

---

FACULTAD DE QUIMICA

**Diseño de un Sistema para la Predicción de  
Propiedades Termodinámicas y de Transporte  
Mediante Computadora**

**T E S I S**

Que para obtener el título de:

**INGENIERO QUIMICO**

p r e s e n t a :

**2. JULIO A. LOPERENA ZUNIGA**

**1. OCTAVIO OTERO VOLLRATH**



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



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

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

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

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

Tesis  
LAB                       
ABO                       
FECHA Mar 16/66  
PROC 1974



QUIMICA

A ella, mi madre:

Sra. Guadalupe Vollrath de Otero.

Con respeto y cariño por haberme dedicado muchos años de su vida, anhelando ver realizados mis estudios profesionales.

A mis padres:

Que lo merecen,

Con gratitud y cariño.

A mis hermanos.

# I N D I C E

---

	Página
I N T R O D U C C I O N	1
C A P I T U L O I	
PERFILES PARA LA CONSTRUCCION DE UN SISTEMA RACIONAL DE ESTIMACION DE PROPIEDADES.	7
1.- Bases para el Diseño del Sistema.	7
1.a.- Primera Versión.	7
1.b.- Segunda Versión.	10
2.- El Problema del Cálculo de Propiedades de los Fluidos.	11
3.- Antecedentes.	14
4.- Ventajas del Empleo de una Máquina Computadora.	16
C A P I T U L O II	
DESCRIPCION DE LAS TECNICAS APLICADAS.	
1.- Introducción.	22
2.- Estado Crítico.	22
3.- Factor Acéntrico.	23
4.- Introducción a las Ecuaciones de Estado.	24
5.- Estados Correspondientes.	26
6.- Propiedades Contenidas por el Sistema.	27
6.a.- Capacidad Calorífica.	27
6.b.- Entalpia.	34

6.c.- Densidad.	43
6.d.- Calor Latente de Vaporización.	58
6.e.- Presión de Vapor.	60
6.f.- Tensión Superficial.	63
6.g.- Viscosidad.	65
6.h.- Conductividad Térmica.	79
6.i.- Coeficiente de Difusión.	92

## C A P I T U L O III

### DETALLES DE LA ESTRUCTURA DEL SISTEMA.

1.- Introducción.	101
2.- Capacidades del Sistema.	102
3.- Estructura Modular.	103
4.- Programa Principal.	105
5.- Ejemplo del Procedimiento que sigue la Computadora para Evaluar Cierta Propiedad.	110
6.- Subrutinas que Efectúan la Estimación de Propiedades.	111
6.a.- Calor Latente de Vaporización.	111
6.b.- Capacidad Calorífica (Puros).	114
6.c.- Capacidad Calorífica (Mezclas).	117
6.d.- Conductividad Térmica (Puros).	120
6.e.- Conductividad Térmica (Mezclas).	124
6.f.- Densidad (Puros).	128
6.g.- Densidad (Mezclas).	131
6.h.- Coeficientes de Difusión de Sistemas Binarios.	136
6.i.- Coeficientes de Difusión de Sistemas de Multicomponentes Gaseosos.	140
6.j.- Entalpia. (Puros).	143
6.k.- Entalpia. (Mezclas).	149
6.l.- Factor de Compresibilidad.	155
6.m.- Presión de Vapor.	161
6.n.- Tensión Superficial.	164
6.o.- Viscosidad (Puros).	167
6.p.- Viscosidad (Mezclas).	171
7.- Subrutinas Auxiliares.	175
7.a.- Selección de la Clave.	175
7.b.- Cambio de Unidades.	175
7.c.- Subrutina ERROR.	181
7.d.- Subrutina SELECP.	183
7.e.- Subrutina SELECM.	187
7.f.- Subrutina TABLA.	190
7.g.- Subrutina TABLAM.	195
7.h.- Subrutina GRAFIC.	200
7.i.- Subrutina GRAFIM.	208

8.- Banco de Datos.	214
9.- Como hacer Modificaciones al Sistema.	224

## C A P I T U L O IV

### ESTRUCTURA DE DATOS Y RESULTADOS.

1.- Generalidades.	230
2.- Compuestos Puros.	230
2.a.- Nomenclatura.	230
2.b.- A una Presión y Temperatura Dadas.	233
2.c.- Generación de Tablas por Variación de Presión y Temperatura.	238
2.d.- Generación de Gráficas por Variación de Presión y Temperatura.	250
3.- Mezclas.	252
3.a.- A una Presión y Temperatura Dadas.	255
3.b.- Generación de Tablas por Variación de Temperaturas.	258
3.c.- Generación de Tablas por Variación de Presión.	263
3.d.- Generación de Gráficas por Variación de Presión y Temperatura.	269

### RECOMENDACIONES Y

CONCLUSIONES	275
--------------	-----

A P E N D I C E	I-A	280
A P E N D I C E	I-B	282
A P E N D I C E	II-A	283
A P E N D I C E	II-B	287
A P E N D I C E	II-C	288
A P E N D I C E	II-D	290
A P E N D I C E	II-E	293
A P E N D I C E	II-F	294
A P E N D I C E	II-G	295
A P E N D I C E	II-H	298
A P E N D I C E	II-I	300
A P E N D I C E	II-J	301
A P E N D I C E	II-K	302

BIBLIOGRAFIA	305
--------------	-----



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

La información acerca de las propiedades de los materiales es -- esencial en la planeación y diseño de nuevos procesos, por tanto es de vital importancia que el Ingeniero Químico disponga de las bases necesarias para el desempeño de tales actividades.

Una enorme cantidad de dichos datos ha sido recopilada y ordenada a través de los años, pero el rápido avance de la tecnología en nuevos campos parece siempre mantener un adelanto entre la demanda de datos básicos y su determinación experimental.

En la literatura se ha presentado un gran número de métodos para la estimación de propiedades físicas de los materiales, éstos han sido sujeto de una revisión crítica por parte de diversos autores acerca de los diferentes procedimientos de cálculo para un determinado número de propiedades de gases y líquidos tales como las constantes críticas, propiedades P-V-T y termodinámicas, presión de vapor, calor latente de vaporización, calor de formación, energía libre, calor específico, tensión superficial, viscosidad, conductividad térmica y coeficientes de difusión. En estos --

trabajos se llevan a cabo con mucha frecuencia comparaciones entre los valores experimentales y los estimados en forma de tablas con el fin de hacer notar el grado de confiabilidad de los métodos discutidos, y como resultado se formulan recomendaciones de las mejores correlaciones para cada propiedad, haciendo la extrapolación de datos.

En vista de lo antes mencionado, resalta la necesidad de elaborar un sistema de cálculo preciso, rápido y de alto grado de confiabilidad que proporcione toda aquella información de datos físicos en especial lo referente a la evaluación de las propiedades inherentes a los fluidos que son necesarios para el ingeniero en la resolución de sus problemas de diseño debido a que el costo y la seguridad del equipo que se instale son función directa de éstos y, si no cuenta con los mismos tiene que recurrir a la literatura disponible, ahí se encontrará frente a las varias alternativas que le presentan los diferentes métodos de estimación como lo son, en primer término, el empleo de ecuaciones que por su origen pueden ser empíricas o deducidas en función de conceptos teóricos, también consultará tablas y gráficas para lo cual en muchos casos necesita disponer de información adicional; de las expresiones matemáticas las más precisas además de complejas requieren de cierto número de constantes cuya búsqueda consume tiempo extra del que no se puede disponer en muchas circunstancias, ante este inconveniente el único camino es recurrir al uso de ecuaciones más simples pero de dudosa precisión.

Consecuentemente, nos avocamos a la tarea de diseñar un sistema capaz de manipular una gran cantidad de información para ser aplicada a correlaciones de mucha o poca complejidad que proporcionen resultados más acordes con la realidad, que minimice el tiempo de cálculo y la información que se le ha de suministrar, la forma de lograr estos propósitos es por medio del uso de una computadora digital. Así, este sistema se desarrolló para emplearse en la computadora Burroughs B-6700 localizada en el Centro de Servicios de Cómputo de la U.N.A.M., pudiéndose adaptar a otros sistemas operativos de procesamiento de datos mediante pequeñas variantes-

ya que el lenguaje de programación utilizado es FORTRAN-IV comúnmente tratado en la rama técnica y aceptado por cualquier tipo de computador.

A fin de iniciar el trabajo recopilamos de la literatura existente lo referente a evaluación de propiedades físicas y termodinámicas mediante computadora (2,3,4,5); como punto de partida se proyectó una primera versión que nos serviría para proporcionarnos la experiencia necesaria para posteriormente obtener la completa estructuración del mismo.

Se enfocó la primera etapa al uso de los alumnos e investigadores de la Facultad de Química, hacia quienes estaría dirigida y en función de lo cual formulamos nuestro plan de trabajo, se incluyeron los compuestos y propiedades considerados en estudios precedentes que por su continuo manejo y aplicación en la práctica por parte del personal docente y alumnos debían ser incluidos en nuestro trabajo. Fijados los alcances del sistema se comenzó a estructurar éste con el propósito de ponerlo a disposición del usuario a fin de que nos reportara las fallas encontradas e hiciera las sugerencias pertinentes.

A continuación procedimos a desarrollar una segunda y última versión consistente en el aumento del número de propiedades, sustitución de algunas correlaciones, implementación de tablas y gráficas e implantación de métodos para evaluar las propiedades de las mezclas.

Una vez comprobado el funcionamiento correcto del sistema, quedará a disposición de todo interesado quien puede estar o no relacionado con la Facultad de Química y sujeto al tipo de modificaciones tales como los son: Aumento de propiedades y compuestos, actualización por lo que respecta a correlaciones, adición de constantes, etc.

De entre las grandes ventajas que proporciona el sistema, una de las más importantes es que el usuario no necesita conocer el lenguaje FORTRAN-IV, sino únicamente saber perforar un mínimo de tarjetas de datos lo cual extiende su aplicabilidad. Se proyecta elaborar un pequeño manual

en el que se especificará claramente el procedimiento que debe seguirse para utilizar con eficacia el programa. Su versatilidad aumentará al tenerlo disponible en estaciones remotas de teleproceso (teletipos), ayudando, por consiguiente, a Centros de Investigación que estén distantes de la --- U.N.A.M.

# C A P I T U L O I

---

Perfiles para la Construcción de un Sistema Racional de Estimación de Propiedades.

