRBE3HL2GD2FR2EBFBR"
L$(21)="U4R3FD2QL3BR6"
L$(22)="U4R4BGBDL3D2R4BR2"
L$(23)="U4R4BG1BD1L3BF2BR4"
L$(24)="BE3BRHL2GD2FR2EULBF2BR"
L$(25)="NU4BR2"
'a
'b
'c
'd
'e
'f
'g
'i
'j
'k
'l
'm
'n
'o
'p
'q
'r
's
't
'u
'x
'y
'z
'espacio
L$(26)="BUFR2EU3BF2BD2"
L$(27)="U4BR4G2L2R2F2BR2"
L$(28)="U4D4R4BR2"
L$(29)="U4F2E2D4BR2"
L$(30)="U4F4U4D2BF2"
L$(31)="BRHU2ER2FD2QL2BR5"
L$(32)="U4R3FGL3BF2BR4"
L$(33)="BRHU2ER2FD2QL2BEBRFB2"
L$(34)="U4R3FGL3R2F2BR2"
L$(35)="BUFR2EHL2HER2FBDBF2"
L$(36)="BU4R4L2D4BR4"
L$(37)="BU4D3FR2EU3BF2BD2"
L$(38)="E4BL4F4BR2"
L$(39)="BR2U2H2BR4G2BF2BR2"
L$(40)="BU4R4G4R4BR2"
L$(41)="BR4"
SCREEN 1,0
IF MONITOR$="C" THEN
  PALETTE 0,14
  PALETTE 1,9
  COLOR 1,0
END IF
CLS
PRESET (10,40)
DRAW B$+U$+H$+O$
DRAW "BR24"
DRAW L$(13)+L$(08)+L$(05)+L$(14)+L$(04)+L$(10)+L$(11)+L$(05)+L$(03)+L$(01)+L$(0
3)+L$(16)
DRAW L$(08)+L$(01)+L$(02)+L$(05)+L$(09)+L$(08)+L$(01)+L$(06)+L$(16)
PRESET (60,38)
DRAW L$(01)+L$(13)+L$(12)+L$(09)+L$(08)+L$(09)+L$(07)+L$(01)+L$(16)
DRAW L$(03)+L$(04)+L$(16)+L$(07)+L$(04)+L$(15)+L$(05)+L$(02)+L$(09)
PRESET (118,50)
DRAW L$(23)+L$(18)+L$(20)+L$(37)+L$(26)+L$(36)+L$(18)+L$(21)+L$(41)
DRAW L$(21)+L$(22)+L$(41)+L$(33)+L$(37)+L$(25)+L$(29)+L$(25)+L$(20)+L$(18)
PRESET (5,72)
DRAW "S8"
DRAW L$(19)+L$(30)+L$(18)+L$(26)+L$(25)+L$(35)+L$(25)+L$(35)+L$(41)+L$(21)+L$(2
2)+L$(41)
DRAW L$(32)+L$(34)+L$(31)+L$(20)+L$(22)+L$(35)+L$(31)+L$(35)+L$(41)
DRAW L$(29)+L$(22)+L$(21)+L$(25)+L$(18)+L$(30)+L$(36)+L$(22)+L$(41)

```

```

PRESET (38,86)
DRAW L$(19)+L$(18)+L$(28)+L$(18)+L$(30)+L$(20)+L$(22)+L$(35)+L$(41)
DRAW L$(21)+L$(22)+L$(41)+L$(22)+L$(38)+L$(22)+L$(34)+L$(24)+L$(25)+L$(18)
PRESET (85,112)
DRAW "S4"
DRAW L$(12)+L$(17)+L$(04)+L$(17)+L$(11)+L$(17)+L$(05)+L$(17)+L$(11)
PRESET (10,130)
DRAW L$(33)+L$(37)+L$(22)+L$(41)+L$(32)+L$(18)+L$(34)+L$(18)+L$(41)
DRAW L$(31)+L$(19)+L$(36)+L$(22)+L$(30)+L$(22)+L$(34)+L$(41)
DRAW L$(22)+L$(28)+L$(41)+L$(36)+L$(25)+L$(36)+L$(37)+L$(28)+L$(31)+L$(41)
DRAW L$(21)+L$(22)+L$(41)+L$(25)+L$(30)+L$(24)+L$(22)+L$(30)+L$(25)+L$(22)+L$(3
4)+L$(31)+L$(41)
DRAW L$(33)+L$(37)+L$(25)+L$(29)+L$(25)+L$(20)+L$(31)+L$(41)
PRESET (10,142)
DRAW L$(32)+L$(34)+L$(22)+L$(35)+L$(22)+L$(30)+L$(36)+L$(18)
DRAW "BRUBU2U"
PRESET (70,147)
DRAW "SB"
DRAW L$(34)+L$(18)+L$(23)+L$(18)+L$(22)+L$(28)+L$(41)
DRAW L$(24)+L$(18)+L$(34)+L$(20)+L$(25)+L$(18)+L$(41)
DRAW L$(26)+L$(31)+L$(28)+L$(28)+L$(39)+L$(41)
PRESET (10,156)
DRAW "S4"
DRAW L$(18)+L$(35)+L$(22)+L$(35)+L$(31)+L$(34)
DRAW "BRUBU2U"
PRESET (70,161)
DRAW "SB"
DRAW L$(21)+L$(34)+L$(41)
DRAW L$(22)+L$(30)+L$(34)+L$(25)+L$(33)+L$(37)+L$(22)+L$(41)
DRAW L$(19)+L$(18)+L$(40)+L$(37)+L$(18)+L$(41)
DRAW L$(34)+L$(37)+L$(22)+L$(21)+L$(18)
PRESET (175,190)
DRAW "S4"
DRAW L$(32)+L$(34)+L$(22)+L$(35)+L$(25)+L$(31)+L$(30)+L$(22)+L$(41)
DRAW L$(20)+L$(37)+L$(18)+L$(28)+L$(33)+L$(37)+L$(25)+L$(22)+L$(34)+L$(41)
DRAW L$(38)+L$(22)+L$(20)+L$(28)+L$(18)
DRAW "BRNUBR2NUBR2NU"

```

'Inicializacion

```

DEFDBL A-Z
DEFINT I-J
OPTION BASE 1
PPI=3.14159265359#
RGAS=8.3144 'J/mol-K
TR=298.15 'K
DIM FCT1(4),FCT2(4),UT$(4),FCP(6),UP$(6),FCQ(8),UQ$(8),FCF(5),UF$(5),FCX(4),UX
$(4),FASE$(5),FLASH$(9)
DIM JCOEF(9),ATOM$(9),EKSTD(9),MMATOM(9)
DATA 1.0,"xK",1.8,0,"xR",1.273.15,"xC",1.8,459.67,"xF"
DATA .98692,"ATM",1,"BAR",.1,"MPa",14.504,"PSIA",750.08,"mmHg",1.0197,"kg/cm"
DATA .239,"Cal/h",.239D-3,"kCal/h",1,"J/h",.000001,"MJ/h",.9484D-3,"BTU/h",.94
84D-9,"MMBTU/h",3.725D-7,"HP",2.778D-7,"kW/h"
DATA 1,"g/mol/h",1,"g/h",.001,"kg/h",2.2046D-3,"lbmol/h",2.2046D-3,"lb/h"
DATA 1,"Fraccion mol",100,"% en mol",1,"Fraccion peso",100,"% en peso"

```

DATA "LIQUIDO SUBENFRIADO","LIQUIDO SATURADO","LIQUIDO-VAPOR","VAPOR SATURADO",
, "VAPOR SOBRECALENTADO"

DATA "TB","TR","PB","PR","TP","TV","PV","Ph","Ps"

DATA "C",410260,12.01115

DATA "H",118045,1.00797

DATA "O",1985,15.9994

DATA "N",380,14.0067

DATA "S",809600,32.064

DATA "F",233150,18.9984

DATA "Cl",61800,35.453

DATA "Br",60600,79.904

DATA "I",87350,126.9044

FOR J=1 TO 4

READ FCT1(J),FCT2(J),UT\$(J) 'Temperatura

NEXT J

FOR J=1 TO 6

READ FCP(J),UP\$(J) 'Presion

NEXT J

FOR J=1 TO 8

READ FCQ(J),UQ\$(J) 'Energia

NEXT J

FOR J=1 TO 5

READ FCF(J),UF\$(J) 'Flujo

NEXT J

FOR J=1 TO 4

READ FCX(J),UX\$(J) 'Composicion

NEXT J

FOR J=1 TO 5

READ FASE\$(J) 'Fases posibles

NEXT J

FOR J=1 TO 9

READ FLASH\$(J) 'Tipos de FLASH

NEXT J

FOR J=1 TO 9

READ ATOM\$(J),EXSTD(J),MMATOM(J) 'Exq estandar y M.Molar

NEXT J

FLASH\$="1.TEMPERATURA DE BURBUJA2.TEMPERATURA DE ROCIO 3.PRESION DE BURBUJA

4.PRESION DE ROCIO 5.FLASH @ T,P 6.FLASH @ T,(V/F) 7.FLASH @

P,(V/F) 8.FLASH ADIABATICO (P,H)9.FLASH ADIABATICO (P,S)"

'Colores de pantalla

IF MONITOR\$="C" THEN

'Monitor a colores

JC0=7 'Color fondo0 (gris claro)

JC1=7 'Color fondo1 (gris claro)

JC2=2 'Color lineas (verde)

JC3=15 'Color titulo (blanco)

JC4=15 'Color subtitulo (blanco)

JC5=2 'Color numero menu (verde)

JC6=0 'Color texto menu (negro)

JC7=3 'Color numero seleccion (cian)

JC8=11 'Color texto seleccion (azul cielo)

JC9=0 'Color fondo seleccion (negro)

JC10=8 'Color entrada de datos (gris oxford)

JC11=1 'Color datos y resultados (azul marino)

JC12=4 'Color mensajes (rojo)

ELSE

```
'Monitor monocromatico
  JC0=7 'Color fondo0 (negro)
  JC1=0 'Color fondo1 (gris)
  JC2=15 'Color lineas (blanco)
  JC3=15 'Color titulo (blanco)
  JC4=15 'Color subtítulo (blanco)
  JC5=15 'Color numero menu (blanco)
  JC6=7 'Color texto menu (gris)
  JC7=15 'Color numero seleccion (blanco)
  JC8=0 'Color texto seleccion (negro)
  JC9=7 'Color fondo seleccion (gris)
  JC10=7 'Color entrada de datos (gris)
  JC11=15 'Color datos y resultados (blanco)
  JC12=15 'Color mensajes (blanco)
```

```
END IF
```

```
WHILE INKEY$=""
WEND
```

```
SCREEN 0 *
WIDTH 80
COLOR JC2,JC1,JC1
CLS
LOCATE 1,1
PRINT STRING$(80,196)
LOCATE 3,1
PRINT STRING$(80,196)
LOCATE 2,29
COLOR JC3,JC1
PRINT"DEFINICION DEL SISTEMA"
```

```
'Definicion del sistema
```

```
GOSUB 1100 'Sistema de unidades
GOSUB 1400 'Selección de ecuación
GOSUB 1700 'Sistema de componentes
INICIAL=1
GOSUB 2000 'Definición de corriente
GOSUB 8120 'Impresión
```

```
'Menu principal
```

```
JMENU=1
WHILE JMENU<>8
  JREN=2
  GOSUB 9900 'Borra renglon
  LOCATE 2,31
  COLOR JC3,JC1
  PRINT"PROGRAMA PRINCIPAL"
  MENU$="1.DEFINICION DEL SISTEMA 2.DEFINICION DE CORRIENTE3.EXPANSION FLASH
  4.INTERCAMBIADOR DE CALOR5.BOMBA
  MENU$=MENU$+"6.TURBINA/COMPRESOR 7.BANCO DE DATOS 8.FIN DEL PR
OGRAMA
  JREN=8
  JCOL=27
  JRESP=8
  JMAX=8
```

```
JLONG=25
GOSUB 9000 'Entrada de datos
JBORR=8
GOSUB 9500 'Borrado de renglones
JMENU=JRESP
ON JMENU GOSUB 1000,2000,3000,4000,5000,6000,7000
IF JMENU>1 AND JMENU<7 THEN
  GOSUB 8000 'Impresion
END IF
```

```
WEND
```

```
'Fin del programa
```

```
COLOR JC1,JC1
CLS
END
```

SISTEMA.BAS

En esta subrutina se alimenta el sistema de unidades que se utilizara para la entrada de datos y la presentacion de resultados. Tambien se selecciona la ecuacion de estado que se utilizara en la subrutina de calculo de propiedades, el numero maximo de iteraciones y el nivel de convergencia deseado. En la misma pantalla se pregunta la opcion para imprimir resultados en papel. En la tercera parte de esta rutina se selecciona el sistema de componentes, enlazandose con el banco de datos, donde se leen las propiedades necesarias para cada componente.

Esta subrutina se ejecuta al entrar al programa por primera vez, posteriormente se puede ejecutar desde el menu principal.

```

1000 '
      JREN=2
      GOSUB 9900 'Borra renglon
      LOCATE 2,29
      COLOR JC3,JC1
      PRINT"DEFINICION DEL SISTEMA"
1040 MENU$="1.SISTEMA DE UNIDADES   2.EC. EDO./ITER./CONV.   3.SISTEMA DE COMPONENTE
S4.REGRESAR AL MENU   "
      JREN=11
      JCOL=28
      JLONG=24
      JRESP=4
      JMAX=4
      GOSUB 9000 'Entrada de datos
      JBORR=4
      GOSUB 9500 'Borrado
      ON JRESP GOSUB 1100,1400,1700,1090
      IF JDEF=1 THEN
        JDEF=0
        JMENU=2
        GOTO 2000
      END IF
      IF JRESP=20 THEN
        RETURN
      ELSE
        GOTO 1000
      END IF
1090 JREN=2
      GOSUB 9900 'Borra renglon
      JRESP=20
      RETURN
1100 REM Sistema de unidades
      JREN=2
      GOSUB 9900 'Borra renglon
      LOCATE 2,23
      COLOR JC3,JC1
      PRINT"DEFINICION DEL SISTEMA DE UNIDADES"
      LOCATE 4,1
      COLOR JC4,JC1
      PRINT"TEMPERATURA"

```

```

LOCATE 5,1
COLOR JC2,JC1
PRINT STRING$(11,196)
MENU$="1.xK2.xR3.xC4.xF"
JREN=5
JCOL=1
JLONG=4
JMAX=4
JRESP=IUT
IF JRESP=0 THEN JRESP=1
GOSUB 9000 'Entrada de datos
IUT=JRESP
LOCATE 4,33
COLOR JC4,JC1
PRINT "PRESION"
LOCATE 5,33
COLOR JC2,JC1
PRINT STRING$(7,196)
MENU$="1.ATM 2.BAR 3.MPa 4.PSIA 5.mmHg 6.kg/cmJ"
JCOL=33
JLONG=8
JMAX=8
JRESP=IUP
IF JRESP=0 THEN JRESP=2
GOSUB 9000 'Entrada de datos
IUP=JRESP
LOCATE 4,61
COLOR JC4,JC1
PRINT "CALOR"
LOCATE 5,61
COLOR JC2,JC1
PRINT STRING$(5,196)
MENU$="1.Cal/h 2.kCal/h 3.J/h 4.KJ/h 5.BTU/h 6.MMBTU/h7.hp 8.kw

JCOL=61
JLONG=9
JRESP=IUQ
IF JRESP=0 THEN JRESP=3
GOSUB 9000 'Entrada de datos
IUQ=JRESP
LOCATE 14,1
COLOR JC4,JC1
PRINT "POTENCIA"
LOCATE 15,1
COLOR JC2,JC1
PRINT STRING$(8,196)
JREN=15
JCOL=1
JLONG=9
JMAX=8
JRESP=IUW
IF JRESP=0 THEN JRESP=IUQ
GOSUB 9000 'Entrada de datos
IUW=JRESP
LOCATE 14,33
COLOR JC4,JC1

```

```

PRINT"FLUJO"
LOCATE 15,33
COLOR JC2,JC1
PRINT STRING$(5,196)
MENU$="1.gmol/h 2.g/h      3.kg/h      4.1bmol/h5.1b/h  "
JCOL=33
JMAX=5
JRESP=IUF
IF JRESP=0 THEN JRESP=1
GOSUB 9000 'Entrada de datos
IUF=JRESP
IF IUF<>1 AND IUF<>4 THEN IUF2=1 ELSE IUF2=0
LOCATE 14,61
COLOR JC4,JC1
PRINT"COMPOSICION"
LOCATE 15,61
COLOR JC2,JC1
PRINT STRING$(11,196)
MENU$="1.Fraccion mol 2.% en mol      3.Fraccion peso4.% en peso  "
JCOL=61
JLONG=15
JMAX=4
JRESP=IUX
IF JRESP=0 THEN JRESP=1
GOSUB 9000 'Entrada de datos
IUX=JRESP
IF IUX>2 THEN IUX2=1 ELSE IUX2=0
JREN=3
JCOL=1
JLONG=80
JBORR=20
GOSUB 9500 'Borrado
RETURN

```

1400 REM Ecuacion de estado, iteraciones y convergencia

```

JREN=2
GOSUB 9900 'Borra renglon
LOCATE 2,29
COLOR JC3,JC1
PRINT"DEFINICION DEL SISTEMA"
LOCATE 4,24
COLOR JC10,JC1
PRINT"ECUACION DE ESTADO"
MENU$="1.SOAVE      2.PENG-ROBINSON"
JREN=4
JCOL=43
JLONG=15
JMAX=2
JRESP=IEC
IF JRESP=0 THEN JRESP=1
GOSUB 9000 'Entrada de datos
IEC=JRESP
IF IEC=1 THEN
  OMEGAA=.42748023#
  OMEGAB=8.664035E-02

```

```

CTE1=.48
CTE2=1.574
CTE3=-.178
UU=1
WW=0
YMC=3.8473221019#
AMC=4.933982452#
END IF
IF IEC=2 THEN
  OMEGAA=.45723553#
  OMEGAB=.077796074#
  CTE1=.37484
  CTE2=1.54228
  CTE3=-.26992
  UU=2
  WW=-1
  YMC=3.9513730356#
  AMC=5.877359948#
END IF
LOCATE 10,24
COLOR JC10,JC1
PRINT"NUMERO MAXIMO DE ITERACIONES (15) = ";
COLOR JC11,JC0
INPUT"",JITER
IF JITER=0 THEN
  JITER=15
  LOCATE 10,59
  PRINT JITER
END IF
LOCATE 14,24
COLOR JC10,JC1
PRINT"CONVERGENCIA (1E-004) = ";
COLOR JC11,JC0
INPUT"",CONV
IF CONV=0 THEN
  CONV=.0001#
  LOCATE 14,48
  PRINT CONV
END IF
MENU#="1.SI2.NO"
LOCATE 18,24
COLOR JC10,JC1
PRINT"IMPRESION DE RESULTADOS"
JREN=17
JMAX=2
JCOL=48
JLONG=4
JRESP=2
DOSUB 9000 'Entrada de datos
JPRINT=JRESP
LOCATE 23,24
COLOR JC10,JC1
PRINT"DATOS CORRECTOS"
MENU#="1.SI2.NO"
JMAX=2
JREN=22
JCOL=41

```

```

JLONG=4
JRESP=1
GOSUB 9000 'Entrada de datos
JREN=3
JLONG=55
JCOL=24
JBORR=21
GOSUB 9500 'Borrado
IF JRESP=2 THEN 1400
IF JPRINT=1 THEN
  LOCATE 15,29
  COLOR JC12,JCO
  PRINT "ENCIENDA SU IMPRESORA..."
  GOSUB 9950
  JREN=15
  GOSUB 9900
  LPRINT,DATE$,TIME$
  LPRINT
  LPRINT
END IF
1560 RETURN

1700 REM Sistema de componentes
JREN=2
GOSUB 9900 'Borra renglon
LOCATE 2,22
COLOR JC3,JC1
PRINT "DEFINICION DEL SISTEMA DE COMPONENTES"
IN=0
WHILE IN<1
  JREN=4
  GOSUB 9900 'Borra renglon
  LOCATE 4,1
  COLOR JC10,JC1
  PRINT "NUMERO DE COMPONENTES = ";
  COLOR JC11,JCO
  INPUT "",IN
WEND
IF INICIAL=0 THEN 1760
ERASE FORM$,NOMB$,MM,TC,PC,W,CPA,CPB,CPC,CPD,HF,GF,SF,EXQ,ZU,Z,XU,X,XX,YU,Y,K
EQ,DKEQ
ERASE FIL,FI,DFIL,DFI,FIV,DFIV,M,ALF,A,B,SUM,GUS,DALF,DA,DB,KIJ,POLAR
1760 COLOR JC10,JC1
PRINT "ESTAN TODOS LOS COMPONENTES EN EL BANCO DE DATOS"
MENU$="1.SI2.NO"
JREN=4
JCOL=50
JLONG=4
JRESP=1
JHAX=2
GOSUB 9000 'Entrada de datos
JREN=3
JCOL=1
JLONG=55
JBORR=3
GOSUB 9500 'Borrado

```

```

IF JRESP=2 THEN
  GOSUB 7100 'Banco de datos
  JREN=2
  GOSUB 9900 'Borra renglon
  LOCATE 2,22
  COLOR JC3,JC1
  PRINT"DEFINICION DEL SISTEMA DE COMPONENTES"
END IF
GOSUB 7200
OPEN"BANCO.DAT" AS #3 LEN=143
FIELD 3,1 AS EXIST$,18 AS BFOR$,28 AS BNAME$,8 AS BMM$,8 AS BTC$,8 AS BPC$,8
AS BW$,8 AS BCPA$,8 AS BCPB$,8 AS BCP$,8 AS BCPD$,8 AS BDHF$,8 AS BDGF$,8 AS BEXQ$,
8 AS BPOLAR$
DIM FORM$(IN),NOMB$(IN),MM(IN),TC(IN),PC(IN),W(IN),CPA(IN),CPB(IN),CPC(IN),CP
D(IN),HF(IN),GF(IN),SF(IN),EXQ(IN),ZU(IN),Z(IN),XU(IN),X(IN),XX(IN),YU(IN),Y(IN),KEQ
(IN),DKEQ(IN)
DIM FIL(IN),FI(IN),DFIL(IN),DFI(IN),FIV(IN),DFIV(IN),W(IN),ALF(IN),A(IN),B(IN
),SUM(IN),GUS(IN),DALF(IN),DA(IN),DB(IN),KIJ(IN,IN),POLAR(IN)
IMAX=LOF(3)/143
JREN=12
GOSUB 9900
FOR I=1 TO IN
  GOSUB 16600 'Lee componentes
NEXT I
CLOSE #3
JDEF=INICIAL
LOCATE 4,1
COLOR JC10,JC1
PRINT"USO DE PARAMETROS DE INTERACCION BINARIA KIj's"
MENU$="1.SI2.NO"
JRESP=2
JREN=3
JMAX=2
JCOL=49
JLONG=4
GOSUB 9000 'Entrada de datos
JCOL=1
JBORR=2
JLONG=55
GOSUB 9500 'Borra renglones
IF JRESP=1 THEN
  JREN=5
  FOR I=1 TO IN
    FOR J=1 TO IN
      IF I<>J THEN
        LOCATE 4,1
        COLOR JC12,JC1
        PRINT NOMB$(I);NOMB$(J)
        COLOR JC10,JC1
        LOCATE JREN,1
        PRINT"K[";I;";";J;"] (";KIJ(J,I);") = ";
        JCOL=POS(0)
        COLOR JC11,JC0
        INPUT";KIJ(I,J)
        IF KIJ(I,J)=0 THEN
          KIJ(I,J)=KIJ(J,I)

```

```
        LOCATE JREN,JCOL
        PRINT KIJ(I,J)
    END IF
    JREN=JREN+1
    IF JREN=23 THEN
        JREN=3
        JCOL=1
        JLONG=70
        JBORR=20
        GOSUB 9500 'Borra renglones
        JREN=5
    END IF
END IF
NEXT J,I
JREN=3
JCOL=1
JLONG=79
JBORR=21
GOSUB 9500 'Borra renglones
END IF
RETURN
```

DEFCORR.BAS

En esta subrutina se define una corriente de proceso. Se determina su composicion y las condiciones de entrada que pueden ser:

1. Liquido saturado.
2. Vapor saturado.
3. Mezcla liquido-vapor.
4. Corriente a T,P.

Esta subrutina se ejecuta automaticamente despues de definir el sistema de componentes. Posteriormente, puede llamarse desde el menu principal.

```

2000 '
JREN=2
GOSUB 9900 'Borra renglon
LOCATE 2,28
COLOR JC3,JC1
PRINT "DEFINICION DE CORRIENTE"
MENU$="1.LIQUIDO SATURADO * P2.VAPOR SATURADO * P 3.LIQUIDO SATURADO * T4.VAP
OR SATURADO * T 5.CORRIENTE * T,P 6.LIQ-VAP * T,(V/F) 7.LIQ-VAP * P,(V/F) "
JREN=9
JCOL=29
JMAX=7
JRESP=5
JLONG=22
GOSUB 9000 'Entrada de datos
JBORR=7
GOSUB 9500 'Borrado
IFLASH=JRESP
P#=MID$(MENU$,3+(JRESP-1)*22,20)
2070 LOCATE 4,1
COLOR JC10,JC1
IF IFLASH>2 AND IFLASH<7 THEN
PRINT "TEMPERATURA [";UT$(IUT);"] = ";
COLOR JC11,JC0
INPUT "",TU
TK=(TU+FACT2(IUT))/FACT1(IUT)
COLOR JC10,JC1
END IF
IF IFLASH<3 OR IFLASH=5 OR IFLASH=7 THEN
PRINT "PRESION [";UP$(IUP);"] = ";
COLOR JC11,JC0
INPUT "",PU
PBAR=PU/FCP(IUP)
COLOR JC10,JC1
END IF
IF IFLASH>5 THEN
PRINT "VAPORIZACION [";UX$(IUX);"] = ";
COLOR JC11,JC0
INPUT "",VU
V=VU/FCX(IUX)
COLOR JC10,JC1
END IF
PRINT "FLUJO [";UF$(IUF);"] = ";
COLOR JC11,JC0

```

```

INPUT "",FU
COLOR JC4,JC1
LOCATE 7,1
PRINT "COMPONENTE";TAB(32);UX$(IUX)
LOCATE 8,1
COLOR JC2,JC1
PRINT STRING$(10,196);TAB(32);STRING$(LEN(UX$(IUX)),196)
SUM=0
JREN=8
FOR I=1 TO IN
  JREN=JREN+1
  LOCATE JREN,1
  COLOR JC5,JC1
  PRINT I;
  COLOR JC10,JC1
  PRINT NOMB$(I);TAB(33);
  COLOR JC11,JC0
  INPUT "",ZU(I)
  SUM=SUM+ZU(I)
  IF JREN=20 AND I<IN THEN
    JREN=8
    JCOL=1
    JLONG=80
    JBORR=12
    GOSUB 9500 'Borrado
  END IF
NEXT I
LOCATE JREN+1,32
COLOR JC2,JC1
PRINT STRING$(LEN(UX$(IUX)),196)
LOCATE JREN+2,32
COLOR JC11,JC1
PRINT SUM
JREN=JREN+2
JCOL=70
JRESP=1
JMAX=2
JLONG=4
MENU$="1.SI2.NO"
LOCATE JREN,60
COLOR JC10,JC1
PRINT "DATOS CORRECTOS"
GOSUB 9000 'Entrada de datos
JCOL=1
JLONG=75
JBORR=JREN
JREN=3
GOSUB 9500 'Borrado
IF JRESP=2 THEN 2070
IF JPRINT=1 THEN
  LPRINT;TAB(17);"DEFINICION DE CORRIENTE: ";P$
END IF
GOSUB 18000 'Conversion a unidades estandar
GOSUB 10000 'Flash
GOSUB 18500 'Conversion a unidades del usuario
LOCATE 9,1
RETURN

```

EXPFLASH.BAS

Esta subrutina permite seleccionar el calculo aislado de los
9 tipos de FLASH manejados.

Esta subrutina se llama desde el menu principal.