1.1.- Bases para el diseño del sistema.-

1.2.- El Problema del cálculo de propiedades de los fluidos.-

1.3.- Antecedentes.-

1.4.- Ventajas del empleo de una máquina Computadora.-

Nuestra primordial intención en la elaboración del sistema es la de que tenga un sentido netamente práctico, utilizable en muchos aspectos y sobre todo que cubra las necesidades de un importante sector de las personas relacionadas con la química aplicada.

Este asunto ha sido abordado en varios sitios entre los que se cuentan Universidades, Institutos, empresas industriales, etc., su éxito ha sido rotundo. Se ha puesto a la disposición de la gente que desee utilizarlos y en muchos casos se ha comercializado; su elaboración consume tiempo y en la etapa de pruebas cuando se hace intenso uso de la computadora los gastos son enormes, para apreciar más las dimensiones del trabajo desarrollado por esas instituciones, mencionamos el caso del sistema elaborado por el AIChE (Instituto Americano de Ingenieros Químicos), APPES, su costo fue de \$225,000 dólares durante los 2 años que tardó su estructuración, consta de 122 métodos de estimación, evalúa las propiedades de compuestos puros y mezclas y tiene la capacidad de escoger automáticamente la ruta del mínimo error seleccionando las mejores técnicas aplicables a cada caso en particular. Pero aún este extenso programa no está totalmente completo, por ejemplo, carece de un amplio banco de datos y de la habilidad de calcular las propiedades de equilibrio gas-líquido; sin embargo es de los más ambiciosos sistemas que se han hecho.

Por nuestra parte, a fin de iniciar el trabajo, se llevó a cabo la elaboración de una versión de prueba sencilla fundada en las siguientes bases:

## 1.1.- BASES PARA EL DISEÑO DEL SISTEMA

### a.- PRIMERA VERSION.

Se buscó que satisficiera adecuadamente los siguientes puntos:

1.- Fuera utilizable para los alumnos, profesores e investigadores de la Facultad de Química. Para los primeros es una herramienta en la resolución de sus problemas de balances de materia y energía, y en asignaturas como: Físicoquímica, Ingeniería Química, Diseño de Equipo, Química--Orgánica, Fenómenos de Transporte, etc. A los segundos, como utensilio para desarrollar problemas, formular ejemplos o como ayuda para ilustrar el aspecto teórico de su cátedra. En cuanto a los últimos, cuyo trabajo es de experimentación pueden consultarlo con el propósito de comparar y tener un punto de referencia con qué verificar sus resultados experimentales.

2.- Que contuviera compuestos usuales.- Al respecto, nos concretamos a seleccionar de las listas de compuestos presentadas en trabajos -- precedentes al nuestro aquellos cuyo empleo es notorio entre el personal -- ya mencionado; de esta manera fueron escogidos 55 de ellos:

ACETALDEHIDO	CLORO	MONOXIDO DE CARBONO
ACETILENO	CLOROBENCENO	NITROGENO
ACETONA	CLOROFORMO	N-OCTANO
ACIDO ACETICO	CLORURO DE HIDROGENO	OXIDO DE ETILENO
AIRE	DIOXIDO DE AZUFRE	OXIDO NITROSO
AMONIACO	DIOXIDO DE NITROGENO	OXIGENO
ANILINA	DISULFURO DE CARBONO	N-PENTANO
ARGON	N-DODECANO	PROPANO
BENCENO	ESTIRENO	PROPANOL
BIOXIDO DE CARBONO	ETANO	PROPILENO
BROMO	ETANOL	SULFURO DE HIDROGENO
I-3 BUTADIENO	ETER ETILICO	TETRACLORURO DE CARBONO
N-BUTANO	ETILENO	TOLUENO

ISOBUTANO	FORMALDEHIDO	TRIOXIDO DE AZUFRE
N-BUTANOL	N-HEXANO	O-XILENO
ISOBUTANOL	N-HEPTANO	M-XILENO
I-BUTENO	HIDROGENO	P-XILENO
CICLOHEXANO	METANO	
CICLOPENTANO	METANOL	

Como se puede notar, se excluyeron compuestos tan importantes como el agua, ácido sulfúrico, ácido nítrico, etc., debido a que su comportamiento es muy especial y se aleja de la generalidad. De los seleccionados se dispone de bastante información referente a sus constantes físicas, así como de datos experimentales para comprobar la eficiencia de los cálculos efectuados por el sistema.

3.- Tomará en cuenta las propiedades más comunes.- De igual forma que en el punto anterior se incluyeron aquellas propiedades que además de ser muy comunes contenían un gran número de parámetros semejantes.

De esta forma, se escogieron seis, a saber:

DENSIDAD  
 ENTALPIA  
 CAPACIDAD CALORIFICA  
 VISCOSIDAD  
 CONDUCTIVIDAD TERMICA  
 CALOR LATENTE DE VAPORIZACION

Haciendo la aclaración de que dichas propiedades únicamente se aplican a compuestos puros y a presión atmosférica.

Estas son de capital importancia en el diseño de los equipos esenciales para el desarrollo de la industria química, dentro de los cuales se pueden mencionar: Cambiadores de calor, torres de destilación, reactores químicos, etc. cuyas dimensiones son expresadas en función de los nú



meros adimensionales, tal es el caso de: REYNOLDS, NUSSELT, PRANDTL, ---- SHERWOOD, SCHMIDT, GRASHOFF, GRAETZ, LEWIS, WEBER, STANTON, EULER, PECLET, etc., y que se definen como:

$$R_e = \frac{D v \rho}{\mu}$$

$$S_c = \frac{\mu}{\rho^2 D}$$

$$W_e = \frac{\rho v^2 L}{\sigma}$$

$$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$$

$$Gr = \frac{\beta g \rho^2 L^3 \Delta T}{\mu}$$

$$St = \frac{h}{C_p v \rho}$$

$$Nu = \frac{h D}{k}$$

$$Gz = \frac{w C_p}{k L}$$

$$Eu = \frac{F / t^2}{\rho v^2}$$

$$Sh = \frac{k_c D}{D}$$

$$Lw = \frac{S_c}{P_r}$$

$$Pe = \frac{L v}{D}$$

4.- Presentará las correlaciones apropiadas para ser procesadas en lenguaje FORTRAN-IV y que tuvieran un mínimo de error según recomienda la literatura, además que mantuvieran su similitud referente a los parámetros constantes los cuales serían almacenados en un archivo de datos ---- (BLOCK DATA) que contiene, entre otros valores: Propiedades críticas, temperatura normal de ebullición, peso molecular, constantes de la capacidad calorífica, factor de compresibilidad crítico, etc.

5.- Que pudiera contarse con un sistema de procesamiento con fácil acceso por parte del usuario, en este sentido se dispuso de la computadora Burroughs B-6700 del Centro de Servicios de Cómputo.

Habiendo definido los alcances y fundamentos del sistema nos dedicamos a recopilar las constantes físicas, limitaciones de las fórmulas, en cuanto al tipo de compuestos aplicables y, a determinar sus intervalos de validez a las diferentes condiciones de trabajo, finalmente nos avoca--

mos a la programación.

#### b.- SEGUNDA VERSION.

Como continuación lógica al término de la primera etapa de nuestro programa iniciamos la parte final que consistió principalmente en una ampliación en cuanto a:

1.- Adición de propiedades, llevándose a cabo una minuciosa verificación de las correlaciones, originándose tablas con el objeto de comparar los valores obtenidos contra datos experimentales y desplazar aquéllos que carecieran de una precisión razonable o cuyos intervalos de aplicación fueran demasiado reducidos, sustituyéndolos por las más convenientes que nos reporta la literatura sin darle ya demasiada importancia al número de parámetros necesarios algunos de los cuales fueron obtenidos a partir de datos experimentales mediante la elaboración de pequeños programas, otros se seleccionaron directamente de las fuentes normales de información. Las propiedades añadidas son: Presión de vapor y tensión superficial.

2.- La inclusión del cálculo de las propiedades de las mezclas.- Es sabido que en la práctica a menudo no se manejan compuestos puros sino mezclas de ellos, tenemos el caso de la destilación de hidrocarburos. En esta opción se introdujeron las siguientes propiedades: DENSIDAD, CAPACIDAD CALORIFICA, ENTALPIA, VISCOSIDAD, CONDUCTIVIDAD TERMICA Y DIFUSION.

3.- La implementación de subprogramas para la generación de tablas, de esta manera pueden obtenerse valores numéricos para apreciar el comportamiento de un compuesto o mezcla a través de variaciones de temperatura o presión.

4.- Elaboración de gráficas.- Es otra capacidad del sistema mediante la que el usuario puede lograr una visualización inmediata de la conducta del compuesto o mezcla de los mismos al variar las condiciones de presión y temperatura.

## 1.2.- EL PROBLEMA DEL CALCULO DE PROPIEDADES DE LOS FLUIDOS

La dificultad que existe en la evaluación de propiedades radica primordialmente en los diferentes comportamientos que sufre un compuesto al variar sus condiciones de operación, como son: Temperatura, concentración y presión, así como la estructura molecular, tipos de enlace, polaridad y todas aquellas características particulares que definen a cada compuesto determinarán en un momento dado la forma de la ecuación aplicable, así como las limitaciones que trae consigo dicha correlación.

Con el desarrollo y crecimiento de los procesos industriales se ha incrementado la necesidad de contar con la información acerca de las propiedades de gases y líquidos tratados por un equipo, incluyendo las de nuevas sustancias químicas cuyas características físicas no han sido determinadas experimentalmente por lo que se hace necesario acudir a los métodos matemáticos para allegarse a dicha información. Las predicciones se basan usualmente en relaciones analíticas de la información conocida que puede ser interpolada o extrapolada según se requiera.

Es interesante hacer notar, sin embargo, que aún en la actualidad muchos de los nuevos métodos son todavía completamente empíricos. La rigurosa aproximación de los cálculos de propiedades físicas es todavía poco confiable ya que las leyes fundamentales que describen las fuerzas entre las moléculas no son claramente establecidas y aún si lo fueran los requerimientos matemáticos para una solución adecuada son casi inmanejables.

Dichas correlaciones se pueden dividir primeramente en:

a) Puramente empíricas; b) Parcialmente empíricas, pero basadas en conceptos teóricos, y c) Puramente teóricas.

Las primeras frecuentemente carecen de confianza y de valor, las últimas son raramente desarrolladas en forma adecuada.

Muchas de las correlaciones útiles son, por un lado, recomenda--

das por la teoría, pero por otra parte están ajustadas por constantes empíricas basadas en datos experimentales. Generalmente están fundadas en --- fragmentos de teoría, por ejemplo, el calor latente de vaporización (expresado en calorías/gramo) varía ampliamente. La simple teoría molecular proporciona el concepto cualitativo de que el calor latente es la energía requerida para separar las moléculas del líquido y hacer el trabajo de expansión del vapor. Se dice que el calor latente dependerá más del número de moléculas que de la masa de la sustancia, entonces dicho calor molar se espera que debe ser constante. Datos experimentales indican que tal constante se encuentra muy cercana a 8,000, y la regla es que el calor latente molar de vaporización es de 8,000 cal/g-mol a la temperatura del punto normal de ebullición. Tomándose como válido una variación de más o menos el 20% para numerosas sustancias.

En muchas ocasiones una teoría simple la que es sólo aproximadamente correcta puede convertirse en una correlación útil si las desviaciones de la idealidad son tratadas empíricamente, dentro de este caso está catalogada la ley del gas ideal, la que es válida a baja presión pero que representa pobremente los datos P-V-T de los gases reales a altas presiones, sin embargo, se obtienen buenas correlaciones por el tratamiento empírico del factor de compresibilidad, Z, definido como  $Z = PV/RT$  que puede ser considerado como un factor de corrección en la ley del gas ideal. A su vez, Z está basado en correlaciones empíricas determinadas por un concepto teórico inexacto: el de los Estados Correspondientes.

Este ejemplo ilustra un poderoso método para el desarrollo de -- ecuaciones con datos físicos como base para hacer predicciones.

Las expresiones analíticas para la predicción de propiedades en cuanto a su campo de acción pueden dividirse en:

a) Correlaciones de tipo general.- Estas comprenden un gran número de compuestos, se aplican en condiciones normales de operación y pueden

producir grandes errores (desviaciones) al efectuar extrapolaciones a valores extremos de presión y temperatura.

b) Por otro lado, cuando las condiciones se apartan de los límites normales, como es el caso de las regiones cercanas al punto crítico en donde las ecuaciones simples producen errores importantes se tiene la necesidad de recurrir a correlaciones más específicas que tratan de ser generales, con frecuencia son más sofisticadas y ajustan con éxito los valores experimentales en intervalos de presión y temperatura extensos; dentro de este tipo tenemos las ecuaciones de estado de Benedict-Webb-Rubin (B-W-R), Martin-Hou, Hirschfelder-Buehler-MacGee-Sutton, etc., las que son prácticamente manejables mediante programas de computadora.

c) Para determinados compuestos existen relaciones matemáticas--específicas, éstas se han obtenido debido a las características tan especiales que presentan porque sus propiedades han sido muy bien estudiadas o debido al uso tan grande dentro de determinados procesos industriales.

En resumen, vemos que cuando se requiere trabajar a diferentes--intervalos de presión, temperatura y concentración además de hacerlo con compuestos muy variados se hace necesario manejar un importante número de fórmulas e información para evaluar la propiedad deseada, lo cual obviamente es un problema.

La validez de un método de cálculo depende de tres cosas: 1) Exactitud; 2) Simplicidad, y 3) Tipo de información necesaria para utilizarlo. Si se dispone de datos suficientes acerca del compuesto es posible predecir la propiedad con notable exactitud, en caso contrario se recurre a emplear un procedimiento menos confiable. Por estas razones se han recomendado diferentes métodos de estimación para el cálculo de las propiedades, requiriéndose para algunos de ellos una información especializada que se publica en revistas.

Para centrarnos en el problema tuvimos que plantearnos las siguientes

tes cuestiones:

a) En primer término se encontró un gran número de compuestos de entre los cuales se seleccionaron los de uso más frecuente y aquellos de los que se disponía de información suficiente, para eso nos basamos en las listas de compuestos de sistemas de evaluación de propiedades anteriores - (4) quedando excluidos aquellos compuestos cuyo comportamiento es altamente no ideal y requieren de correlaciones específicas como es el caso del agua y ácido sulfúrico. Únicamente vamos a considerar los estados físicos líquido y gaseoso de las sustancias.

b) Existe una gran cantidad de propiedades, las cuales están jerarquizadas en orden a su importancia, por tanto han sido escogidas aquellas que se consideran imprescindibles en ingeniería y tuvieran información disponible lo suficientemente completa para su apropiada aplicación.

c) Con el objeto de acrecentar la eficacia y exactitud de las correlaciones incorporadas al sistema se tuvieron que comparar y probar éstas para cada una de las propiedades, en la literatura nos encontramos ante una variedad de ecuaciones enorme con el hecho de que a mayor exactitud corresponde una superior complejidad de las mismas, de esta forma decidimos emplear aquellas cuyo cálculo no fuera demasiado complejo, sus parámetros semejantes a los utilizados por las demás propiedades y fueran factibles de ser programadas.

### 1.3.- A N T E C E D E N T E S

Como punto de referencia, cabe mencionar que a principios de la década de los 60's se inició en gran escala una serie de programas adaptados a la computadora como una ayuda al diseño de procesos debido fundamentalmente al gran desarrollo de la industria.

Tales programas fueron referidos a la solución de "Balances de Materia y Energía", siendo su mejor función la simulación del comportamiento del Estado Estacionario en la integración de procesos químicos, es de

cir, la unión de pequeñas unidades de proceso con corrientes de reciclado- requiriendo esencialmente la habilidad de computar las propiedades físicas, termodinámicas y de transporte, así como de la fase de equilibrio en las - corrientes del mismo.

Un importante número de programas han sido publicados en años recientes teniéndose conocimiento únicamente de 12 de ellos, la mayoría de - los cuales se han desarrollado fuera de las universidades, o sea, por la - industria recibiendo por lo tanto poca mención pública.

En 1968 Evans, Steward y Sprague describieron 11 de los menciona dos programas y que habían sido reportados en la literatura.

Así, muchos de estos programas basados en el diseño de procesos- industriales y del tipo comercial almacenaban en su estructura un paquete- de datos conteniendo una gran cantidad de constantes físicas de los com--- puestos puros; entre éstos se cuentan: CHEVRON, CHESS, FLOWTRAN, GEPDS, -- etc. (4)

Sin embargo, la existencia de dichos sistemas que utilizan la -- computadora para su funcionamiento está sujeta de una discusión comparati- va por lo menos a lo que al error producido respecta, considerando las si- guientes cuestiones:

a) Los sistemas están constantemente cambiando y aquéllos que -- fueron los más exactos hace un tiempo son ahora obsoletos.

b) Mucha de la información requerida es incompleta haciéndose ne cesario en algunos casos "suponerla" quedando en duda la capacidad del sis tema.

Más adelante se hará un estudio comparativo entre los programas- mencionados por Evans y el nuestro para hacer notar las diferentes capaci- dades, limitaciones, estructuras, información requerida, etc.

#### 1.4.- VENTAJAS DEL EMPLEO DE UNA MAQUINA COMPUTADORA

La computadora es un artículo nuevo y para mucha gente una máquina con características misteriosas. Con respecto a sus capacidades se le puede comparar primeramente con el ábaco chino, el cual hace operaciones con extrema rapidez en las manos de un operador hábil, pero no se le puede llamar propiamente ni computador o aún calculadora ya que no procesa la información por sí misma sino que sólo lleva la cuenta de los resultados de operaciones manipuladas por el operador.

La regla de cálculo se acerca más a la definición de computadora en cuanto que por el sólo hecho de desplazar longitudes sobre las reglas suministra resultados de operaciones complejas como son los logaritmos, exponentes, funciones trigonométricas, etc., constituyendo un artefacto de gran utilidad para efectuar cálculos científicos y de ingeniería. Desafortunadamente, la regla de cálculo no lo hace todo, no es útil en adiciones, por ejemplo, ni puede ser usada si se requiere una precisión de más de 3 cifras y su exactitud máxima es del 0.5%.

Por último, las calculadoras de escritorio instrumentos que han sido bastante refinados, tanto así que pueden hacer las 4 operaciones aritméticas básicas (+, -, x, ÷) sólo con oprimir un simple botón y es capaz de tratar la aritmética tan rápidamente como el operador pueda alimentar los datos y las instrucciones para ello.

Si todo lo anterior es cierto, ¿qué razones tendríamos para ocupar una computadora? La respuesta a la pregunta nos la da la naturaleza repetitiva de muchos de los cálculos modernos. Si se tuviera que proporcionar al computador de alta velocidad una nueva instrucción para que cada operación sea efectuada, claro está que su gran rapidez sería malgastada, pero si la aplicamos a un problema donde el mismo juego de operaciones tiene que ser llevado a cabo muchas veces entonces tendremos motivos suficientes para utilizar una computadora capaz de realizar operaciones internas a alta velocidad, dando resultados exactos y guardando grandes cantidades de



información sin la intervención humana.

Observemos el siguiente ejemplo: Supongamos que alguien desea -- evaluar la ecuación:  $y = 4x - \sqrt{7 + x^2}$  para una  $x = 2.3$ , con cinco cifras significativas; una posibilidad es la de sentarse, tomar un lápiz y ponerse a desarrollar las operaciones; puede uno servirse de tablas, o en el mejor de los casos ayudarse con una calculadora de escritorio. Sea de la forma que fuere se obtendría la respuesta con mayor rapidez que si se tratara de elaborar un programa para la computadora con el fin de que dé la solución del problema. En este caso sería ridículo el empleo de una -- computadora.

Pero ahora llevamos a efecto un pequeño cambio en la cuestión, -- supongamos que queremos encontrar los valores de "y" para la misma expresión:  $y = 4x - \sqrt{7 + x^2}$  donde  $x = 0 (0.1) ?0$ , o en otras palabras, deseamos generar una tabla de valores de "y" desde un valor inicial de  $x = 0$ , al cual se le añaden incrementos de 0.1 hasta que "x" alcanza un máximo de -- 20; probablemente si se tratara de hacer los cálculos a mano acabaríamos -- no el mismo día que comenzamos, y aún con la ayuda de la calculadora de escritorio el trabajo no sólo consumiría un tiempo considerable sino que a la postre sería tedioso y empezaríamos a cometer errores.

En resumen, la computadora tiene 3 áreas de neta superioridad sobre el ser humano:

1.- Velocidad.- Los modernos circuitos transistorizados pueden -- llevar a cabo operaciones aritméticas en microsegundos, además nunca se -- cansa, calcula una operación tras otra, es por lo menos 1000 veces más rápida y en ocasiones millones de veces más veloz.

2.- Precisión.- Posee la capacidad de manejar cantidades de varios dígitos a un tiempo y con la misma facilidad de uno solo.

3.- Confiabilidad.- Una computadora comete menos de un error en 1,000 millones de operaciones, no es afectada por el tedio ni por la fatiga, tampoco por la complejidad de las cifras.