```

3000 '
      JREN=2
      GOSUB 9900 'Borra renglon
      LOCATE 2,32
      COLOR JC3,JC1
      PRINT"EXPANSION FLASH"
      MENU%=FLASH%
      JREN=8
      JCOL=28
      JRESP=1
      JMAX=9
      JLONG=24
      GOSUB 9000 'Entrada de datos
      JBORR=9
      GOSUB 9500 'Borrado
      IFLASH=JRESP
      LOCATE 4,1
      COLOR JC10,JC1
      IF IFLASH>2 AND IFLASH<7 THEN
        PRINT"TEMPERATURA DE SALIDA [":UT$(IUT):"] = ";
        COLOR JC11,JC0
        INPUT"",TU
        TK=(TU+FCT2(IUT))/FCT1(IUT)
        COLOR JC10,JC1
      END IF
      IF IFLASH=5 OR IFLASH>7 OR IFLASH<3 THEN
        PRINT"PRESION DE SALIDA [":UP$(IUP):"] = ";
        COLOR JC11,JC0
        INPUT"",PU
        PBAR=PU/FCP(IUP)
        COLOR JC10,JC1
      END IF
      IF IFLASH=6 OR IFLASH =7 THEN
        PRINT"VAPORIZACION DE SALIDA [":UX$(IUX):"] = ";
        COLOR JC11,JC0
        INPUT"",VU
        V=VU/FCX(IUX)
        COLOR JC10,JC1
      END IF
      IF IFLASH=8 THEN HOBJ=HTM
      IF IFLASH=9 THEN SOBJ=STM
      GOSUB 10000 'Flash
      GOSUB 18500 'Conversion a unidades del usuario
      LOCATE 9,1
      IF JPRINT=1 THEN LPRINT;TAB(29);MID$(FLASH$,3+(IFLASH-1)*24,22)
      RETURN

```

INTERCAM.BAS

En esta subrutina se pueden seleccionar diferentes opciones para calcular intercambiadores de calor. Segun el caso, se calcula el tipo de FLASH que sea necesario.

Para utilizar esta subrutina se llama desde el menu principal.

```

4000 '
JREN=2
GOSUB 9900 'Borra renglon
LOCATE 2,26
COLOR JC3,JC1
PRINT"INTERCAMBIADOR DE CALOR"
MENU$="1.TEMPERATURA DE SALIDA2.CALOR INTERCAMBIADO 3.EVAPORADOR PARCIAL 4.
CONDENSADOR PARCIAL 5.EVAPORADOR TOTAL 6.CONDENSADOR TOTAL "
JREN=8
JCOL=28
JRESP=1
JMAX=6
JLONG=23
GOSUB 9000 'Entrada de datos
JBORR=6
GOSUB 9500 'Borrado
COLOR JC10,JC1
ON JRESP GOTO 4100,4200,4300,4400,4500,4600
4080 LOCATE 4,1
COLOR JC10,JC1
PRINT"CAIDA DE PRESION [":UP$(IUP);"] = ";
COLOR JC11,JC0
INPUT"",PU
PBAR=PBAR-PU/FCP(IUP)
COLOR JC10,JC1
RETURN
4100 'Temperatura de salida
LOCATE 2,54
COLOR JC3,JC1
PRINT" T2"
GOSUB 4080 '? P
LOCATE 5,1
PRINT"TEMPERATURA DE SALIDA [":UT$(IUT);"] = ";
COLOR JC11,JC0
INPUT"",TU
TK=(TU+FACT2(IUT))/FACT1(IUT)
COLOR JC10,JC1
IFLASH=5
GOSUB 10000 'Flash
QJ=(HTM-HIM)*FGM
GOTO 4830 'Impresion de Q
4200 'Calor intercambiado
LOCATE 2,54
COLOR JC3,JC1
PRINT" Q"

```

```

GOSUB 4080 '? P
LOCATE 5,1
PRINT "CALOR INTERCAMBIADO [":UQ$(IUQ);"] (q) = ";
COLOR JC11,JC0
INPUT "",QU
QJ=QU/FCQ(IUQ)
COLOR JC10,JC1
MOBJ=HIN+QJ/FGM
IFLASH=8
GOSUB 10000 'Flash
GOTO 4830 'Impresion de Q

4300 'Evaporador parcial
LOCATE 2,54
COLOR JC3,JC1
PRINT "EVAP. PARCIAL"
IF JFASE<4 THEN 4700
4330 LOCATE 4,1
BEEP
COLOR JC12,JC0
PRINT "La alimentacion es ";FASE$(JFASE);","
PRINT "no es posible realizar el calculo"
GOSUB 9950 'Pausa
JREN=4
GOSUB 9900 'Borra renglon
JREN=5
GOSUB 9900 'Borra renglon
GOTO 4000

4400 REM Condensador parcial
LOCATE 2,54
COLOR JC3,JC1
PRINT "COND. PARCIAL"
IF JFASE>2 THEN 4700 ELSE 4330

4500 REM Evaporador total
LOCATE 2,54
COLOR JC3,JC1
PRINT "EVAP. TOTAL"
IF JFASE>3 THEN 4330 ELSE GOSUB 4080 '? P
IFLASH=2
GOTO 4800 'TR

4600 REM Condensador total
LOCATE 2,54
COLOR JC3,JC1
PRINT "COND. TOTAL"
IF JFASE<3 THEN 4330 ELSE GOSUB 4080 '? P
IFLASH=1
GOTO 4800 'TB

4700 GOSUB 4080 '? P
LOCATE 5,1
PRINT "VAPORIZACION A LA SALIDA [":UX$(IUQ);"] = ";
COLOR JC11,JC0
INPUT "",VU

```

```

COLOR JC10,JC1
JREN=3
JCOL=1
JLONG=70
JBORR=2
GOSUB 9500 'Borrado
IF JRESP=3 THEN
  IF VU>VUIN THEN
    GOTO 4770
  ELSE
    A$="MENOR"
    GOTO 4750
  END IF
END IF
IF JRESP=4 THEN
  IF VU<VUIN THEN
    GOTO 4770
  ELSE
    A$="MAYOR"
  END IF
END IF
4750 LOCATE 4,1
  PBAR=PBAR+PU/FCP(IUP)
  BEEP
  COLOR JC12,JC0
  PRINT "La vaporizacion de salida es ";A$;" que la de entrada,"
  PRINT "no es posible realizar el calculo"
  GOSUB 9950 'Pausa
  JREN=3
  GOSUB 9500 'Borrado
  GOTO 4000
4770 IFLASH=7 'PV
4800 '
'Control del intercambiador
GOSUB 10000 'Flash
QJ=(HTM-MIN)*FGM
4830 '
GOSUB 18500 'Conversion a unidades de usuario
,
'Impresion de Q
LOCATE 9,1
COLOR JC10,JC1
PRINT " Q =";
COLOR JC11,JC1
PRINT QU;
COLOR JC10,JC1
PRINT " ";UQ$(IUQ)
PRINT
IF JPRINT=1 THEN LPRINT;TAB(28);"INTERCAMBIADOR DE CALOR"
IF JPRINT=1 THEN LPRINT " Q =";QU;UQ$(IUQ)
RETURN

```

BOMBA.BAS

En esta subrutina se calcula el trabajo o la eficiencia de una bomba. La corriente de alimentacion debe ser liquida, de lo contrario se escuchara un tocho de error y regresa al control al menu principal.

El llamado a esta subrutina es desde el menu principal.

5000 '

```

JREN=2
GOSUB 9000 'Borra renglon
LOCATE 2,37
COLOR JC3,JC1
PRINT"BOMBA"
IF JFASE>2 THEN
  LOCATE 4,1
  BEEP
  COLOR JC12,JC0
  PRINT"La alimentacion es ";FASE(JFASE);","
  PRINT"no es posible efectuar el calculo"
  GOSUB 9950 'Pausa
  JREN=4
  GOSUB 9900 'Borra renglon
  JREN=5
  GOSUB 9900 'Borra renglon
  JMENU=1
RETURN
END IF
MENU$="1.CALCULAR TRABAJO  2.CALCULAR EFICIENCIA"
JREN=9
JCOL=29
JLONG=21
JRESP=1
JMAX=2
GOSUB 9000 'Entrada de datos
JBORR=2
GOSUB 9500 'Borrado
LOCATE 4,1
COLOR JC10,JC1
PRINT"PRESION DE DESCARGA [";UP$(IUP);"] = ";
COLOR JC11,JC0
INPUT" ",PU
PBAR=PU/FCP(IUP)
COLOR JC10,JC1
IF PBAR>PIN THEN 5150 ELSE A$="MEMOR"
JBORR=2
JREN=3
JCOL=1
JLONG=80
GOSUB 9500 'Borrado
LOCATE 4,1
BEEP
COLOR JC12,JC0

```

```

PRINT"La presion de salida es ";A$;" que la de entrada,"
PRINT"no es posible realizar el calculo"
GOSUB 9950 'Pausa
PBAR=PIN
JREN=3
GOSUB 9500 'Borrado
JMENU=1
RETURN

```

```

5150 '
'Calculo de la bomba
LOCATE 5,1
COLOR JC10,JC1
IF JRESP=1 THEN
  PRINT"EFICIENCIA [%] = ";
  COLOR JC11,JC0
  INPUT" ",EFIC
  EFIC=EFIC/100
ELSE
  PRINT"TRABAJO [";UQ$(IUW);"] = ";
  COLOR JC11,JC0
  INPUT" ",WU
  WJ=ABS(WU)/FCQ(IUW)
END IF
COLOR JC10,JC1
DHT=ZL*RGAS*TK/PIN*(PBAR-PIN)
IF JRESP=1 THEN
  DHR=DHT/EFIC
  WJ=DHR*FGM
ELSE
  DHR=WJ/FGM
  EFIC=DHT/DHR
END IF
HOBJ=HIN+DHR
IFLASH=8 'Isoentalpico
GOSUB 10000 'Flash
GOSUB 18500 'Conversion a unidades del usuario
'Impresion de W y n
LOCATE 9,1
EFIC=EFIC*100
COLOR JC10,JC1
PRINT " W =";
COLOR JC11,JC1
PRINT WU;
COLOR JC10,JC1
PRINT " ";UQ$(IUW)
PRINT " n =";
COLOR JC11,JC1
PRINT EFIC;
COLOR JC10,JC1
PRINT " %"
PRINT
IF JPRINT=1 THEN
  LPRINT;TAB(37);"BOMBA"
  LPRINT " W =";WU;UQ$(IUW);TAB(40);" n =";EFIC;" %"
END IF
RETURN

```

TURBCOMP.BAS

En esta subrutina se realizan los calculos de trabajo y eficiencia para turbinas y compresores. La alimentacion debe ser vapor, en caso contrario se escuchara un tono de error y se cambia el control al menu principal.

Esta subrutina se ejecuta desde el menu principal.

```

6000 '
JREN=2
GOSUB 9900 'Borra renglon
LOCATE 2,31
COLOR JC3,JC1
PRINT "TURBINA/COMPRESOR"
IF JFASE<4 THEN
    BEEP
    COLOR JC12,JC0
    LOCATE 4,1
    PRINT "La alimentacion es ";FASE$(JFASE);","
    PRINT "no se puede efectuar el calculo"
    GOSUB 9950 'Pausa
    JREN=4
    GOSUB 9900 'Borra renglon
    JREN=5
    GOSUB 9900 'Borra renglon
    JMENU=1
    RETURN
END IF
MENU$="1.CALCULAR TRABAJO 2.CALCULAR EFICIENCIA"
JREN=10
JCOL=29
JLONG=21
JMAX=2
JRESP=1
GOSUB 9000 'Entrada de datos
JBORR=2
GOSUB 9500 'Borrado
6070 LOCATE 4,1
COLOR JC10,JC1
PRINT "PRESION DE DESCARGA [";UP$(IUP);"] = ";
COLOR JC11,JC0
INPUT "",PU
PBAR=PU/FCP(IUP)
COLOR JC10,JC1
IF PBAR>PIN THEN
    IEF=-1
    LOCATE 2,38
    PRINT SPACE$(10)
    IF JPRINT=1 THEN LPRINT;TAB(36);"TURBINA"
END IF
IF PBAR>PIN THEN
    IEF=1
    LOCATE 2,31

```

```

PRINT SPACE$(B)
IF JPRINT=1 THEN LPRINT;TAB(35);"COMPRESOR"
END IF
IF PBAR=PIN THEN
BEEP
JREN=4
GOSUB 9900 'Borra renglon
GOTO 8070
END IF
COLOR JC10,JC1
LOCATE 5,1
IF JRESP=1 THEN
PRINT"EFICIENCIA [%] = ";
COLOR JC11,JC0
INPUT"",EFIC
EFIC=EFIC/100
ELSE
PRINT"TRABAJO [";UQ$(IOW);"] = ";
COLOR JC11,JC0
INPUT"",WU
WJ=ABS(WU)/FCQ(IOW)*IEF
END IF
COLOR JC10,JC1
SOBJ=SEN
IFLASH=9 'Isoentropico
GOSUB 10000 'Flash
DHT=HTM-HIN
IF JRESP=1 THEN
IF IEF=-1 THEN DHR=DHT*EFIC ELSE DHR=DHT/EFIC
WJ=DHR*FQM
ELSE
DHR=WJ/FQM
IF IEF=-1 THEN EFIC=DHR/DHT ELSE EFIC=DHT/DHR
END IF
HOBJ=MIN+DHR
IFLASH=8 'Isoentalpico
GOSUB 10000 'Flash
GOSUB 18500 'Conversion a unidades del usuario
'Impresion de W y n
LOCATE 9,1
EFIC=EFIC*100
COLOR JC10,JC1
PRINT " W = ";
COLOR JC11,JC1
PRINT WJ;
COLOR JC10,JC1
PRINT " ";UQ$(IOW)
PRINT " n = ";
COLOR JC11,JC1
PRINT EFIC;
COLOR JC10,JC1
PRINT " %"
PRINT
IF JPRINT=1 THEN LPRINT " W =";WJ;UQ$(IOW);TAB(40);" n =";EFIC;" %"
RETURN

```

BANCO.BAS

Esta subrutina permite una interaccion con el banco de datos.
Las actividades disponibles son:

1. Listado de componentes.
2. Consulta, bajas y modificaciones.
3. Adicionar componentes.

Esta subrutina se llama desde el programa principal o desde el modulo para la definicion del sistema de componentes en la subrutina SISTEMA.BAS.