Pero en otros renglones sí se encuentra muy por debajo de las -- posibilidades humanas:

a).- Su inteligencia es extremadamente reducida, no es capaz de resolver nada por sí misma, debiendo decirle exactamente qué es lo que ha de hacer. No se puede esperar de ella ni una pizca de sentido común o de juicio.

b).- Su vocabulario es muy pequeño, de algunas 50 ó 100 palabras. Su gramática y sintaxis son primitivas y para comunicarse con ella se requiere hacerlo en su propio medio: cintas o tarjetas perforadas. Este pequeño vocabulario significa, por ejemplo, que puede entender y efectuar solamente las operaciones matemáticas más simples junto con funciones tan insignificantes como la de comparar o detenerse. Todo el desarrollo matemático debe ser segmentado (fraccionado) justamente hasta ser expresado en términos de estas sencillas operaciones.

c).- Es totalmente inhábil para aprender, no importa cuántas veces se le diga la misma cosa, siempre se le tiene que repetir con el mismo detalle las instrucciones como en la primera vez.

Se puede concluir con lo anterior que la computadora no resuelve el problema, pero sí en cambio ayuda a explorar alternativas de solución. No se pregunta a la computadora: ¿Cómo construiremos este nuevo dispositivo?, sino, ¿cómo trabajará el dispositivo bajo estas condiciones si lo --- construimos de esta manera? Existen muchas maneras de construir un equipo para lo cual hay que considerar varias alternativas de operación y balancear varias metas diferentes y a veces opuestas. La computadora no puede enumerar las consideraciones de diseño, especificar las condiciones de operación que se investigarán, determinar las metas o cambios entre fines que se oponen, pero por lo general puede ofrecernos una gran ayuda al predecir las consecuencias de nuestras elecciones en estos problemas.

Para ilustrar los beneficios que nos proporciona en lo concerniente a propiedades físicas consideremos el siguiente ejemplo:

Se pretende evaluar los volúmenes molares de diez hidrocarburos a diez temperaturas diferentes utilizando para su cálculo la ecuación apropiada en este caso: Benedict-Webb-Rubin (B-W-R):

$$Z = \frac{P V}{R T} = 1 + \left( B_0 - \frac{A_0}{RT} - \frac{C_0}{RT^2} \right) \left( \frac{1}{V} \right) + \left( b - \frac{a}{RT} \right) \left( \frac{1}{V^2} \right) + \left( \frac{a_c}{RT} \right) \left( \frac{1}{V^3} \right) + \left( \frac{C}{RT^2} \right) \left[ \left( 1 + \frac{\gamma}{V^2} \right) / V^{-2} \right] \exp \left( - \frac{\gamma}{V^2} \right)$$

Como podemos ver, esta correlación requiere de ocho parámetros - específicos para cada compuesto, en total 81 constantes y las operaciones a efectuar serían:

2200 multiplicaciones

800 adiciones

200 exponenciaciones

lo cual nos llevaría un tiempo extraordinariamente grande y con probables errores aritméticos.

Basándonos en la ilustración antes descrita podemos concluir que es indispensable contar con un sistema racional y sensato capaz de manipular una gran cantidad de información con el mínimo de intervención humana y lo máximo en efectividad.

# C A P I T U L O II

---

## Descripción de las Técnicas Aplicadas.

- 2.1.- I n t r o d u c c i ó n
- 2.2.- Estado crítico.
- 2.3.- Factor acéntrico.
- 2.4.- Introducción a las ecuaciones de estado.
- 2.5.- Estados Correspondientes.
- 2.6.- Propiedades contenidas por el sistema:
  - a.- Capacidad calorífica.
  - b.- Entalpia.
  - c.- Densidad.
  - d.- Calor latente de vaporización.
  - e.- Presión de vapor.
  - f.- Tensión superficial.
  - g.- Viscosidad.
  - h.- Conductividad.
  - i.- Coeficiente de difusión.

## 2.1.- I N T R O D U C C I O N

La parte teórica de las correlaciones empleadas y sus ecuaciones serán detalladas en este capítulo. Se hará una mención de los métodos empleados en la primera versión y los cambios efectuados en la segunda, mencionando en cada propiedad su definición, teoría y comentarios del método usados tanto para sistemas líquidos como gaseosos. Los mismos puntos se tratan para el caso de mezclas. Se consideran también los efectos de presión (corrección) y temperatura en cada ecuación.

Cada correlación se describe con una breve Discusión, sus limitaciones en cuanto a los compuestos, presiones, temperaturas y rangos de aplicación, su confiabilidad (error promedio esperado) y la Literatura.

## 2.2.- EL ESTADO CRITICO

Una imagen simplificada del estado crítico puede lograrse con un bosquejo de la fase líquida. La energía potencial de atracción entre las moléculas, que hace posible la existencia de dicha fase es balanceada en algún grado por la energía cinética de las moléculas. Esta última tiende a separar en todas direcciones las porciones del líquido.

Así, la presión de vapor se debe a la tendencia de algunas de las moléculas del líquido las cuales tienen energía cinética suficiente para vencer las fuerzas de cohesión que las mantienen en esta fase. Confor-

me se eleva la temperatura, aumenta la energía cinética de las moléculas, pero hay poco efecto sobre las fuerzas de cohesión. La temperatura a la cual la energía cinética molecular promedio es igual a la fuerza de atracción, es llamada: Temperatura Crítica, un poco arriba de esta temperatura no es posible la existencia de la fase líquida.

Métodos de cálculo de  $T_c$ ,  $P_c$ ,  $V_c$  y  $Z_c$ .- Ver apéndice.

### 2.3.- FACTOR ACENTRICO

El Factor acéntrico ( $w$ ) fué introducido por Pitzer (1) como un parámetro de correlación para caracterizar la acentricidad de la molécula.

Método de cálculo.

$$w \equiv - \log P_{v,Tr} \quad (a: Tr = 0.7) - 1.000$$

Donde la presión de vapor se grafica, ya sea, contra  $Tr$  ó  $1/Tr$ , a un valor de  $Tr$  igual a 0.7

Limitación.- Esta ecuación es aplicable a cualquier tipo de moléculas.

Comentarios.- Para la mayoría de los materiales, los valores de  $P_{v,Tr}$  son algo menores de 0.1 y por lo tanto  $w$  es positivo, oscilando entre valores de 0 a 0.4

Temperatura y Presión Pseudocríticas (mezclas).-

Las propiedades pseudocríticas no se determinan experimentalmente, sino mediante ciertas reglas de mezclado; para hidrocarburos tenemos por ejemplo la regla de Kay:

1.- La temperatura pseudocrítica de una mezcla es la suma de la fracción mol de cada uno de los componentes puros multiplicados por su temperatura crítica:

$$T_{i,c} = \sum_{i=1}^n x_i T_{c,i}$$

2.- La presión pseudocrítica de una mezcla es la suma de la fracción mol de cada uno de los componentes puros multiplicado por su presión crítica:

$$P_{pc} = \sum_{i=1}^n x_i \cdot P_{ci}$$

## 2.4.- INTRODUCCION A LAS ECUACIONES DE ESTADO

Son formulaciones analíticas que relacionan las propiedades P-V-T de un fluido puro o de mezclas mediante correlaciones teóricas o empíricas. Al decir propiedad se quiere dar a entender cualquier característica de la sustancia que puede medirse, tal como la presión, el volumen o la temperatura, o una característica que sea posible de calcular o de deducir, tal - es el caso, por ejemplo, de la energía interna.

Las ecuaciones empíricas están destinadas a ajustar los valores experimentales y son convenientes porque sirven como un almacén de datos - P-V-T, como fórmulas de interpolación y en la descripción del comportamiento de los datos P-V-T cuando se efectúan operaciones matemáticas subsecuentes. La complejidad de tales ecuaciones y el número de constantes empíricas requeridas dependen de la exactitud de las medidas experimentales, de la precisión deseada y del intervalo experimental de las variables. Además de representar una condensación conveniente de los datos experimentales son valaderas no sólo para los valores calculados de presión, volumen, temperatura y densidad sino también para las propiedades termodinámicas derivadas por procedimientos matemáticos.

A pesar de las complicaciones que representa su uso, hay muchas ventajas que se aprovechan por el empleo de una ecuación de estado para representar las propiedades termodinámicas de un material.

Algunas de ellas son las enumeradas a continuación:

1.- La consistencia termodinámica de los datos ajustados es automáticamente asegurada.

- 2.- Permiten conocer un sumario conciso de una gran cantidad de valores experimentales
- 3.- A través de ellas es posible hacer la interpolación exacta de los datos experimentales.
- 4.- Suministran una función continua que facilita los cálculos termodinámicos en donde queda implicado el uso de diferenciales e integrales.
- 5.- No ocurre ninguna discontinuidad para las propiedades entre la ecuación usada para representar las propiedades del líquido y la correspondiente a las del vapor dado que es utilizada la misma ecuación para ambas fases.
- 6.- Por consiguiente, los datos de equilibrio vapor-líquido pueden calcularse sin la consideración de un estado líquido hipotético al rebasarse la temperatura crítica de un componente.
- 7.- Los valores de entalpía y entropía pueden ser inferidos de las constantes derivadas de datos de equilibrio líquido-vapor o viceversa.
- 8.- Dependiendo de la complejidad de la ecuación, las constantes pueden ser evaluadas o interpretadas en términos de las propiedades de las moléculas.
- 9.- Y, por último, contribuyen como un punto de partida para el tratamiento termodinámico de las propiedades pertenecientes a las mezclas.

Han sido propuestas alrededor de un centenar de ellas, pero sólo unas pocas han probado ser lo suficientemente exactas para ser consideradas útiles. Al respecto se han llevado a cabo revisiones con sentido crítico de algunas de ellas.

La forma de las ecuaciones de estado es de gran interés ya que representan los diversos intentos por conformar los datos experimentales -



en una ecuación con la ayuda del mínimo posible de constantes.

Todas las ecuaciones de estado razonables deben ser cúbicas en relación al volumen para representar adecuadamente las curvas P-V en la región crítica.

Es conveniente clasificarlas de acuerdo al número de constantes arbitrarias que emplean; esta clasificación carecería de significado para ecuaciones de estado reducidas si todas sus constantes son expresadas en función de las propiedades críticas, por tanto si solamente  $P_c$  y  $T_c$  se utilizan, entonces todas ellas son esencialmente ecuaciones de dos constantes.

Si se desea una información extra de las ecuaciones de estado -- consultar el apéndice II.K.

## 2.5.- ESTADOS CORRESPONDIENTES

En 1873 Van Der Waals definió por primera vez el término -Condición reducida- y presentó el teorema de los estados correspondientes según el cual todos los gases poseen los mismos factores de compresibilidad si se miden bajo idénticas condiciones reducidas de presión y temperatura. -- Este concepto fué extendido por Young a los líquidos en 1899.

De acuerdo con este principio, las desviaciones de las propiedades termodinámicas de diferentes fluidos puros, manifestarán la misma discrepancia con respecto a las sustancias en su estado gaseoso ideal examinadas bajo las mismas condiciones reducidas de presión y temperatura; así:

$$z = f (Pr, Tr)$$

Basándose en este principio se han desarrollado cartas generalizadas para los factores de compresibilidad de gases y otras propiedades derivadas tales como fugacidades, así como diagramas para la variación de Entalpía, Entropía y Capacidad Calorífica con respecto a la conducta del gas ideal.

Watson extendió estas cartas generalizadas al estado líquido.

## 2.6.- PROPIEDADES CONTENIDAS EN EL SISTEMA

### 2.6.a.- CAPACIDAD CALORIFICA.

Definición.- Es la cantidad de calor necesaria para elevar la temperatura de la unidad de masa de una sustancia un grado; así el calor específico es el número de calorías requerido para elevar un grado centígrado la temperatura de un gramo de sustancia.

Teoría.- Desde el punto de vista termodinámico, la capacidad calorífica, es la derivada de la energía con respecto a la temperatura  $(dE/dT)_V = C_v$ . A la energía molecular se le puede dividir en varios tipos, entonces al expresar la energía total como una suma algebraica, es posible calcular las capacidades caloríficas. La energía total la cual es independiente de la temperatura se divide en:

Translacional, rotacional, vibracional, electrónica y nuclear.

No es fácil calcular la capacidad calorífica de una molécula. La mecánica cuántica y estadística permiten una formulación matemática al problema, pero es necesario un conocimiento detallado de la estructura y el espectro para obtener valores numéricos. Usualmente se supone que la molécula es rígida, la cual está en rotación y que vibra en una forma armónica, por ejemplo: los átomos desplazados del equilibrio están actuando en forma de una fuerza compensadora proporcional al desplazamiento. Se supone también que las diferentes energías no interaccionan entre sí. Incluso con estas simplificaciones, cuando se toma cuidado para obtener un panorama completo de las características vibracionales, las capacidades caloríficas calculadas son muy cercanas a los valores experimentales.

Para trabajos de Ingeniería, es usualmente importante obtener rápidamente toda la información deseada tal como: Frecuencia de enlace de vibración a partir del espectro, momentos moleculares de inercia, etc. Consecuentemente se han adaptado técnicas promedio y correlaciones de estructuras empíricas sugeridas.

Hay dos tipos de capacidad calorífica, esto es, según se calienta la sustancia a presión constante o a volumen constante. En este último caso toda la energía proporcionada va a incrementar la interna de la sustancia y a esa capacidad se le designa como  $C_v$ . Por otra parte, al calentar una sustancia a presión constante, la energía suministrada no sólo incrementa la interna sino que hace posible la expansión de la sustancia venciendo la ecuación que ejerce la presión atmosférica, por eso esta capacidad que designamos por  $C_p$ , debe ser mayor que la anterior. En líquidos y sólidos, donde la variación de volumen por calentamiento es pequeño, la diferencia entre  $C_p$  y  $C_v$  es ordinariamente ligera. Sin embargo, en los gases donde aquellos cambios son grandes, la diferencia  $C_p-C_v$  siempre es significativa y no debe despreciarse.

#### Métodos de cálculo.

##### Estado Gaseoso:

Existen varios métodos para la evaluación de la capacidad calorífica, una gran cantidad de ellos dependen de la forma en que se suministran los datos así como de la exactitud requerida en la estimación (1).

- 1.- Método por integración gráfica.
- 2.- Método por integración matemática.
- 3.- Método del  $C_p$  medio.
- 4.- Método de calores atómicos aditivos.
- 5.- Método de correlación-propiedad; técnica de caracterización de hidrocarburos.

##### Estado Líquido.

La estimación del  $C_p$  de líquido ha sido revisada desde 1957 por Gambill (17) y únicamente se han publicado pocas correlaciones. En general, como lo notó Gambill, el rango del  $C_p$  de la mayoría de los líquidos orgánicos varía entre 0.4 y 0.5 cal/g- K y aumenta un poco con la temperatura. Los efectos de presión son ligeros excepto cerca de la región crítica.

Parece que las técnicas de estimación caen en tres categorías: aquellas que se basan en parámetros estructurales (empíricas), las basadas en calcular los paquetes de energía y las basadas en principios termodinámicos.

#### P R I M E R A   V E R S I O N.

##### Sistema Gaseoso:

El método de cálculo empleado fué la ecuación del polinomio la cual varía en función de la temperatura.

Discusión.- La mayoría de las ecuaciones para los  $C_p$  de gases -- son empíricas y por lo general la Capacidad Calorífica a presión constante se expresa como una función de la temperatura haciendo uso de las series - exponenciales con constantes A, B, C, D. Ya que las ecuaciones del  $C_p$  sólo son válidas dentro de ciertos intervalos moderados de temperatura, es posible disponer de ecuaciones de diferentes tipos cuya precisión casi sea igual a los datos experimentales de  $C_p$ . El problema de ajustar las ecuaciones de  $C_p$  con los datos de dicha propiedad se han simplificado bastante en la actualidad por medio de las computadoras digitales, las cuales presentan la posibilidad de determinar las constantes, que mejor se adapten y -- que al mismo tiempo define la precisión con que pueden determinarse las capacidades caloríficas.

E c u a c i ó n e s

$$C_p^{(1)} = a + bT + cT^2 + dT^3$$

donde:

$C_p^{(1)}$  = Capacidad Calorífica a presión baja (1 atm) en  $\text{Cal/gmol-}^\circ\text{C}$

T = Temperatura en  $^\circ\text{K}$ .

a, b, c, d = Constantes, recopilados del A. P. I. e., 1969 (7) y del T. R. C., 1968 (13).

Las constantes pueden evaluarse también por el método de Rihani- y Doraiswamy con una exactitud del 3% y en unos casos menor al 0.5%.

Limitaciones.- Aplicable a compuestos orgánicos (364 compuestos- estudiados) y algunos inorgánicos (53 compuestos estudiados).

Confiabilidad.- Los resultados muestran que el error promedio no excede del 1.44 % y solamente en 3 compuestos el error fué mayor de 1 %.

Literatura.- (1), (2), (6), (8), (14).

Sistema Líquido.-

No se incluyó en esta primera versión.

## S E G U N D A    V E R S I O N.

Compuestos Puros.

Modificaciones: Inclusión del cálculo de Cp de líquidos; Corrección debido al efecto de la presión en el Cp de gases, Evaluación del Cp - de mezclas de compuestos tanto en estado líquido como gaseoso.

Sistema Gaseoso:

Corrección por Presión.- Se han publicado varias gráficas de -- Cp-Cp<sup>0</sup>; Lydersen (15) para obtener la diferencia del Cp con Tr y Pr como - parámetros; Weiss y Joffe (16) usaron la ecuación B-W-R para obtener el - Cp por medios analíticos. Edmister (18) usó datos de compresibilidad de - Hidrocarburos y Sherwood (19) usó la correlación P-V-T de Pitzer.

Cerca del punto crítico el Cp se aproxima a infinito, así en esta región, las correlaciones son necesariamente pobres, en otras regiones- los errores son muy pequeños.

Ecuación.- El método de cálculo para corregir el Cp por presión- es:

$$C_p = C_p^0 - \frac{R}{M} \left( \frac{\bar{C}_p - \bar{C}_p^0}{R} \right)$$

Donde:

$C_p$  =  $C_p$  isotérmico del gas real en BTU/lbmol-°F

$C_p^0$  =  $C_p$  isotérmico del gas ideal en BTU/lbmol-°F

R = Constante de los gases 1.986 BTU/lbmol-°R

M = Peso molecular

Limitaciones.- En general, este procedimiento no es exacto para sustancias polares. Las diferencias entre los valores calculados y los experimentales para desviaciones del  $C_p$  debido a la presión para hidrocarburos, son pequeñas.

Confiabilidad.- Los errores raramente exceden de 0.050 BTU/lb-°F excepto en las regiones críticas, donde se tienen errores que pueden ir -- de 0.3 a 5.0 BTU/lb-°F. El error del método aumenta con el incremento de la incertidumbre en las propiedades del componente puro.

Literatura.- (1), (7), (3).

Sistema Líquido.

El  $C_p$  se calcula mediante la ecuación polinomial de W.S. Tamplin y D.A. Zuzic.

Discusión.- En el proceso para implementar un método de evaluación del  $C_p$  de líquidos en el sistema, se recolectaron datos experimentales y de la literatura para seleccionar una serie de valores constantes necesarios en la ecuación, en los casos para los que no se encontraron las constantes se evaluaron estas mediante ecuaciones simultáneas con datos experimentales.

Debido a que en los líquidos la Capacidad Calorífica la variación de volumen por calentamiento es pequeño, el efecto de la presión en el  $C_p$  es pequeño, y no hubo necesidad de ninguna corrección.

E c u a c i ó n.

$$C_p = a + bT + cT^2 \quad !$$

Donde:

$C_p$  = Capacidad Calorífica del líquido en Cal/gmol-°C

$T$  = Temperatura en °K.

$a, b, c$  = Constantes.

Limitaciones.- El uso de esta ecuación para extrapolaciones mas allá del límite de los datos experimentales debe hacerse con reservas ya que no sería confiable.

Confiabilidad.- Los errores posibles son menores al 3%.

Literatura.- (1), (7), (11), (12), (20).

#### M E Z C L A S.

El tratamiento de las mezclas se hace a partir de una ecuación de estado de la que se pueda contar con las constantes necesarias. Se ha centrado la atención en dos ecuaciones de estado para mezclas: La B-W-R y la Redlich-Kwong. Estas ecuaciones son muy limitadas y de difícil tratamiento en un programa de computadora.

Un camino alternativo consiste en obtener la propiedad para cada componente puro y según las reglas de mezclado apropiadas obtener la propiedad correspondiente para la mezcla.

#### Estados Líquido y Gaseoso.

Cálculo del  $C_p$  de mezclas a partir del  $C_p$  de cada componente puro en el estado correspondiente.