```

7000 REM
7100 GOSUB 7200 'Pausa...
      OPEN "BANCO.DAT" AS #3 LEN=143
      FIELD 3,1 AS EXIST$, 18 AS BFOR$, 28 AS BNAME$, 8 AS BMM$, 8 AS BTC$, 8 AS BPC$, 8
AS BW$, 8 AS BCPA$, 8 AS BCPB$, 8 AS BPCP$, 8 AS BCPD$, 8 AS BDHF$, 8 AS BDGF$, 8 AS BEXQ$
, 8 AS BPOLAR$
7120 MENU$="1.LISTADO DE COMPONENTES          2.CONULTA, BAJAS Y MODIFICACIONES.
DICIONAR UN COMPONENTE          4.SALIR DEL BANCO DE DATOS"
      JREN=2
      GOSUB 9900 'Borra renglon
      LOCATE 2,25
      COLOR JC3,JC1
      PRINT "ACTUALIZADOR DEL BANCO DE DATOS"
      JRESP=4
      JREN=9
      JCOL=23
      JLONG=34
      JMAX=4
      GOSUB 9000 'Entrada de datos
      JBORR=4
      GOSUB 9500 'Borrado de lineas
      ON JRESP GOTO 15000,16000,17000,7160
7160 CLOSE #3
      RETURN

7200 '
      COLOR JC12,JC0
      LOCATE 12,31
      PRINT "Espere un momento..."
      RETURN

15000 '
'Listado de Componentes

      JREN=2
      GOSUB 9900 'Borra renglon
      LOCATE 2,29
      COLOR JC3,JC1
      PRINT "LISTADO DE COMPONENTES"
      GOSUB 15250 'Registro inicial

```

```

GOTO 7120 'Menu banco
15200 JREN=3
      JCOL=1
      JLONG=80
      JBORR=13
      GOSUB 9500 'Borrado
15250 IMAX=LOF(3)/143
      LOCATE 5,5
      COLOR JC10,JC1
      PRINT "REGISTRO INICIAL DE BUSQUEDA = ";
      COLOR JC11,JC0
      RESP$=""
      K$=""
15270 WHILE K$=""
      K$=INKEY$
      WEND
      KX=ASC(K$)
      IF KX=13 THEN 15310
      IF KX>47 AND KX<58 THEN
        RESP$=RESP$+K$
        PRINT K$;
      END IF
      K$=""
GOTO 15270 'Entrada de dato alfanumerico
15310 JREN=5
      GOSUB 9900 'Borra renglon
      JREG=VAL(RESP$)
      IF JREG<1 OR JREG>IMAX THEN
        BEEP
        GOTO 15250 'Registro inicial
      END IF
      COLOR JC4,JC1
      LOCATE 4,10
      PRINT "No."
      LOCATE 4,20
      PRINT "FORMULA"
      LOCATE 4,40
      PRINT "NOMBRE"
      COLOR JC2,JC1
      LOCATE 5,10
      PRINT STRING$(3,196)
      LOCATE 5,20
      PRINT STRING$(7,196)
      LOCATE 5,40
      PRINT STRING$(6,196)
15350 JREN=6
      LOCATE 6,1
      IF JREG>IMAX THEN JREG=1
      WHILE JREN<23 AND JREG<=IMAX
        GET 3,JREG
        IF EXIST$="N" THEN
          JREG=JREG+1
          GOTO 15400 'WEND
        END IF
        COLOR JC4,JC1

```

```

        PRINT;TAB(9);JREG;TAB(20);
        COLOR JC6,JC1
        PRINT BFOR$;TAB(40);BNAME$
        JREN=JREN+1
        JREG=JREG+1
15400 WEND
        LOCATE 23,50
        COLOR JC10,JC1
        PRINT"CONTINUAR EL LISTADO"
        MENU$="1.SI2.MO"
        JRESP=2
        JREN=23
        JCOL=66
        JLONG=4
        JMAX=2
        GOSUB 9000 'Entrada de datos
        JREN=22
        JCOL=50
        JLONG=20
        JBORR=3
        GOSUB 9500 'Borrado
        ON JRESP GOTO 15440,15450
15440 JREN=5
        JCOL=9
        JLONG=60
        JBORR=17
        GOSUB 9500 'Borrado
        GOTO 15360 'Imprime lista de registros
15450 JREN=3
        JCOL=9
        JLONG=60
        JBORR=19
        GOSUB 9500 'Borrado
        JREN=2
        GOSUB 9900 'Borra renglon
        RETURN
*
15500 REM
'Formato para la entrada de registros
*
        COLOR JC6,JC1
        LOCATE 4,1
        PRINT "No. COMPONENTE:";TAB(50);"CAPACIDAD CALORIFICA [J/MOL]"
        PRINT"1. FORMULA =";TAB(50);
        COLOR JC2,JC1
        PRINT STRING$(20,196)-
        COLOR JC6,JC1
        PRINT"2. NOMBRE =";TAB(50);"7. A ="
        PRINT"      MM =";TAB(50);"8. B ="
        PRINT"PROPIEDADES CRITICAS";TAB(50);"9. C ="
        COLOR JC2,JC1
        PRINT STRING$(20,196);
        COLOR JC6,JC1
        PRINT ;TAB(49);"10. D ="
        PRINT"3. TC [xK] =";TAB(49);"11. HF ="
        PRINT"4. PC [BAR] =";TAB(49);"12. GF ="

```

```

PRINT 5.          W ="
PRINT 6. P. POLAR =";TAB(53);"EXQ ="
COLOR JC2,JC1
PRINT STRING$(80,196)
LOCATE 16,1
PRINT STRING$(80,196)
LOCATE 4,50
COLOR JC4,JC1
PRINT "CAPACIDAD CALORIFICA [J/MOL]"
COLOR JC5,JC1
PRINT 1"
PRINT 2"
LOCATE 6,50
PRINT 7"
LOCATE 7,50
PRINT 8"
COLOR JC4,JC1
PRINT "PROPIEDADES CRITICAS";TAB(50);
LOCATE 8,50
COLOR JC5,JC1
PRINT 9"
LOCATE 9,49
PRINT 10"
PRINT 3"
LOCATE 10,49
PRINT 11"
PRINT 4"
LOCATE 11,49
PRINT 12"
PRINT 5"
PRINT 6"
RETURN

```

```

16000 REM
'Consultas, Bajas y Modificaciones

```

```

JREN=2
GOSUB 9900 'Borra renglon
LOCATE 2,24
COLOR JC3,JC1
PRINT "CONSULTAS, BAJAS Y MODIFICACIONES"
16040 GOSUB 15500 'Formato
16050 JREN=15
GOSUB 9900 'Borra renglon
LOCATE 15,11
COLOR JC10,JC1
PRINT "NUMERO DE COMPONENTE EN EL BANCO ( H/AYUDA ";CHR$(17);CHR$(196);CHR$(2
17):"/FIN ) = ";
COLOR JC11,JC0
GOSUB 16800 'Entrada de dato alfanumerico
IF K$="H" THEN 16040
IF RESP$="" THEN
JREN=3
JCOL=1
JLONG=80
JBORR=13

```

```

GOSUB 9500 'Borrado
GOTO 7120 'Menu banco
END IF
JREG=VAL(RES#)
IF JREG=0 THEN
  BEEP
  GOTO 16050 'Pregunta registro
END IF
LOCATE 4,16
PRINT JREG
JREN=15
GOSUB 9900 'Borra renglon
GOSUB 16900 'Busca, imprime registro de disco
IF EXIST#="N" THEN 16050
16100 'Correcciones y bajas
JREN=15
GOSUB 9900 'Borra renglon
LOCATE 15,10
COLOR JC10,JC1
PRINT"NUMERO DE SECCION A CORREGIR ( B/BAJA ";CHR$(17);CHR$(196);CHR$(217);"
/REGISTRO CORRECTO ) = ";
COLOR JC11,JC0
RES#=""
K#=""
16120 WHILE K#=""
  K#=INKEY#
WEND
K#=ASC(K#)
IF K#=13 THEN 16170
IF K#>47 AND K#<58 THEN
  RES#=RES#+K#
  PRINT K#;
END IF
IF K#="B" OR K#="b" THEN 16210
K#=""
GOTO 16120 'Pregunta seccion
16170 '
JREN=15
GOSUB 9900 'Borra renglon
16180 IF RES#="" THEN
  JREN=3
  JCOL=1
  JLONG=80
  JBORR=13
  GOSUB 9500 'Borrado
  GOTO 16000 'Consultas, bajas y modificaciones
END IF
JSEC=VAL(RES#)
COLOR JC10,JC1
ON JSEC GOSUB 16240,16250,16260,16270,16280,16290,16300,16310,16320,16330,1634
0,16350
PUT 3,JREG
GOTO 16100 'Correcciones y bajas
16210 COLOR JC10,JC1
LOCATE 17,50
PRINT"CONTINUAR CON LA BAJA"
MENU#="1.SI2.NO"

```

```

JREN=17
JCOL=67
JLONG=4
JRESP=2
JMAX=2
GOSUB 9000 'Entrada de datos
JREN=18
JBORR=4
JCOL=50
JLONG=22
GOSUB 9500 'Borrado
JREN=15
GOSUB 9900 'Borra renglon
IF JRESP=2 THEN
  GOTO 16100 'Correcciones y bajas
ELSE
  LSET EXIST$="N"
  PUT 3,JREG
  RESP$=""
  GOTO 16180 'Pregunta seccion
END IF
16240 LOCATE 5,15
      PRINT SPACE$(18)
      GOSUB 17500 'Formula
      GOSUB 16500 'Ex. quim. y MM
      LSET BFOR$=FORM$
      RETURN
16250 LOCATE 6,15
      PRINT SPACE$(26)
      LOCATE 6,15
      COLOR JC11,JCO
      INPUT "",NOMB$
      LSET BNAME$=NOMB$
      RETURN
16260 LOCATE 10,14
      PRINT SPACE$(20)
      LOCATE 10,14
      COLOR JC11,JCO
      INPUT "",TC$
      TC=VAL(TC$)
      LSET BTC$=MKD$(TC)
      RETURN
16270 LOCATE 11,14
      PRINT SPACE$(20)
      LOCATE 11,14
      COLOR JC11,JCO
      INPUT "",PC$
      PC=VAL(PC$)
      LSET BPC$=MKD$(PC)
      RETURN
16280 LOCATE 12,14
      PRINT SPACE$(20)
      LOCATE 12,14
      COLOR JC11,JCO
      INPUT "",W$
      W=VAL(W$)

```

```

LSET BW$=MKD$(W)
RETURN
16290 LOCATE 13,14
PRINT SPACE$(20)
LOCATE 13,14
COLOR JC11,JCO
INPUT "",POLAR$
POLAR=VAL(POLAR$)
LSET BPOLAR$=MKD$(POLAR)
RETURN
16300 LOCATE 6,58
PRINT SPACE$(20)
LOCATE 6,58
COLOR JC11,JCO
INPUT "",CPA$
CPA=VAL(CPA$)
LSET BCPA$=MKD$(CPA)
RETURN
16310 LOCATE 7,58
PRINT SPACE$(20)
LOCATE 7,58
COLOR JC11,JCO
INPUT "",CPB$
CPB=VAL(CPB$)
LSET BCPB$=MKD$(CPB)
RETURN
16320 LOCATE 8,58
PRINT SPACE$(20)
LOCATE 8,58
COLOR JC11,JCO
INPUT "",CPC$
CPC=VAL(CPC$)
LSET BCPC$=MKD$(CPC)
RETURN
16330 LOCATE 9,58
PRINT SPACE$(20)
LOCATE 9,58
COLOR JC11,JCO
INPUT "",CPD$
CPD=VAL(CPD$)
LSET BCPD$=MKD$(CPD)
RETURN
16340 LOCATE 10,58
PRINT SPACE$(20)
LOCATE 10,58
COLOR JC11,JCO
INPUT "",DHF$
DHF=VAL(DHF$)
LSET BDHF$=MKD$(DHF)
RETURN
16350 LOCATE 11,58
PRINT SPACE$(20)
LOCATE 11,58
COLOR JC11,JCO
INPUT "",DGF$
DGF=VAL(DGF$)

```

```
LSET BDGF$=MKD$(DGF)
RETURN
```

```
16500 REM Calculo de la Exergía Química y masa molecular
```

```
EXQ=0
MM=0
IF JEXTER=1 THEN 16560
FOR J=1 TO 9
  EXQ=EXQ+JCOEF(J)*EXSTD(J)
  MM=MM+JCOEF(J)*MMATOM(J)
```

```
NEXT J
LSET BMM$=MKD$(MM)
LOCATE 7,14
COLOR JC11,JC1
PRINT SPACE$(20)
LOCATE 7,14
PRINT MM
LSET BEXQ$=MKD$(EXQ)
LOCATE 13,58
PRINT SPACE$(20)
LOCATE 13,58
PRINT EXQ
```

```
RETURN
```

```
16560
```

```
LOCATE 7,14
COLOR JC10,JC1
PRINT SPACE$(20)
LOCATE 7,15
COLOR JC11,JC0
INPUT "",MM$
MM=VAL(MM$)
LSET BMM$=MKD$(MM)
LOCATE 13,58
COLOR JC10,JC1
PRINT SPACE$(20)
LOCATE 13,59
COLOR JC11,JC0
INPUT "",EXQ$
EXQ=VAL(EXQ$)
LSET BEXQ$=MKD$(EXQ)
```

```
RETURN
```

```
16600 REM Entrada de datos
```

```
GOSUB 15500 'Formato
```

```
16620
```

```
JREN=15
```

```
GOSUB 9900 'Borra renglon
```

```
LOCATE 4,18
```

```
COLOR JC4,JC1
```

```
PRINT I;
```

```
COLOR JC8,JC1
```

```
PRINT " de";
```

```
COLOR JC4,JC1
```

```
PRINT IN
```

```
LOCATE 15,15
```

```
COLOR JC10,JC1
```

```
PRINT "NUMERO DE COMPONENTE EN EL BANCO ( H/AYUDA ) = ";
```

```
COLOR JC11,JC0
```

```

QOSUB 16800 'Entrada de dato alfanumerico
IF RESP#="" OR K#="H" THEN 16600
JREG=VAL(RESP#)
IF JREG=0 THEN
  BEEP
  GOTO 16620 'Entrada de datos
END IF
JREN=16
QOSUB 9900 'borra renglon
QOSUB 16900 'Busca, imprime registro de disco
IF EXIST#="M" THEN 16620
LOCATE 17,80
COLOR JC10,JC1
PRINT "REGISTRO CORRECTO"
MENU#="1.SI2.NO"
JREN=17
JCOL=73
JLONG=4
JMAX=2
JRESP=1
QOSUB 9000 'Entrada de datos
JREN=3
JCOL=1
JLONG=80
JBORR=16
QOSUB 9500 'Borrado
IF JRESP=2 THEN 16600
FORM$(I)=BFOR#
NOMB$(I)=BNAME#
MM(I)=CVD(BMM#)
TC(I)=CVD(BTC#)
PC(I)=CVD(BPC#)
W(I)=CVD(BW#)
POLAR(I)=CVD(BPOLAR#)
CPA(I)=CVD(BCPA#)
CPB(I)=CVD(BCPB#)
CPC(I)=CVD(BCPC#)
CPD(I)=CVD(BCPD#)
HF(I)=CVD(BDHF#)
GF(I)=CVD(BDGF#)
EXQ(I)=CVD(BEXQ#)
SF(I)=(HF(I)-GF(I))/TR
RETURN
16800 RESP#=""
K#=""
16810 WHILE K#=""
  K#=INKEY#
WEND
K#="ASC(K#)"
IF K#="13" THEN
  RETURN
END IF
IF K#>47 AND K#<58 THEN
  RESP#=RESP#+K#
  PRINT K#;

```

```

END IF
IF K$="H" OR K$="h" THEN
  GOSUB 15200 'Lista
  K$="H"
  RETURN
END IF
K$=""
GOTO 16810 'Entrada de dato alfanumerico

16900 LSET EXIST$="S"
IF JREQ>IMAX THEN LSET EXIST$="N" ELSE GET 3,JREQ
IF EXIST$="N" THEN
  JREN=15
  GOSUB 9900 'Borra renglon
  LOCATE 15,30
  COLOR JC12,JC0
  PRINT"ESTE REGISTRO NO EXISTE"
  GOSUB 9950 'Pausa
  GOSUB 9900 'Borra renglon
  LOCATE 4,18
  PRINT SPACE$(10)
  RETURN
END IF
COLOR JC11,JC1
LOCATE 5,15
PRINT BFOR$
LOCATE 6,15
PRINT BNAME$
LOCATE 7,14
PRINT USING "####.###";CVD(BMM$)
LOCATE 10,14
PRINT USING "####.##";CVD(BTC$)
LOCATE 11,14
PRINT USING "###.##";CVD(BPC$)
LOCATE 12,14
PRINT USING "+#.###";CVD(BM$)
LOCATE 13,14
PRINT USING "+#.###";CVD(BPOLAR$)
LOCATE 6,58
U$="+#.###"
PRINT USING U$;CVD(BCPA$)
LOCATE 7,58
PRINT USING U$;CVD(BCPB$)
LOCATE 8,58
PRINT USING U$;CVD(BCPC$)
LOCATE 9,58
PRINT USING U$;CVD(BCPD$)
LOCATE 10,58
PRINT USING U$;CVD(BDHF$)
LOCATE 11,58
PRINT USING U$;CVD(BDGF$)
LOCATE 13,58
PRINT USING U$;CVD(BEXQ$)
RETURN

```

17000 ,
'Adicionar un componente

```
JREN=2
GOSUB 9900 'Borra renglon
LOCATE 2,29
COLOR JC3,JC1
PRINT "ADICIONAR UN COMPONENTE"
JREG=0
LSET EXIST$="Y"
17050 GOSUB 7200 'Pausa...
      WHILE EXIST$="Y"
        JREG=JREG+1
        GET 3,JREG
      WEND
JREN=12
GOSUB 9900 'Borra renglon
GOSUB 15500 'Formato
LOCATE 15,18
COLOR JC10,JC1
PRINT"ALIMENTAR DATOS DEL COMPONENTE ( ";CHR$(17);CHR$(196);CHR$(217);"/FIN
) ="
LOCATE 4,16
COLOR JC4,JC1
PRINT JREG
GOSUB 17500 'Formula
LSET BFOR$=FORM$
IF FORM$="" THEN
  JREN=3
  JCOL=1
  JBORR=13
  GOSUB 9500 'Borrado
  GOTO 7120 'Menu banco
ELSE
  GOSUB 16500 'Exq y MM
END IF
LOCATE 6,15
COLOR JC11,JC0
INPUT" ",NOMB$
LSET BNAME$=NOMB$
LOCATE 10,14
INPUT" ",TC$
TC=VAL(TC$)
LSET BTC$=MKD$(TC)
LOCATE 11,14
INPUT" ",PC$
PC=VAL(PC$)
LSET BPC$=MKD$(PC)
LOCATE 12,14
INPUT" ",W$
W=VAL(W$)
LOCATE 13,14
INPUT" ",POLAR$
POLAR=VAL(POLAR$)
LSET BPOLAR$=MKD$(POLAR)
LOCATE 6,58
```

```

INPUT "",CPA$
CPA=VAL(CPA$)
LSET BCPA$=MKD$(CPA)
LOCATE 7,58
INPUT "",CPB$
CPB=VAL(CPB$)
LSET BCPB$=MKD$(CPB)
LOCATE 8,58
INPUT "",CPC$
CPC=VAL(CPC$)
LSET BCPC$=MKD$(CPC)
LOCATE 9,58
INPUT "",CPD$
CPD=VAL(CPD$)
LSET BCPD$=MKD$(CPD)
LOCATE 10,58
INPUT "",DHF$
DHF=VAL(DHF$)
LSET BDHF$=MKD$(DHF)
LOCATE 11,58
INPUT "",DGF$
DGF=VAL(DGF$)
LSET BDGF$=MKD$(DGF)
LSET EXIST$="Y"
PUT 3,JREG
GOSUB 9950 'Pausa
JREN=3
JCOL=1
JLONG=80
JBORR=10
GOSUB 9500 'Borrado
GOTO 17050 'Busca registro vacio

```

```

17500 REM Subrutina para introducir formula"
LOCATE 17,1
COLOR JC12,JC0
PRINT "Para introducir formula externa presione [Esc]"
A$=" C H O N S F C I Br I "
COLOR JC6,JC1
FOR J=1 TO 9
  JCOEF(J)=0
  LOCATE 18,J*3-2
  PRINT MID$(A$,3*J-2,3)
NEXT J
J=1
17550 IF J<1 THEN
  J=1
  BEEP
ELSE
  IF J>9 THEN
    J=9
    BEEP
  END IF
END IF
COLOR JC8,JC9
LOCATE 18,J*3-2

```

```

PRINT MID$(A$,3*J-2,3)
V$=""
LOCATE 19,J*3-2
COLOR JC11,JC1
17575 K$=""
      WHILE K$=""
            K$=INKEY$
      WEND
      KX=ASC(K$)
      IF KX<58 AND KX>47 THEN
            V$=V$+K$
            PRINT K$;
            JCOEF(J)=VAL(V$)
      END IF
      IF KX=27 THEN
            JEXTER=1
            GOSUB 17760 'Parametros para borrar
            LOCATE 5,15
            COLOR JC10,JC1
            PRINT SPACE$(18)
            LOCATE 5,15
            COLOR JC11,JC0
            INPUT "",FORM$
            GOTO 17770 'RETURN
      ELSE
            JEXTER=0
      END IF
      IF KX=13 THEN 17690
      IF LEN(K$)=2 THEN
            K$=RIGHT$(K$,1)
      ELSE
            GOTO 17575 'Entrada de coeficiente
      END IF
      IF K$="M" THEN JO=J+1
      IF K$="Q" THEN JO=1
      IF K$="K" THEN JO=J-1
      IF K$="O" THEN JO=9
      GOSUB 17680 'Imprime atomo
      J=JO
      GOTO 17550 'Validaz de atomo
17680 COLOR JC6,JC1
      LOCATE 18,J*3-2
      PRINT MID$(A$,3*J-2,3)
      RETURN
17690 GOSUB 17680 'Imprime atomo
      FORM$=""
      FOR J=1 TO 9
            B$=STR$(JCOEF(J))
            B$=RIGHT$(B$,LEN(B$)-1)
            IF JCOEF(J)=1 THEN B$=""
            IF JCOEF(J)<>0 THEN FORM$=FORM$+ATOM$(J)+B$
      NEXT J
      LOCATE 5,15
      COLOR JC11,JC1
      PRINT FORM$
17760 JREN=16

```

JCOL=1
JBORR=3
JLONG=80
GOSUB 9500 'Borrado
17770 RETURN

FLASH.BAS

En esta subrutina se calculan los diferentes tipos de FLASH.
Tambien esta contenido el proceso iterativo para resolverlos.
Los diferentes tipos de FLASH estan dados por:

```
IFLASH = 1\ Temperatura de Burbuja
        = 2\ Temperatura de Rocio
        = 3\ Presion de Burbuja
        = 4\ Presion de Rocio
        = 5\ Flash @ Temperatura y Presion ctes.
        = 6\ Flash @ Temperatura y Vaporizacion ctes.
        = 7\ Flash @ Presion y Vaporizacion ctes.
        = 8\ Flash @ Presion y Entalpia [h] ctes.
        = 9\ Flash @ Presion y Entropia [s] ctes.
```

```
IVAR = 1\ Temperatura
      = 2\ Presion
      = 3\ Vaporizacion
```

```
IEC = 1\ Soave
      = 2\ Peng-Robinson
```

Esta subrutina se llama desde la definicion de corrientes, el calculo aislado de FLASH y desde el calculo de equipos de proceso. Se llama desde las subrutinas:

```
DEFCORR.BAS
EXPFLASH.BAS
INTERCAM.BAS
BOMBA.BAS
TURBCOMP.BAS
```

```
10000 '
      JFLASH=0
      LOCATE 2,77
      COLOR JC12+16,JC1
      PRINT FLASH$(IFLASH)
      ON IFLASH GOTO 10300,10300,10600,10600,10620,10620,10320,10320,10320

10300 REM Incognita: Temperatura
      V=IFLASH-1

10320 IVAR=1
      TK=0
      FOR I=1 TO IN
          TK=TK+Z(I)*TC(I)/(1-LOG(PBAR/PC(I)))/5.3727/(1+W(I)))
      NEXT I
      IF IFLASH<=7 THEN 10700 'Inicializacion de composiciones
      JFLASH=IFLASH-7
      FOR I=1 TO IN
          X(I)=Z(I)
          Y(I)=Z(I)
      NEXT I
```

```

IFF=0
IFF2=0
GOSUB 12000 'Keq
HVI=HTV
HLI=HTL
SVI=STV
SLI=STL
TKI=TK
IF JFLASH=1 THEN
  Q=HOBJ
  QL=HTL
  QV=HTV
  DQL=DHL
  DQV=DHV
END IF
IF JFLASH=2 THEN
  Q=SOBJ
  QL=STL
  QV=STV
  DQL=DSL
  DQV=DSV
END IF
IF QV=QL THEN
  IF Q>QL THEN IFF=2 ELSE IFF=1
ELSE
  V=(Q-QL)/(QV-QL)
  V0=V
  GOSUB 11400 'Validez de (V/F)
  IF IFF2=0 THEN 10700 'Inicializacion de composiciones
  TO=TK
  GOSUB 11100 'Funcion de convergencia 2 fases
  IF IFF2=1 AND TK<TO THEN IFF=1
  IF IFF2=2 AND TK>TO THEN IFF=2
END IF
GOTO 10800 'Flash 2 fases

```

1

```

10600 REM Incognita: Presion y Vaporizacion
V=IFLASH-3
10620 PB=0
PR=0
FOR I=1 TO IN
  PQ=PC(I)*EXP(5.3727*(1+W(I))*(1-TC(I)/TK))
  PB=PB+Z(I)*PQ
  PR=PR+Z(I)/PQ
NEXT I
PR=1/PR
IF IFLASH=5 THEN
  IVAR=3
  IF PB<>PR THEN V=(PBAR-PB)/(PR-PB) ELSE V=0.5
ELSE
  IVAR=2
  PBAR=V*PR+(1-V)*PB
END IF

```

1

```

10700 REM Inicializacion de composiciones con gas ideal
SX=0

```

```

SY=0
MMV=0
MML=0
FOR I=1 TO IN
  KEQ(I)=PC(I)/PBAR*EXP(5.3727*(1+W(I))*(1-TC(I)/TK))
NEXT I
VO=V
IFF3=0
IFF2=0
GOSUB 11400 'Validex (V/F)
FOR I=1 TO IN
  X(I)=Z(I)/(1+V*(KEQ(I)-1))
  Y(I)=X(I)*KEQ(I)
  SX=SX+X(I)
  SY=SY+Y(I)
NEXT I
FOR I=1 TO IN
  X(I)=X(I)/SX
  Y(I)=Y(I)/SY
  MML=MML+X(I)*MM(I)
  MMV=MMV+Y(I)*MM(I)
NEXT I
IFF=0