Discusión.- La capacidad calorífica es una función continua solo en la región comprendida entre las transiciones de fase; en consecuencia, no es posible disponer de una ecuación de capacidad calorífica para una sustancia que pase desde el cero absoluto hasta cualquier temperatura deseada. El ingeniero debe determinar experimentalmente la ecuación de  $C_p$  para el intervalo de temperatura dentro del cual ocurre la transición de fase y luego determinar otra ecuación de  $C_p$  para el siguiente intervalo de temperatura en el cual se presente una nueva transición.

Ecuación.- La Capacidad calorífica de la Mezcla se calcula mediante:

$$\text{Estado Gaseoso: } C_{p_m} = \sum_{i=1}^n y_i \cdot C_{p_i}$$

$$\text{Estado Líquido: } C_{p_m} = \sum_{i=1}^n x_i \cdot C_{p_i}$$

Donde:

$C_{p_m}$  = Capacidad Calorífica de la mezcla en Cal/gmol-°C

$C_{p_i}$  = Capacidad Calorífica del componente puro en Cal/gmol-°C

(En Edo. Líquido ó gaseoso)

$y_i$  = Fracción mol del Cpte. Gaseoso.

$x_i$  = Fracción mol del Cpte. líquido.

Limitaciones.- La utilidad de la ecuación se restringe a los rangos de validez de las constantes (a,b,c,d) para calcular el Cp del compuesto puro.

Confiabilidad.- Los errores esperados son menores al 3 %.

Literatura.- (1), (21).

## 2.6.b.- ENTALPIA.

Definición.- La Entalpia de un sistema, es la energía (E) del mismo, más el producto de la presión por el volumen.

$$H = E + PV$$

Teoría.- Los cambios térmicos a presión constante se expresan más adecuadamente mediante la función llamada Entalpia o contenido de calor de un sistema. Esta función se define por la relación  $H = E + PV$ ; donde P y V son la presión y el volumen del sistema. Como E y PV se encuentran totalmente caracterizados por el estado del sistema, la Entalpia es también una función de estado y es completamente independiente de la manera en que se logra aquél. En consecuencia el cambio de Entalpia (H), puede escribirse así:



$$\Delta H = H_2 - H_1$$

Donde  $H_2$  es la entalpia del sistema en su estado final y  $H_1$  en el estado inicial. Al sustituir  $H_2$  y  $H_1$  por sus equivalentes según la definición de entalpia se obtienen para  $\Delta H$ :

$$\Delta H = \Delta E + (P_2 V_2 - P_1 V_1)$$

Esta ecuación es la definición general de  $\Delta H$ , cuando la presión-permanece constante durante el proceso, entonces:

$$\Delta H = \Delta E + P \Delta V$$

Es decir, el cambio de entalpia a presión constante es igual al incremento de energía interna más cualquier trabajo de presión-volumen realizado. De aquí que a presión constante, la Entalpia representa el calor-absorbido en pasar del estado inicial al estado final, con tal de que sólo se efectúe trabajo debido a P-V.

Entalpia como una función de temperatura y cambios de fase.

Cuando un sistema es isobárico (presión cte.) se observa que al pasar de un estado inicial a uno final, absorbe calor acompañado de cambios de temperatura, denominándose calor sensible, pero cuando ocurre un cambio de fase, la temperatura permanece constante, lo que se conoce como calor--latente.

En base a la teoría molecular, este calor latente representa la-energía requerida para vencer las fuerzas intermoleculares de atracción y-permite pasar a las moléculas de un estado muy denso a otro de menor densi-dad y por lo tanto más móvil. Algunos tipos de transiciones son:

- 1.- Calor o entalpia de fusión. (sólido a líquido)
- 2.- Calor o entalpia de vaporización (liq. a gas)
- 3.- Calor o entalpia de sublimación (sólido a vap.)
- 4.- Calor o entalpia de transición (sólido a sólido.)

El último caso representa una modificación del estado cristalino.

Métodos de cálculo.-

Los métodos de cálculo de la entalpia dependen de la forma en la cual se suministran los datos, así como de la exactitud requerida en la -- evaluación.

- 1.- Método de integración gráfica.
- 2.- Método de integración matemática.
- 3.- Método del  $C_p$  medio.
- 4.- Método de calores atómicos aditivos.
- 5.- Método de correlación-propiedad.
- 6.- Diagramas de Entalpia-Concentración.

Sistemas de cálculo.- ver apéndice II.f.

PRIMERA VERSION.

Sistema Gaseoso.

Se omitió el aspecto relacionado con los cambios de fase y solamente se examina el problema de calcular los cambios de entalpia a partir de datos de capacidad calorífica.

Discusión.- Se puede observar que, por lo general, para un proceso a presión constante, si se aplica la definición de capacidad calorífica y si se dispone de valores del  $C_p$ , es posible calcular el cambio de entalpia de un sistema.

Al efectuar los cálculos de entalpia, se debe hacer notar que -- los cambios del  $C_p$  no son continuos en aquellos puntos donde ocurre un cambio de fase. El nombre que generalmente se da a estas transiciones de fase es el de: Calor Latente, en donde la sustancia puede absorber una gran cantidad de calor sin que aumente apreciablemente su temperatura.

La entalpia al igual que la energía interna, puede ser evaluada únicamente como una diferencia. En general, el cambio de entalpia de un sistema es función del  $C_p$  y de la Temperatura.

Ecuación.-

$$\Delta H = \int_{t_1}^{t_2} (a + bT + cT^2 + dT^3) \cdot dT$$

Donde:

$\Delta H$  = Entalpia del sistema en Cal/g-mol.

T = Temperatura en °K.

a, b, c, d = Constantes.

Limitaciones.- Este método es aplicable tanto a gases como a líquidos haciendo uso de las constantes correspondientes (a, b, c, d) para cada estado físico.

El método de integración es muy exacto y, cuando se precisa de una técnica de evaluación de entalpia rápida, es el mejor.

Confiabilidad.- Los valores calculados de la entalpia están sujetos a los errores posibles en la determinación del Cp, el cual tiene errores promedio de 1.44 %.

Literatura.- (2), (1), (6), (8)

Estado Líquido.-

Debido a que el cálculo del Cp de líquidos no se incluyó, ocurrió que este estado no se introdujera en esta etapa.

SEGUNDA VERSION.

Compuestos PUROS:

Modificaciones.- Se incluyó el cálculo de entalpia de compuestos líquidos, la ecuación para calcular la entalpia de gases fué corregida por el efecto de la Presión mediante la ecuación de Yen y Alexander.

Sistemas Gaseosos.-

Corrección por Presión:

Discusión.- Para un gas ideal es fácil demostrar que las variacio

nes de presión no tienen efecto sobre la entalpia, pero para gases reales una aproximación directa es usar cartas del factor de compresibilidad. Generalmente existen gráficas de Z como una función de  $T_r$  y  $P_r$ , otras cartas similares pueden encontrarse en textos de Ingeniería Química; se han propuesto cartas de desviación de la entalpia por Edmister (21) y Sattman (22).

Ecuación.- La ecuación propuesta por Yen y Alexander es:

Ecuaciones para la desviación de la entalpia de Yen-Alexander.

Ecuaciones para :  $\frac{H^o - H}{T_c}$  en función de  $P_r$  y  $T_r$

Vapor sobrecalentado.

Límite de presión Reducida: 0.01 a 30.0

$$\frac{H^o - H}{T_c} = \frac{m P_r \left(1 - \frac{P_r}{X_o}\right)}{e^{-C_1 (P_r)^2} \{ \} + C_4 + C_5 P_r + C_6 P_r^2}$$

donde:

$$\{ \} = 1 - C_2 - C_4 - C_5 P_r + C_2 \left[ \frac{1}{27} \text{Arc tan} (C_3 - C_3 P_r) + 0.50 \right]^2$$

$$Z_c = 0.29$$

Límite de Temperatura reducida:  $0.8 < T_r < 8.0$

$$C_1 = 166 e^{-0.16 T_r} + 0.017$$

$$C_2 = 0.62 e^{-18.4 (T_r - 1.0)} + 0.05$$

$$C_3 = e^{\left( \frac{38.8}{T_r} - 34.2 \right)}$$

$$C_4 = 0.989 (T_r - 0.75)^{1.63} e^{-0.3175 (T_r - 0.75)}$$

$$C_5 = 0.215 e^{-0.1048 (T_r - 4.02)}$$

$$C_6 = 0.0564 (T_r - 0.5)^{4.67} e^{-2.869 (T_r - 0.5)}$$

$$X_o = 1.15 - 0.314 (T_r - 8)^3$$

$$m = \frac{1 - 0.0001499 T_r^{9.17} e^{-1.297 T_r}}{0.1879 + 1.0826 (T_r - 0.65)^{1.1740}}$$

Límite de Temperatura reducida:  $8.0 < T_r < 25.0$

$$\begin{aligned} \frac{H^0 - H}{T_c} = & 0.053 T_r - 0.00341 T_r^2 + 0.13 P_r - 0.00176 P_r^2 \\ & - 0.02725 T_r P_r + 0.000128 T_r P_r^2 + 0.000508 T_r^2 P_r \\ & + 0.0000634 T_r^3 + 0.0000258 P_r^3 - 0.2078 \end{aligned}$$

$$Z_c = 0.27$$

Límite de temperatura reducida:  $0.9 < T_r < 4.0$

$$C_1 = \frac{40 e^{-5.7 T_r}}{T_r - 0.81} + 0.01$$

$$C_2 = \frac{0.35 e^{-26.2 (T_r - 1.0)}}{T_r} + 0.31$$

$$C_3 = 17.25 e^{-16.7 (T_r - 1.0)} + 2.75$$

$$\begin{aligned} C_4 = & 0.444 (T_r - 2.0) - 0.0215 (T_r - 2.0)^2 + 0.0610 (T_r - 2.0)^3 \\ & - 0.0404 (T_r - 2.0)^4 + 0.6564 \end{aligned}$$

$$C_5 = 0.0697 (T_r - 2.0) + 0.0734 (T_r - 2.0)^2 - 0.0533 (T_r - 2.0)^3 + 0.0125$$