10800 REM Calculo del Flash
.FUN=CONV+1
ITER=0
IF IFF=0 THEN 10830 ELSE 10900
10830 REM Funcion de convergencia 2 fases
FUN=CONV+1
IFF2=0

10900 REM Ciclo iterativo
WHILE ABS(FUN)>CONV AND ITER<=JITER AND IFF=0
  GOSUB 14800 'Restreo
  GOSUB 12000 'Keq
  ITER=ITER+1
  IF IFLASH>5 THEN V=VU*(1+IUX2*(MMV/MMF-1))/FCX(IUX)
  IF JFLASH=1 THEN
    Q=MOBJ
    QL=HTL
    QV=HTV
    DQL=DHL
    DQV=DHV
  END IF
  IF JFLASH=2 THEN
    Q=SOBJ
    QL=STL
    QV=STV
    DQL=DSL
    DQV=DSV
  END IF
  IF IFLASH>7 THEN
    V=(Q-QL)/(QV-QL)
    DV=((Q-QV)*DQL-(Q-QL)*DQV)/(QV-QL)^2
  ELSE

```

```

      DV=0
      IF IVAR=3 THEN DV=1
    END IF
    GOSUB 11400 'Validez de (V/F)
    GOSUB 11100 'Funcion 2 fases
  WEND
  IF IFF=0 AND V<0 THEN IFF=1
  IF IFF=0 AND V>1 THEN IFF=2
  IF IFF=1 THEN JFASE=1
  IF IFF=2 THEN JFASE=5
  IF IFF<>0 THEN 11600 '1 Fase
  IF V=0 THEN JFASE=2
  IF V=1 THEN JFASE=4
  IF V>0 AND V<1 THEN JFASE=3
  GOSUB 14800
  LOCATE 2,77
  COLOR JC10,JC1
  PRINT SPACE$(2)
  RETURN
11100 REM Calculo de la funcion de convergencia
      SX=0
      SY=0
      SDXT=0
      SDXV=0
      SDYT=0
      SDYV=0
      FOR I=1 TO IN
        DEN=1+V*(KEQ(I)-1)
        DEN2=DEN*DEN
        X(I)=Z(I)/DEN
        Y(I)=X(I)*KEQ(I)
        SX=SX+X(I)
        SY=SY+Y(I)
        DXT=Z(I)*V*DKEQ(I)/DEN2
        DXV=Z(I)*(KEQ(I)-1)/DEN2
        SDXT=SDXT-DXT
        SDXV=SDXV-DXV
        SDYT=SDYT+X(I)*DKEQ(I)-KEQ(I)*DXT
        SDYV=SDYV-KEQ(I)*DXV
      NEXT I
      FOR I=1 TO IN
        X(I)=X(I)/SX
        Y(I)=Y(I)/SY
      NEXT I
      FUN=LOG(SY/SX)
      DY=SDYT+SDYV*DV
      DX=SDXT+SDXV*DV
      DFUN=DY/SY-DX/SX
      ON IVAR GOTO 11280,11290,11300
11280 TK=TK-FUN/DFUN
      GOTO 11310
11290 PBAR=PBAR-FUN/DFUN
      GOTO 11310
11300 V=V-FUN/DFUN
11310 RETURN

```

11400 REM Intervalos validos para la vaporizacion

IFF1=IFF2

IFF2=0

IFF4=IFF3

IFF3=0

IF V>=0 AND V<=1 THEN 11570

VFMIN=-1000000000000

VFMAX=1000000000000

JK=0

FOR I=1 TO IN

IF Z(I)<>0 THEN

JK=JK+1

IF KEQ(I)<>0 THEN VF=1/(1-KEQ(I))

IF VF<=0 AND VF>VFMIN THEN VFMIN=VF

IF VF>=1 AND VF<VFMAX THEN VFMAX=VF

END IF

NEXT I

IF JK>1 OR IFLASH=5 THEN

IF VFMAX=1000000000000 THEN

V=1

IFF=2

GOTO 11580

END IF

IF VFMIN=-1000000000000 THEN

V=0

IFF=1

GOTO 11580

END IF

END IF

IF V<VFMIN THEN

V=.9*VFMIN

IFF2=1

END IF

IF V>VFMAX THEN

V=1+.9*(VFMAX-1)

IFF2=2

END IF

IF IFF1=IFF2 AND IFF2<>0 THEN

IFF=IFF2

V=IFF-1

END IF

IF V<0 AND V<V0 THEN IFF3=1

IF V>1 AND V>V0 THEN IFF3=2

IF IFF4=IFF3 AND IFF3<>0 THEN

IFF=IFF3

V=IFF-1

END IF

11570 V0=V

11580

RETURN

11600 REM Funcion de Convergencia 1 Fase

FOR I=1 TO IN

ON IFF GOTO 11630,11640

11630 X(I)=Z(I)

```

      GOTO 11650
11640 Y(I)=Z(I)
11650 NEXT I
      V=IFF-1
      IF IVAR=3 THEN
        GOSUB 12000 'Props
        FUN=0
        GOSUB 14800 'Rastreo
        RETURN
      END IF
      CPM=(HVI)/(TKI-TR)
      IF JFLASH=1 THEN TK=TR+(HOBJ+(2-IFF)*(HVI-HLI))/CPM
      IF JFLASH=2 THEN TK=TR*EXP((SOBJ-(2-IFF)*(SVI-SLI))/CPM)
      ITER=0
      FUN=CONV+1
      WHILE ABS(FUN)>CONV AND ITER<=JITER
        GOSUB 14800 'Rastreo
        ITER=ITER+1
        T0=TK
        GOSUB 12000 'Kecq
        ON JFLASH GOTO 11760,11770
11760   FUN=HTM-HOBJ
        DFUN=V*DHV+(1-V)*DHL
        GOTO 11780
11770   FUN=STM-SOBJ
        DFUN=V*DSV+(1-V)*DSL
11780   DTK=-FUN/DFUN
        IF ABS(DTK)>.4*TK THEN DTK=SGN(DTK)*.4*TK
        TK=TK+DTK
        FUN=(TK-T0)
      WEND
      GOSUB 14800 'Rastreo
      LOCATE 2,77
      COLOR JC10,JC1
      PRINT SPACE$(2)
11820 RETURN
'
14800 '
'Rastreo de iteraciones
'
      JREN=3
      JCOL=1
      JLONG=80
      JBORR=4
      GOSUB 9500 'Borrado
      LOCATE 4,1
      COLOR JC10,JC1
      PRINT "ITERACION NO."
      LOCATE 4,41
      PRINT "FUNCION OBJETIVO =";
      COLOR JC11,JC1
      PRINT USING "+#.##*****";FUN
      LOCATE 4,14
      IF ITER=0 THEN PRINT "INICIALIZACION" ELSE PRINT ITER
      COLOR JC10,JC1
      PRINT "TEMPERATURA =";

```

```

COLOR JC11,JC1
PRINT TK*FCT1(IUT)-FCT2(IUT);
COLOR JC10,JC1
PRINT " ";UT$(IUT)
PRINT "PRESION =";
COLOR JC11,JC1
PRINT PBAR*FCP(IUP);
COLOR JC10,JC1
PRINT " ";UP$(IUP)
PRINT "(V/F) = ";
COLOR JC11,JC1
IF IFLASH<6 OR IFLASH>7 THEN VU=V*FCX(IUX)*(1+IUX2*(MMV/MMF-1))
IF IFF=0 THEN
  PRINT VU;
  COLOR JC10,JC1
  PRINT UX$(IUX)
ELSE
  PRINT FASE$(JFASE)
END IF
RETURN

```

PROPS.BAS

Esta subrutina calcula la constante de equilibrio y las propiedades termodinamicas (entalpia, entropia y exergia) para las corrientes de proceso. Tambien se calculan las derivadas analiticas de las propiedades termodinamicas.

El calculo se efectua mediante ecuaciones de estado cubicas y utiliza una subrutina para la solucion analitica del factor de compresibilidad.

Esta subrutina se llama desde el calculo de FLASH.

12000 '

'Calculo de Constante de Equilibrio

IF IFF=2 THEN 12100 'Vapor

'Liquido

FOR I=1 TO IN

XX(I)=X(I)

NEXT I

IFASE=1

GOSUB 12500 'Propiedades

FOR I=1 TO IN

FIL(I)=FI(I)

DFIL(I)=DFI(I)

NEXT I

HL=HM

SL=SS

ZL=ZZ

DHL=DHM

DSL=DSM

MML=MNM

EXQL=EXEQ

EXFL=EXEF

EXTL=EXET

HTL=HMT

STL=SSS

IEXZL=IEXZ

IF IFF=1 THEN 12200 'Mezcla

12100 '

'Vapor

FOR I=1 TO IN

XX(I)=Y(I)

NEXT I

IFASE=2

GOSUB 12500 'Propiedades

FOR I=1 TO IN

FIV(I)=FI(I)

DFIV(I)=DFI(I)

NEXT I

MV=HM

SV=SS

IEXZV=IEXZ

ZV=ZZ

```

DHV=DHM
DSV=DSM
MMV=MMM
EXQV=EXEQ
EXFV=EXEF
EXTV=EXET
HTV=HMT
STV=SST

```

```

12200 '
'Mezcla

```

```

FOR I=1 TO IN
  KEQ(I)=FIL(I)/FIV(I)
  DKEQ(I)=(FIV(I)*DFIL(I)-FIL(I)*DFIV(I))/FIV(I)^2
NEXT I
HM=V*HV+(1-V)*HL
SM=V*SV+(1-V)*SL
EXFM=EXFV*V+EXFL*(1-V)
EXQM=EXQV*V+EXQL*(1-V)
EXTM=EXTV*V+EXTL*(1-V)
HTM=V*HTV+(1-V)*HTL
STM=V*STV+(1-V)*STL
RETURN

```

```

12500 '

```

```

'Calculo de Propiedades con Ecuacion de Estado

```

```

FOR I=1 TO IN
  M(I)=CTE1+CTE2*W(I)+CTE3*W(I)^2
  ALF(I)=(1+M(I)*(1-SQR(TK/TC(I))))^2
  A(I)=OMEGAA*PBAR/PC(I)*(TC(I)/TK)^2*ALF(I)
  B(I)=OMEGAB*PBAR/PC(I)*TC(I)/TK
NEXT I
AM=0
BM=0
AP=0
MM=0
EXEQ=0
FOR I=1 TO IN
  BM=BM+XX(I)*B(I)
  MM=MM+XX(I)*M(I)
  EXEQ=EXEQ+XX(I)*(EXQ(I)+GF(I))
  FOR J=1 TO IN
    AA=XX(I)*XX(J)*SQR(A(I)*A(J))*(1-KIJ(I,J))
    AM=AM+AA
    AP=AP+AA*(M(I)*SQR(TK/ALF(I)/TC(I))+M(J)*SQR(TK/ALF(J)/TC(J)))/2
  NEXT J,I
IEZX=0
GOSUB 14000 'Zetas
IF IEC=1 THEN
  ELE=LOG(1+BM/ZZ)
ELSE
  ELE=.3535533906*LOG((ZZ+2.4142135624*BM)/(ZZ-.4142135624*BM))
END IF
HGI=0
SGI=0
HHF=0
SSF=0

```

```

FOR I=1 TO IN
  IF XX(I)>0 THEN
    HGI=HGI+XX(I)*(CPA(I)*(TK-TR)+CPB(I)*(TK^2-TR^2)/2+CPC(I)*(TK^3-TR^3)/3
+CPD(I)*(TK^4-TR^4)/4)
    HHF=HHF+XX(I)*HF(I)
    SGI=SGI+XX(I)*(CPB(I)*(TK-TR)+CPC(I)*(TK^2-TR^2)/2+CPD(I)*(TK^3-TR^3)/3
-RGAS*LOG(PBAR*XX(I))+CPA(I)*LOG(TK/TR))
    SSF=SSF+XX(I)*SF(I)
  END IF
NEXT I
HH=HGI+RGAS*TK*(ZZ-1-(AM+AP)*ELE/BM)
SS=SGI+RGAS*(LOG(ZZ-BM)-AP*ELE/BM)
HHT=HH+HHF
SST=SS+SSF
EXEF=HH-TR*SS
EXET=EXEF+EXEQ
FOR I=1 TO IN
  SUM(I)=0
  FOR J=1 TO IN
    SUM(I)=SUM(I)+XX(J)*SQR(A(I)*A(J))*{(1-KIJ(I,J))
  NEXT J
  GUS(I)=B(I)/BM-2*SUM(I)/AM
  FI(I)=EXP(B(I)/BM*(ZZ-1)-LOG(ZZ-BM)+AM*GUS(I))*ELE/BM)
NEXT I
ON IVAR GOTO 13000,13200,13400 'Derivadas

```

13000 '

'Derivada con respecto a Temperatura, d/dT

```

FOR I=1 TO IN
  DALF(I)=-M(I)/SQR(TC(I)*TK)*(1+M(I))*(1-SQR(TK/TC(I)))
  DA(I)=A(I)*(DALF(I)/ALF(I)-2/TK)
  DB(I)=-B(I)/TK
NEXT I
GOSUB 13500 'dZ
DHGI=0
DSGI=0
DAP=0
FOR I=1 TO IN
  DHGI=DHGI+XX(I)*(CPA(I)+TK*(CPB(I)+TK*(CPC(I)+TK*CPD(I))))
  DSGI=DSGI+XX(I)*(CPA(I)/TK+CPB(I)+TK*(CPC(I)+TK*CPD(I)))
  FOR J=1 TO IN
    DAP1=(A(I)*DA(J)+A(J)*DA(I))/SQR(A(I)*A(J))*(M(I)*SQR(TK/ALF(I)/TC(I))+
M(J)*SQR(TK/ALF(J)/TC(J)))
    DAP2=SQR(A(I)*A(J))*(M(I)*SQR(ALF(I)/TK/TC(I))*(ALF(I)-TK*DALF(I))/ALF
(I)^2+M(J)*SQR(ALF(J)/TK/TC(J))*(ALF(J)-TK*DALF(J))/ALF(J)^2)
    DAP=DAP+XX(I)*XX(J)*{(1-KIJ(I,J))*(DAP1+DAP2)/4
  NEXT J,I
  DHM=DHGI+RGAS*(ZZ-1-(AM+AP)/BM*ELE+TK*(DZZ-(AM+AP)*DELE/BM-ELE*(BM*(DAM+DAP)-
(AM+AP)*DBM)/BM^2))
GOTO 13600 'dFI

```

13200 '

'Derivada con respecto a Presion, d/dP

```

FOR I=1 TO IN
  DA(I)=A(I)/PBAR
  DB(I)=B(I)/PBAR
NEXT I

```

```

GOSUB 13600 'dZ
DSGI=0
DAP=0
FOR I=1 TO IN
  DSGI=DSGI-XX(I)*RGAS/PBAR
  FOR J=1 TO IN
    DAP1=(A(I)*DA(J)+A(J)*DA(I))/SQR(A(I)*A(J))*(M(I)*SQR(TK/ALF(I)/TC(I))+
M(J)*SQR(TK/ALF(J)/TC(J)))
    DAP=DAP+XX(I)*XX(J)*(1-KIJ(I,J))*DAP1/4
  NEXT J,I
  DHM=RGAS*TK*(DZZ-(AM+AP)*DELE/BM-ELE*(BM*(DAM+DAP)-(AM+AP)*DBM)/BM^2)
  GOTO 13600 'dFI
,
13400 '
'Derivada con respecto a Vaporizacion, d/dV
FOR I=1 TO IN
  DFI(I)=0
NEXT I
DHM=0
DSM=0
RETURN
,
13500 '
'dAM,dBM,dZZ,dELE
DAM=0
DBM=0
FOR I=1 TO IN
  DBM=DBM+XX(I)*DB(I)
  FOR J=1 TO IN
    DAM=DAM+XX(I)*XX(J)*(1-KIJ(I,J))*(A(I)*DA(J)+A(J)*DA(I))/2/SQR(A(I)*A(J)
))
  NEXT J,I
  DZZ=(DBM*(ZZ^2*(1-UU)+ZZ*(UU+2*UU*BM-2*WW*BM)+3*WW*BM^2+2*WW*BM+AM)+DAM*(BM-Z
Z))/(3*ZZ^2-2*ZZ*(1+BM-UU*BM)+AM+WW*BM^2-UU*BM^2-UU*BM)
  IF IEC=1 THEN
    DELE=(DZZ+DBM)/(ZZ+BM)-DZZ/ZZ
  ELSE
    DELE=(ZZ*DBM-BM*DZZ)/(ZZ+2.4142135624#*BM)/(ZZ-.4142135624#*BM)
  END IF
RETURN
,
13600 '
'dSM,dSUM,dGUS,dFI
DSM=DSGI+RGAS*((DZZ-DBM)/(ZZ-BM)-(BM*ELE*DAP+BM*AP*DELE-AP*ELE*DBM)/BM^2)
FOR I=1 TO IN
  DSUM=0
  FOR J=1 TO IN
    DSUM=DSUM+XX(J)*(1-KIJ(I,J))*(A(I)*DA(J)+A(J)*DA(I))/2/SQR(A(I)*A(J))
  NEXT J
  DGUS=(BM*DB(I)-B(I)*DBM)/BM^2-2*(AM*DSUM-SUM(I)*DAM)/AM^2
  DFI1=(BM*(ZZ-1)*DB(I)+BM*B(I)*DZZ-B(I)*(ZZ-1)*DBM)/BM^2-(DZZ-DBM)/(ZZ-BM)
  DFI2=(BM*GUS(I)*ELE*DAM+BM*AM*ELE*DGUS+BM*AM*GUS(I)*DELE-AM*GUS(I)*ELE*DBM
)/BM^2
  DFI(I)=FI(I)*(DFI1+DFI2)
NEXT I
RETURN

```

ZETAS.BAS

Esta subrutina calcula el factor de compresibilidad resolviendo la ecuación de estado cubica de manera analitica.

Tambien se incluye la opcion de extrapolar la raiz de Z en caso de que el valor obtenido para una fase no cumpla con los requisitos de estabilidad que son probados.

Esta subrutina se llama desde el calculo de propiedades en la subrutina PROPS.BAS.

```

14000 '
'Validez de Z:
  DEF FNBD(D)=1/(1-D)^2-ALFA*(2*D+UU*D^2)/(1+UU*D+WW*D^2)^2

  DMC=1/YMC
  ZMC=BM*YMC
  ALFA=AM/BM
'Calculo del discriminante
  LAMBDA=UU*BM-BH-1
  BETA=AM+WW*BM^2-UU*BM^2-UU*BM
  GAMMA=-WW*BM^3-WW*BM^2-AM*BM
  PP=3*BETA-LAMBDA^2
  QQ=(27*GAMMA-9*LAMBDA*BETA)/2+LAMBDA^3
  DISC=PP^3+QQ^2
  IF DISC<0 THEN
    PHI=-QQ/SQR(-PP^3)
    PHI=PPI/2-ATN(PHI/SQR(1-PHI^2))
    GOTO 14200
  END IF
  PP=PP/3
  QQ=QQ/13.5
  DISC=DISC/729
  EME=-QQ/2+SQR(DISC)
  EME=SGN(EME)*ABS(EME)^(1/3)
  ENE=-QQ/2-SQR(DISC)
  ENE=SGN(ENE)*ABS(ENE)^(1/3)
  ZZ=EME+ENE-LAMBDA/3
  DD=BM/ZZ
  ON IFASE GOTO 14130,14150
14130 IF FNBD(DD)<.1 OR ZZ>ZMC THEN GOSUB 14500 'Extrapolacion
  RETURN
14150 IF ALFA<AMC THEN RETURN ELSE IF ZZ>ZMC OR FNBD(DD)<.1 THEN GOSUB 14500 'Extrapolacion
  RETURN
14200 ON IFASE GOTO 14210,14260
14210 ZZ=2*SQR(-PP)*COS(PHI/3+2/3*PPI)/3-LAMBDA/3
  IF ZZ>BM THEN 14240
  ZZ=2*SQR(-PP)*COS(PHI/3)/3-LAMBDA/3
14240 DD=BM/ZZ
  IF ZZ>ZMC OR FNBD(DD)<.1 THEN GOSUB 14500 'Extrapolacion
  RETURN

```

```

14260 ZZ=2*SQR(-PP)*COS(PHI/3)/3-LAMBDA/3
      DD=BM/ZZ
      IF ZZ<ZMC OR FNBD(DD)<.1 THEN GOSUB 14500 'Extrapolacion
      RETURN
,
14500 '
'Extrapolacion
      IEXZ=1
      IF IFASE=1 THEN DEXT=.8 ELSE DEXT=.1
      JK=0
      DEXTO=10*DEXT
      WHILE ABS(1-DEXTO/DEXT)>.00001 AND JK<25
        DEXTO=DEXT
        IF IFASE=1 THEN
          IF DEXT>1 THEN DEXT=.8
        ELSE
          IF DEXT>1 THEN DEXT=.1
        END IF
        JK=JK+1
        DEXT=DEXT-(FNBD(DEXT)-.1)/(2/((1-DEXT)^3-2*ALFA*((1+UU*DEXT+WW*DEXT^2)*(1+U
U*DEXT)-(2*DEXT+UU*DEXT^2)*(UU+2*WW*DEXT)))/(1+UU*DEXT+WW*DEXT^2)^3)
      WEND
      IF DEXT<0 OR DEXT>1 OR JK=25 THEN DEXT=OMC
      EBD=FNBD(DEXT)
      BEXT=DEXT/(1-DEXT)-ALFA*DEXT^2/(1+UU*DEXT+WW*DEXT^2)
      ON IFASE GOTO 14610,14650
14610 'Liquido
      EC1=EBD*(DEXT-.7*DMC)
      ECO=BEXT-EC1*LOG(DEXT-.7*DMC)
      DD=EXP((BM-ECO)/EC1)+.7*DMC
      ZZ=BM/DD
      IF ZZ<BM THEN ZZ=1.01*BM
      RETURN
14650 'Vapor
      EC2=(-EBD*((DEXT+DMC)/2-DEXT)+BEXT)/(2*BEXT^2*DEXT*((DEXT+DMC)/2-DEXT)+BEXT^
2*(DEXT^2-((DEXT+DMC)/2)^2))
      EC1=-((EBD+EC2*2*BEXT^2*DEXT)/BEXT^2)
      ECO=1/BEXT-EC1*DEXT-EC2*DEXT^2
      DD=(-EC1-SQR(EC1^2-4*EC2*(ECO-1/BM)))/2/EC2
      ZZ=BM/DD
      IF ZZ<BM THEN ZZ=1.5*BM
      RETURN

```

UTIL.BAS

En esta subrutina se incluyen procedimientos generalizados para la entrada de datos, borrado parcial de la pantalla, conversion de unidades y paro provisional del programa.

Esta subrutina se llama desde muchas partes del programa.

```

9000 '
'Subrutina para la entrada de datos
FOR J=1 TO JMAX
  COLOR JC6,JC1
  LOCATE JREN+J,JC0L
  PRINT MID$(MENU$,1+JLONG*(J-1),JLONG);
  COLOR JC5,JC1
  LOCATE JREN+J,JC0L
  PRINT MID$(MENU$,1+JLONG*(J-1),1);
NEXT J
9060 GOSUB 9200
9065 K$=""
  WHILE K$=""
    K$=INKEY$
  WEND
  K%=ASC(K$)
  IF K%=13 THEN 9180 ELSE K%=VAL(K$)
  IF K%>=1 AND K%<=JMAX THEN
    GOSUB 9190
    JRESP=K%
    GOSUB 9200
    GOTO 9180
  END IF
  IF LEN(K$)=1 THEN 9065 ELSE K%=RIGHT$(K$,1)
  IF K$="H" THEN JRESP0=JRESP-1
  IF K$="P" THEN JRESP0=JRESP+1
  IF K$="G" THEN JRESP0=1
  IF K$="O" THEN JRESP0=JMAX
  IF JRESP0<1 THEN
    JRESP0=1
    BEEP
  END IF
  IF JRESP0>JMAX THEN
    JRESP0=JMAX
    BEEP
  END IF
  GOSUB 9190
  JRESP=JRESP0
  GOTO 9060
9180 COLOR JC10,JC1
  RETURN
9190 LOCATE JREN+JRESP,JC0L
  COLOR JC6,JC1
  PRINT MID$(MENU$,1+JLONG*(JRESP-1),JLONG);
  LOCATE JREN+JRESP,JC0L
  COLOR JC5,JC1

```

```

        PRINT MID$(MENU$,1+JLONG*(JRESP-1),1);
    RETURN
9200 LOCATE JREN+JRESP,JCOL
    COLOR JC8,JC9
    PRINT MID$(MENU$,1+JLONG*(JRESP-1),JLONG);
    LOCATE JREN+JRESP,JCOL
    COLOR JC7,JC9
    PRINT MID$(MENU$,1+JLONG*(JRESP-1),1);
    COLOR JC10,JC1
    RETURN
'
9500 '
'Subrutina para borrado de renglones
    COLOR JC10,JC1
    FOR J=1 TO JBORR
        LOCATE JREN+J,JCOL
        PRINT SPACE$(JLONG);
    NEXT J
    RETURN
9900 LOCATE JREN,1
    COLOR JC10,JC1
    PRINT SPACE$(79);
    RETURN
9950 LOCATE 25,37
    COLOR JC12,JCO
    PRINT"Para continuar presione cualquier tecla...";
    WHILE INKEY$=""
        WEND
    JREN=25
    GOSUB 9900 'Borra renglon
    RETURN
'
18000 '
'Subrutina para conversion de unidades
'Unidades del usuario a estandar
'Normalizar composiciones
    SZ1=0
    SZ2=0
    FOR I=1 TO IN
        ZU(I)=ZU(I)/SUM*FCX(IUX)
        SZ1=SZ1+ZU(I)*(MM(I)+IUX2*(1-MM(I)))
        SZ2=SZ2+ZU(I)*(1+IUX2*(1/MM(I)-1))
    NEXT I
    MMF=SZ1/SZ2
    FGM=FU/FCF(IUF)/(1+IUF2*(MMF-1))
    FOR I=1 TO IN
        Z(I)=ZU(I)/(1+IUX2*(MM(I)/MMF-1))/FCX(IUX)
    NEXT I
    RETURN
'
18500 '
'Unidades estandar a unidades del usuario
    DELTAH=HTM-HIN
    DELTAS=STM-SEN

```

```

DEX=EXTM-EXTIN
DELTA T=TK-TIN
DELTAP=PBAR-PIN
HIN=HTM
SEN=STM
EXTIN=EXTM
TIN=TK
PIN=PBAR
TU=TK*FCT1(IUT)-FCT2(IUT)
PU=PBAR*FCP(IUP)
HFU=HTM*FGM*FCQ(IUQ)
HLU=HTL*FGM*(1-V)*FCQ(IUQ)
HVU=HTV*FGM*V*FCQ(IUQ)
SFU=STM*FGM*FCQ(IUQ)/FCT1(IUT)
SLU=STL*FGM*(1-V)*FCQ(IUQ)/FCT1(IUT)
HVU=HTV*FGM*V*FCQ(IUQ)/FCT1(IUT)
EXFU=EXFM*FGM*FCQ(IUQ)
EXFLU=EXFL*FGM*(1-V)*FCQ(IUQ)
EXFVU=EXFV*FGM*V*FCQ(IUQ)
EXQU=EXQM*FGM*FCQ(IUQ)
EXQLU=EXQL*FGM*(1-V)*FCQ(IUQ)
EXQVU=EXQV*FGM*V*FCQ(IUQ)
XTU=EXTM*FGM*FCQ(IUQ)
EXTLU=EXTL*FGM*(1-V)*FCQ(IUQ)
EXTVU=EXTV*FGM*V*FCQ(IUQ)
IF IFLASH<6 OR IFLASH>7 THEN VU=V*FCX(IUX)*(1+IUX2*(MMV/MMF-1))
FU=FGM*FCF(IUF)*(1+IUF2*(MMF-1))
VUIN=VU
FLU=FGM*(1-V)*FCF(IUF)*(1+IUF2*(MML-1))
FVU=FGM*V*FCF(IUF)*(1+IUF2*(MMV-1))
QU=QJ*FCQ(IUQ)
DELTAHU=DELTAH*FCQ(IUQ)*FGM
WU=WJ*FCQ(IUM)
DELTASU=DELTAS*FCQ(IUQ)/FCT1(IUT)*FGM
DEXU=DEX*FGM*FCQ(IUQ)
DELTATU=DELTA T*FCT1(IUT)
DELTAPU=DELTAP*FCP(IUP)
SUM=0
SX=0
SY=0
FOR I=1 TO IN
  ZU(I)=Z(I)*(1+IUX2*(MM(I)/MMF-1))*FCX(IUX)
  SUM=SUM+ZU(I)
  XU(I)=X(I)*(1+IUX2*(MM(I)/MML-1))*FCX(IUX)
  SX=SX+XU(I)
  YU(I)=Y(I)*(1+IUX2*(MM(I)/MMV-1))*FCX(IUX)
  SY=SY+YU(I)
NEXT I
RETURN

```

IMPRES.BAS

Esta subrutina presenta los resultados en varias pantallas para facilitar su lectura. También controla la impresión en papel en caso de haber sido requerida por el usuario.

Esta subrutina se llama después de la ejecución del cálculo de propiedades, y antes de regresar al menú principal.