Si  $T_r \leq 2.25$

$$C_5 = 0.0$$

Si  $T_r > 2.25$

$$C_6 = 0.00301 (T_r - 0.8) e^{-0.87 (T_r - 0.8)^2}$$

$$X_0 = 8.5 + 10.5 (T_r - 4.0)^2$$

$$m = \frac{1.0}{0.1052 + 1.2044 (T_r - 0.4429)^{2.135}}$$

$$Z_c = 0.25$$

Límite de temperatura reducida:  $0.75 < T_r < 2.0$

$$C_1 = 0.87 e^{9.845(1.0-T_r)} + 0.023955 e^{1.2405 T_r}$$

$$C_2 = 0.47148 e^{39.35(1.0-T_r)} + 0.142$$

$$C_3 = 3918 e^{122(1-T_r)} + 2.0$$

$$C_4 = 1.1938 T_r - 0.20726 T_r^2 - 0.90649$$

$$C_5 = 3.0 e^{-2.52 T_r}$$

$$C_6 = 0.004277 (T_r - 0.895) e^{-0.946(T_r - 0.895)^2}$$

$$X_0 = -60 T_r + 170$$

$$m = \frac{1.0}{0.0853 + 1.5078 (T_r - 0.5952)^{1.7336}}$$

$$Z_c = 0.23 \quad \text{Límite de temperatura reducida: } 0.8 < T_r < 1.7$$

$$C_1 = \frac{T_r}{0.003147 e^{6.0759 T_r} - 61.12 (T_r - 1.0) e^{-19.933(T_r - 1.0)} + 1.9936 e^{-0.911 (10(T_r - 0.88))^{10}}$$

$$C_2 = e^{(17.671 - 17.63 T_r)} + 0.17 - 1.1738 e^{-17.193 (T_r - 1.05)}$$

$$C_3 = e^{(52.268 - 49.188 T_r)} + 24.249 e^{-920.5 (T_r - 1.1)^2}$$

$$C_4 = 0.0032456 e^{3.2917 T_r} - e^{17.3 T_r - 33.6}$$

$$C_5 = 1.9772 e^{-2.1839 T_r}$$

$$C_6 = 0.000336 e^{1.61 T_r} - 0.0000054 T_r^{11.5}$$

$$m = \frac{1.0}{-0.023 + 1.0743 (T_r - 0.4146)^{1.8103}}$$

$$X_0 = 515 - 250 T_r$$

Líquido Subenfriado.

$$\text{Límite de presión reducida: } 0.01 < P_r < 30$$

$$\text{Límite de temperatura reducida: } 0.5 < T_r < 1.0$$

$$Z_c = 0.29$$

$$\begin{aligned} \frac{H^0 - H}{T_c} = & -0.09572107 (P_r - 4.2) - 9.501235 (T_r - 0.77) \\ & - 17.30389 (T_r - 0.77)^2 - 0.3195707 (P_r - 4.2) (T_r - 0.77) \\ & + 1.368092 \ln P_r + 4.227096 (\ln P_r) (\ln T_r) \\ & + 3.181639 (\ln P_r) (\ln T_r)^2 + 9.707447 \end{aligned}$$

$$Z_c = 0.27$$

$$\begin{aligned} \frac{H^0 - H}{T_c} = & -0.1368774 (P_r - 4.664) - 14.56975 (T_r - 0.79749) \\ & - 7.812724 (T_r - 0.79749)^2 - 0.1642482 (T_r - 0.79749) \\ & \cdot (P_r - 4.664) + 1.036851 \ln P_r + 4.463472 (\ln P_r) (\ln T_r) \\ & + 4.525831 (\ln P_r) (\ln T_r)^2 + 10.86085 \end{aligned}$$

$$Z_c = 0.25$$

$$\begin{aligned} \frac{H^0 - H}{T_c} = & - 0.1074635 (P_r - 4.2) - 15.80132 (T_r - 0.77) \\ & - 15.18611 (T_r - 0.77)^2 - 0.1476876 (P_r - 4.2) (T_r - 0.77) \\ & + 0.780074 \ln P_r + 3.154058 (\ln P_r) (\ln T_r) \\ & + 2.988533 (\ln P_r) (\ln T_r)^2 + 12.28618 \end{aligned}$$

$$Z_c = 0.23$$

$$\begin{aligned} \frac{H^0 - H}{T_c} = & - 0.08644293 (P_r - 4.2) - 12.93889 (T_r - 0.77) \\ & + 10.81311 (T_r - 0.77)^2 - 0.1568094 (P_r - 4.2) (T_r - 0.77) \\ & + 0.7466842 \ln P_r + 3.17422 (\ln P_r) (\ln T_r) \\ & + 2.930566 (\ln P_r) (\ln T_r)^2 + 12.72429 \end{aligned}$$

Limitaciones.- Es extremadamente difícil valorar las técnicas de estimación existentes para determinar los efectos de la presión sobre la entalpia. Es de esperarse que esta ecuación sea de las más exactas, sin embargo, cabe hacer notar que durante la comprobación de la ecuación, se encontraron valores extremadamente altos de la desviación de la Entalpia causada por la presión, dichos valores excedían en mucho al de la entalpia sin corregir.

Confiabilidad.- Este método es generalmente exacto, tiene un error promedio menor al 2 %.

Literatura.- (1), (3)

Estado Líquido.-

Discusión: Una vez que se han examinado en detalle las fuentes de información para valores de capacidades caloríficas de líquidos y como se escogió la ecuación del polinomio para calcular el  $C_p$ , el cálculo de la



ecuación se basa en la integración de dicha ecuación.

Ecuación.-

$$\Delta H = \int_{t_1}^{t_2} C_p \cdot dT$$

$$\Delta H = \int_{t_1}^{t_2} (a + bT + cT^2) \cdot dT$$

Donde:

$\Delta H$  = Entalpia del sistema en Cal/g-mol.

T = Temperatura en °K.

a, b, c = Constantes.

Limitaciones.- El empleo de la ecuación para extrapolación de valores fuera de los límites de validez de las constantes no es confiable.

Confiabilidad.- Los errores posibles son menores al 3 %.

Literatura.- (1), (7) (12), (20).

M E Z C L A S.

Discusión.- La entalpia de una mezcla de composición constante es función de la temperatura y presión. A cualquier T y P la desviación de la entalpia puede expresarse:

$$H_m(T, P) = \sum_{i=1}^n x_i \cdot H_i^o - H_m^d(T, P)$$

La desviación isotérmica puede obtenerse de varias maneras; las más ampliamente conocidas son: Hougen y Watson (23) y Lydersen-Greenkorn-Hougen (24) la cual incluye parámetros de  $P_r$ , T y  $Z_c$ . Correlación de Pitzer (25) ~~ta~~ con parámetros de  $P_r$ , T y  $\omega$ .

La desviación de H puede también calcularse a partir de ecuaciones de estado. Se puede derivar de la termodinámica clásica las siguientes relaciones:

$$dH = d(PV) + [ T (\partial P/\partial T)_V - P ]_T .dV$$

Integrando de  $P = 0$  a  $P$ ; obtenemos la desviación isotérmica de la entalpia.

$$H_{in}^d = RT - PV + \int_0^V (P - T(\partial P/\partial T)_V)_T .dV$$

Ecuación.- La ecuación adaptada al sistema para el cálculo de entalpia de mezclas corregida por presión fué la de Yen-Alexander.

Limitaciones.- Los cálculos de la desviación de entalpia están basados en las reglas de mezclado descritas por Kay, el cálculo de  $(H)$  depende de si la mezcla es líquido subenfriado vapor saturado ó vapor sobrecalentado así como de las constantes pseudocríticas de la mezcla. La ecuación es más exacta a  $Tr$  menores de 0.6 y su precisión disminuye a medida que la  $Tr$  se va incrementando tanto para líquidos como para gases.

Confiabilidad.- El error promedio encontrado fue menor a 2 BTU/lb

Literatura.- (1), (7), (3), (21)

## 2.6.c.- D E N S I D A D

DEFINICION.- La densidad está definida como la masa de una sustancia contenida en una unidad de volumen. Frecuentemente expresada en g/ml o en lb/pie<sup>3</sup> y en muchas ocasiones es indicada en grados API, densidad relativa, lb/gal., etc. La densidad relativa (Sp. Gr.) es la densidad del material referida a la del agua a determinadas condiciones de presión y temperatura.

TEORIA.- A).- Sistemas gaseosos.

Los investigadores que originalmente desarrollaron para los gases las diversas correlaciones entre la temperatura, presión y volumen trabajaron a condiciones tales que el promedio de las distancias entre las moléculas era lo suficientemente grande como para desprestigiar el efecto de las fuerzas intermoleculares, así como el volumen de las moléculas en sí, como

las bajas presiones y las temperaturas elevadas tienden a incrementar el volumen molar, al disminuir la presión y aumentar la temperatura la materia gaseosa se aproxima al comportamiento ideal. Si el volumen molar es pequeño la hipótesis de una conducta semejante al gas ideal puede reportar errores hasta del 500%.

Un gas ideal es un gas imaginario que obedece exactamente ciertas leyes simples, tales como la de Boyle, Charles, Dalton y Amagat; expresada en su forma general tiene la forma:  $PV = RT$ , lo cual nos dice que a una temperatura fija el producto de la presión y el volumen es siempre constante e invariable. Establece esta teoría que las moléculas del gas en sí no ocupan ningún volumen y que no existen fuerzas entre ellas; ningún gas real obedece con exactitud estas leyes en todos los intervalos de presión y temperatura, aunque los gases ligeros ( $H_2$ ,  $O_2$ , aire, etc.) en ciertas circunstancias sí son consistentes con las leyes de los gases perfectos a pesar de existir desviaciones que pueden considerarse nulas. Los gases pesados, tal como el  $SO_2$  y los hidrocarburos, particularmente cuando las presiones son altas y las temperaturas bajas, dan lugar a desviaciones bastante grandes de la idealidad. Los vapores en caso de encontrarse en condiciones cercanas a la del punto de ebullición acusan divergencias considerables a las obtenidas por medio de la hipótesis del gas perfecto. Y, por consiguiente, si se utilizan la ley del gas ideal para efectuar los cálculos, éstos producirían resultados muy diferentes a los obtenidos experimentalmente.

En esencia, los métodos para correlacionar el comportamiento de los gases reales son los siguientes:

- 1.- Métodos deducidos a partir de la teoría de los estados correspondientes.- Están basados en consideraciones de similitud dimensional; en general ofrecen buenos resultados y son los más convenientes para obtener valores de volumen a alguna presión y temperatura o sus combinaciones, con frecuencia involucran el uso de tablas y gráficas.

- 2.- Sistemas de cálculo que emplean un acercamiento más teórico - con constantes directamente relacionadas con la distancia-energía-potencial intermolecular, corresponden a este tipo las -- ecuaciones viriales, descritas en el apéndice.
- 3.- Ecuaciones analíticas de estado. Son capaces de producir las más exactas, pero al mismo tiempo complejas, correlaciones entre la presión, volumen y temperatura.
- 4.- Las gráficas del factor de compresibilidad.
- 5.- Los datos experimentales.