```

8000 '
'Impresion de k's
COLOR JC10,JC1
PRINT " KT = ";
COLOR JC11,JC1
PRINT DELTATU;
COLOR JC10,JC1
PRINT " ";UT$(IUT)
PRINT " KP = ";
COLOR JC11,JC1
PRINT DELTAPU;
COLOR JC10,JC1
PRINT " ";UP$(IUP)
PRINT " KH = ";
COLOR JC11,JC1
PRINT DELTAHU;
COLOR JC10,JC1
PRINT " ";UQ$(IUQ)
PRINT " KS = ";
COLOR JC11,JC1
PRINT DELTASU;
COLOR JC10,JC1
PRINT " ";UQ$(IUQ);UT$(IUT)
PRINT " KEx = ";
COLOR JC11,JC1
PRINT DEXU;
COLOR JC10,JC1
PRINT " ";UQ$(IUQ)
IF JPRINT=1 THEN
'd's a impresora
LPRINT
LPRINT " dT = ";DELTATU;RIGHT$(UT$(IUT),1)
LPRINT " dP = ";DELTAPU;UP$(IUP)
LPRINT " dH = ";DELTAHU;UQ$(IUQ)
LPRINT " dS = ";DELTASU;UQ$(IUQ);UT$(IUT)
LPRINT " dEx = ";DEXU;UQ$(IUQ)
END IF
GOSUB 9950 'Pausa
8120 JREN=3
JCOL=1
JLONG=80
JBORR=14
GOSUB 9500 'Borrado
'Impresion de corrientes
IF JFASE>1 AND JFASE<5 THEN IPRINT=1 ELSE IPRINT=0

```

```

IF IEXZL=1 AND JFASE<5 THEN EXL$=" (LIQUIDO EXTRAPOLADO)" ELSE EXL$=""
IF IEXZV=1 AND JFASE>1 THEN EXV$=" (VAPOR EXTRAPOLADO)" ELSE EXV$=""
LOCATE 4,1
COLOR JC4,JC1
PRINT FASE$(JFASE);
COLOR JC12,JC0
PRINT EXL$;EXV$
LOCATE 5,1
COLOR JC10,JC1
PRINT "T =";
COLOR JC11,JC1
PRINT USING "####.##### ";TU;
COLOR JC10,JC1
PRINT UT$(IUT)
LOCATE 6,1
PRINT "P =";
COLOR JC11,JC1
PRINT USING "####.##### ";PU;
COLOR JC10,JC1
PRINT UP$(IUP)
LOCATE 6,35
COLOR JC4,JC1
PRINT "CORRIENTE"
IF IPRINT=1 THEN
  LOCATE 6,53
  PRINT "LIQUIDO"
  LOCATE 6,70
  PRINT "VAPOR"
END IF
LOCATE 7,35
COLOR JC2,JC1
PRINT STRING$(9,196)
IF IPRINT=1 THEN
  LOCATE 7,53
  PRINT STRING$(7,196)
  LOCATE 7,70
  PRINT STRING$(5,196)
END IF
U$="+#.#####"
LOCATE 8,1
COLOR JC10,JC1
PRINT "FLUJO [";UF$(IUF);"] ="
LOCATE 8,32
COLOR JC11,JC1
PRINT USING U$;FU
IF IPRINT=1 THEN
  LOCATE 8,49
  PRINT USING U$;FLU
  LOCATE 8,65
  PRINT USING U$;FVU
END IF
LOCATE 9,1
COLOR JC10,JC1
PRINT "Ex total [";UQ$(IUQ);"] ="
LOCATE 9,32
COLOR JC11,JC1

```

```

PRINT USING U$;EXTU
IF IPRINT=1 THEN
  LOCATE 9,49
  PRINT USING U$;EXTLU
  LOCATE 9,65
  PRINT USING U$;EXTVU
END IF
LOCATE 10,1
COLOR JC10,JC1
PRINT "Ex fisica [";UQ$(IUQ);"] ="
LOCATE 10,32
COLOR JC11,JC1
PRINT USING U$;EXFU
IF IPRINT=1 THEN
  LOCATE 10,49
  PRINT USING U$;EXFLU
  LOCATE 10,65
  PRINT USING U$;EXFVU
END IF
LOCATE 11,1
COLOR JC10,JC1
PRINT "Ex quimica [";UQ$(IUQ);"] ="
LOCATE 11,32
COLOR JC11,JC1
PRINT USING U$;EXQU
IF IPRINT=1 THEN
  LOCATE 11,49
  PRINT USING U$;EXQLU
  LOCATE 11,65
  PRINT USING U$;EXQVU
END IF
LOCATE 12,1
COLOR JC10,JC1
PRINT "H [";UQ$(IUQ);"] ="
LOCATE 12,32
COLOR JC11,JC1
PRINT USING U$;HFU
IF IPRINT=1 THEN
  LOCATE 12,49
  PRINT USING U$;HLU
  LOCATE 12,65
  PRINT USING U$;HVVU
END IF
LOCATE 13,1
COLOR JC10,JC1
PRINT "S [";UQ$(IUQ);UT$(IUT);"] ="
LOCATE 13,32
COLOR JC11,JC1
PRINT USING U$;SFU
IF IPRINT=1 THEN
  LOCATE 13,49
  PRINT USING U$;SLU
  LOCATE 13,65
  PRINT USING U$;SVU
END IF
LOCATE 14,1

```

```

COLOR JC10,JC1
PRINT"Factor de compresibilidad: Z =";
COLOR JC11,JC1
IF JFASE=1 THEN
  LOCATE 14,32
  PRINT USING U$;ZL
END IF
IF JFASE=5 THEN
  LOCATE 14,32
  PRINT USING U$;ZV
END IF
IF IPRINT=1 THEN
  LOCATE 14,49
  PRINT USING U$;ZL
  LOCATE 14,65
  PRINT USING U$;ZV
END IF
U$="###.#####"
JREN=15
I=0
LOCATE 15,1
COLOR JC4,JC1
PRINT "COMPOSICIONES ";
COLOR JC10,JC1
PRINT "[";UX$(IUX);"] :";
8290 WHILE I<IN AND JREN<22
  JREN=JREN+1
  I=I+1
  LOCATE JREN,1
  COLOR JC5,JC1
  PRINT I;
  COLOR JC10,JC1
  PRINT NOMB$(I)
  LOCATE JREN,32
  COLOR JC11,JC1
  PRINT USING U$;ZU(I)
  IF IPRINT=1 THEN
    LOCATE JREN,49
    PRINT USING U$;XU(I)
    LOCATE JREN,65
    PRINT USING U$;YU(I)
  END IF
WEND
IF I<IN THEN
  GOSUB 9950 'Pausa
  JREN=7
  JCOL=1
  JLONG=80
  JBORR=15
  GOSUB 9500 'Borrado
  GOTO 8290
END IF
JREN=JREN+1
LOCATE JREN,32
COLOR JC2,JC1
PRINT STRING$(15,196)

```

```

IF IPRINT=1 THEN
  LOCATE JREN,49
  PRINT STRING$(15,196)
  LOCATE JREN,65
  PRINT STRING$(15,196)
END IF
JREN=JREN+1
LOCATE JREN,32
COLOR JC11,JC1
PRINT USING U$;SUM
IF IPRINT=1 THEN
  LOCATE JREN,49
  PRINT USING U$;SX
  LOCATE JREN,65
  PRINT USING U$;SY
END IF
IF JPRINT=1 THEN
  'Corrintes a impresora
  LPRINT
  LPRINT " No. iter = ";ITER;TAB(40);"Funcion objetivo = ";
  LPRINT USING "+#.#####";FUN
  LPRINT
  LPRINT FASE$(JFASE);EXL$;EXV$
  LPRINT "T =";
  LPRINT USING "#####";TU;
  LPRINT RIGHT$(UT$(IUT),1)
  LPRINT "P =";
  LPRINT USING "#####";PU;
  LPRINT UP$(IUP)
  LPRINT;TAB(35);"CORRIENTE";
  IF IPRINT=1 THEN LPRINT;TAB(53);"LIQUIDO";TAB(70);"VAPOR" ELSE LPRINT
  LPRINT;TAB(35);STRING$(9,"-");
  IF IPRINT=1 THEN LPRINT;TAB(53);STRING$(7,"-");TAB(70);STRING$(5,"-") ELSE
LPRINT
  U$="+#.#####"
  LPRINT "FLUJO [";UF$(IUF);"] =";TAB(32);
  LPRINT USING U$;FU;
  IF IPRINT=1 THEN
    LPRINT;TAB(49);
    LPRINT USING U$;FLU;
    LPRINT;TAB(65);
    LPRINT USING U$;FVU
  ELSE
    LPRINT
  END IF
  LPRINT "Ex total [";UQ$(IUQ);"] =";TAB(32);
  LPRINT USING U$;EXTU;
  IF IPRINT=1 THEN
    LPRINT;TAB(49);
    LPRINT USING U$;EXTLU;
    LPRINT;TAB(65);
    LPRINT USING U$;EXTVU
  ELSE
    LPRINT
  END IF
  LPRINT "Ex fisica [";UQ$(IUQ);"] =";TAB(32);
  LPRINT USING U$;EXFU;

```

```

IF IPRINT=1 THEN
  LPRINT;TAB(49);
  LPRINT USING U$;EXFLU;
  LPRINT;TAB(65);
  LPRINT USING U$;EXFVU
ELSE
  LPRINT
END IF
LPRINT "Ex química [";UQ$(IUQ);"] =";TAB(32);
LPRINT USING U$;EXQU;
IF IPRINT=1 THEN
  LPRINT;TAB(49);
  LPRINT USING U$;EXQLU;
  LPRINT;TAB(65);
  LPRINT USING U$;EXQVU
ELSE
  LPRINT
END IF
LPRINT "H [";UQ$(IUQ);"] =";TAB(32);
LPRINT USING U$;HFU;
IF IPRINT=1 THEN
  LPRINT;TAB(49);
  LPRINT USING U$;HLU;
  LPRINT;TAB(65);
  LPRINT USING U$;HVV
ELSE
  LPRINT
END IF
LPRINT "S [";UQ$(IUQ);RIGHT$(UT$(IUT),1);"] =";TAB(32);
LPRINT USING U$;SFU;
IF IPRINT=1 THEN
  LPRINT;TAB(49);
  LPRINT USING U$;SLU;
  LPRINT;TAB(65);
  LPRINT USING U$;SVU
ELSE
  LPRINT
END IF
LPRINT"Factor de compresibilidad: Z =";
IF JFASE=1 THEN
  LPRINT;TAB(32);
  LPRINT USING U$;ZL
END IF
IF JFASE=5 THEN
  LPRINT;TAB(32);
  LPRINT USING U$;ZV
END IF
IF IPRINT=1 THEN
  LPRINT;TAB(49);
  LPRINT USING U$;ZL;
  LPRINT;TAB(65);
  LPRINT USING U$;ZV
END IF
U$="###.#####"
LPRINT
LPRINT "COMPOSICIONES [";UX$(IUX);"] : "

```

```

FOR I=1 TO IN
  LPRINT I;NOMB$(I);TAB(32);
  LPRINT USING U$;ZU(I);
  IF IPRINT=1 THEN
    LPRINT;TAB(49);
    LPRINT USING U$;XU(I);
    LPRINT;TAB(65);
    LPRINT USING U$;YU(I)
  ELSE
    LPRINT
  END IF
NEXT I
LPRINT;TAB(32);STRING$(15,"-");
IF IPRINT=1 THEN
  LPRINT;TAB(49);STRING$(15,"-");TAB(65);STRING$(15,"-")
ELSE
  LPRINT
END IF
LPRINT;TAB(32);
LPRINT USING U$;SUM;
IF IPRINT=1 THEN
  LPRINT;TAB(49);
  LPRINT USING U$;SX;
  LPRINT;TAB(65);
  LPRINT USING U$;SY
ELSE
  LPRINT
END IF
LPRINT
LPRINT
LPRINT
END IF
GOSUB 9950 'Pausa
JREN=3
JCOL=1
JLONG=80
JBORR=20
GOSUB 9500 'Borrado
RETURN

```