La densidad es expresada convenientemente usando la modificación de la ley del gas ideal:

$$\rho = \frac{I}{V} = \frac{P}{ZRT} \quad \dots\dots (1)$$

A esta correlación se le puede llamar la generalización del modelo ideal, - siendo este último un caso muy particular de la ecuación y como la condición extrema en la que las moléculas de gas se consideran sin volumen y la inexistencia de interacciones entre ellas.

El factor de compresibilidad se define como  $Z = PV/RT$ , para el caso ideal Z vale la unidad, y es función de la temperatura, presión y de la naturaleza de la sustancia. Puede ser deducido a partir de cualquiera de los métodos que relacionan las propiedades P-V-T de los materiales, pero - se les da mayor importancia a las ecuaciones analíticas de estado debido a su notable exactitud y porque pueden ser programadas.

### B),- SISTEMAS LIQUIDOS.

No existe una ley para líquidos perfectos en la cual nos podamos basar para obtener las propiedades volumétricas como en el caso de los gases, ya que todas las técnicas de estimación confiables requieren de cuando menos un dato de densidad, un valor apropiado de volumen crítico o el -

evaluado en el punto normal de ebullición.

PRIMERA VERSION.

1.- Gases: Empleamos una correlación muy simple para evaluar el factor de compresibilidad, es recomendada por Frith (2).

a) Ecuación:  $Z = Z_1 + \Delta Z \dots\dots (2)$

en donde:  $Z_1 = [(1. - Tr)/0.5]^{0.38} [1. + 0.66 (Tr - 0.5)] + 0.27 (Tr)^{4.2} \dots\dots (3)$

si  $Z_c = 0.27$ , entonces:  $\Delta Z = 0.0$

Si  $Z_c \neq 0.27$ , entonces  $\Delta Z = (Z_c - 0.27) (Tr)^4$

$Tr = T/T_c$

$Z_c =$  factor de compresibilidad -

$T =$  temperatura de cálculo, °K      crítico

$T_c =$  temperatura crítica, °K

b) Limitaciones: Únicamente aplicable a temperaturas reducidas menores de 0.97 y mayores o iguales a 0.5

No es muy buena para compuestos polares; falla en las vecindades del punto crítico y sólo se emplea a presiones bajas.

c) Confiabilidad: Si se observan las limitaciones expuestas el error promedio es del 2%.

2.- Líquidos.- La densidad de los líquidos o sus volúmenes específicos son más fáciles de determinar experimentalmente que los volúmenes gaseosos y para la mayoría de los materiales conocidos se dispone de por lo menos una medición. Existen excelentes tabulaciones de datos de densidad en el "Handbook of Chemistry" (9), "Handbook of Chemistry and Physics" (10), "International Critical Tables" (8), "Chemical Engineers' Handbook" (6), "Physical Properties of Chemical Compounds" (26) y "Physico-Chemical Constants of Pure Organic Compounds" (27).

Para la primera versión se utilizó la correlación propuesta por Frith (1), la que se discute a continuación:

a) Ecuación: 
$$\rho_L = (\rho_r + \Delta\rho_r) \rho_c \dots\dots\dots (4)$$

En donde  $\rho_r$  es la densidad reducida en función de la temperatura-también reducida, tiene la forma de un polinomio de sexto grado obtenido a través de un ajuste de datos experimentales, es exclusiva de los compues--tos con  $Z_c$  igual a 0.27.

$$\rho_r = 3.209 + 1.684 (Tr) - 4.891 (Tr)^2 - 1.752(Tr)^3 + 5.021(Tr)^4 - 3.034(Tr)^5 - 4.907(Tr)^6 \dots\dots\dots 5$$

$\Delta\rho_r$  es un término de corrección que incluye el efecto del factor-de compresibilidad crítico, se expresa:

$$\Delta\rho_r = F(0.27 - Z_c) (1. - Tr) / 0.07 \dots\dots\dots (6)$$

Para evaluar la constante F se utiliza la ecuación 5 a la temperatura normal de ebullición y el valor obtenido de  $\rho_r$  se sustituye como F en la ecuación 6.

$\rho_L$ = densidad del líquido, lb/pie <sup>3</sup>	T = temperatura de cálculo, °K
$\rho_r$ = " reducida = $\rho_L/\rho_c$	Tr = " reducida = T/Tc
$\rho_c$ = " crítica, lb/pie <sup>3</sup>	Tc = " crítica, °K

b) Limitaciones: Es válida hasta una temperatura de 0.98 Tc.

c) Confiabilidad: El error reportado para la evaluación de la densidad reducida en la ecuación 5 es menor al 1% y las desviaciones que ocurren en el cálculo de la densidad del líquido están dentro de un 3%.

d) Literatura: (2)

SEGUNDA VERSION.- Compuestos puros.

1.- Gases.- Evaluación del factor de compresibilidad mediante la

Ecuación de Estado de Redlich-Kwong, con las modificaciones de Ackerman y Gray et al..- Se discutirá la ecuación original (R-K) y sus variaciones.

A) Forma original.- Es la ecuación de estado de dos constantes -- más precisa, su forma comúnmente conocida es:

$$\left[ P + \frac{a}{T^{0.5} V(V-b)} \right] (V - b) \cdot RT \dots\dots\dots (7)$$

donde a y b son constantes específicas para cada material puro.

Para introducir en la ecuación 7 al factor de compresibilidad se definen a continuación los coeficientes reducidos A\* y B\* :

$$A^* = \frac{aP}{R^2 T^{5/2}} = \Omega_A \frac{Pr}{Tr^{5/2}} \dots\dots\dots (8)$$

$$B^* = \frac{bP}{RT} = \Omega_B \frac{Pr}{Tr} \dots\dots\dots (9)$$

por tanto  $a = A^* \frac{R^2 T^{5/2}}{P} \dots\dots\dots (10)$

$$b = B^* \frac{RT}{P} \dots\dots\dots (11)$$

en donde:  $\Omega_A = 0.4274802327\dots\dots$

$\Omega_B = 0.086640350 \dots\dots$

y como  $Z = \frac{PV}{RT}$ , entonces:  $V = \frac{RT}{P} \dots\dots\dots (12)$

Sustituyendo las ecuaciones 10, 11 y 12 en la ecuación 7, nos queda:

$$1 = \frac{1}{Z - B^*} - \frac{A}{Z(Z + B^*)} \dots\dots\dots (13)$$

Rearreglando tenemos:

$$Z^3 - Z^2 + (A^* - B^{*'} - B^*) Z - A^* B^* = 0 \dots\dots\dots (14)$$

La ecuación 14 con las expresiones 8, 9 y 12 constituye lo que normalmente se conoce como la ecuación original de Redlich-Kwong.

B) Modificaciones de la ecuación original R-K.

Fueron propuestas para mejorar la exactitud de la ecuación primitiva, los resultados han sido altamente positivos, las más importantes son las siguientes:

1.- Una de las modificaciones más obvias es el cambio del valor numérico de las constantes  $\Omega_A$  y  $\Omega_B$ , de esta manera Cheuh y Prausnitz las hicieron funciones del factor acéntrico,  $\omega$ .

$$\Omega_B = 0.0865 + 0.01325\omega + 0.03125\omega^2 \dots\dots\dots (15)$$

$$\Omega_A = \frac{Zc^3 - Zc^2 - \Omega_B (1 + \Omega_B) Zc}{\Omega_B - Zc} \dots\dots\dots (16)$$

Y Zc viene aproximada como:  $Zc = 0.291 - 0.080\omega \dots (17)$

2.- Otra forma de corregir la ecuación original R-K es por el establecimiento de una función de desviación del tipo:

$$Z = Z_{R-K} + \Delta Z \dots\dots\dots (18)$$

en la cual el término  $Z_{R-K}$  representa el valor del factor de compresibilidad obtenido de la ecuación 14 con las constantes  $\Omega_A$  y  $\Omega_B$  ya definidas.



La función de desviación,  $\Delta Z$ , puede adquirir varias formas:

a) Función de Desviación de Redlich-Ackerman.

$$\Delta Z = Z_1 + \omega Z_2 \dots \dots \dots (19)$$

en donde  $Z_1$  y  $Z_2$ :

$$Z_1 = -A_1 Pr^3 / \{ 1 + A_2 (Tr - 1)^2 + A_3 [Pr - A_4 - A_5 (Tr - 1)^4] \} +$$

$$B_1 Pr (Tr - B_2 - B_3 Pr + B_4 Pr Tr^2) (1 - B_5 Pr + B_6 Tr Pr) / [1 + B_7 (Tr - B_8$$

$$- B_9 Pr - B_{10} Pr Tr^4)] + B_{11} Tr^3 Pr^3 / (Tr^4 + B_{12} Pr^4) \dots \dots \dots (19')$$

$$Z_2 = Tr Pr (Tr - 1 - 0.049 Pr) (C_1 + C_2 Pr - C_3 Tr Pr + C_4 Tr) / [Tr^4 +$$

$$C_5 (Tr - C_6 - C_7 Pr + C_8 Tr Pr)^4] \dots \dots \dots (19'')$$

Los valores de las constantes son:

$A_1 =$	0.035	$B_5 =$	0.144392	$C_1 =$	0.825714
$A_2 =$	14,137.6	$B_6 =$	0.00704658	$C_2 =$	0.00736587
$A_3 =$	1,397.124	$B_7 =$	616.830	$C_3 =$	0.00255204
$A_4 =$	1.030	$B_8 =$	1.00122	$C_4 =$	0.00115729
$A_5 =$	13.440	$B_9 =$	0.0112141	$C_5 =$	0.101212
$B_1 =$	0.00260913	$B_{10} =$	0.0495574	$C_6 =$	2.46596
$B_2 =$	3.19325	$B_{11} =$	0.000442593	$C_7 =$	0.220411
$B_3 =$	1.77486	$B_{12} =$	0.0602768	$C_8 =$	0.0161963
$B_4 =$	0.434418				

b) Función de desviación de Gray, Rent y Zudkevitch.

$$\Delta Z = D_1 Tr^2 Pr^2 \exp \{- [7000 (1 - Tr)^2 + 770 (1.02 - Pr)^2]\} +$$

$$\omega [-0.464419 + 0.424568 Tr^2] \times [Pr / (Tr^4 + Pr^4)] + \omega [D_3 + D_4 Tr$$

$$[Pr^2 / ((1 + Tr)^4 + Pr^4)] + [D_2 + \omega (D_5 + D_6 Tr)] [Pr^3 / ((1 + Tr)^4 +$$

$$Pr^4)] \dots \dots \dots (20)$$

donde las constantes están dadas por:

$$\begin{array}{ll} D_1 = -0.04666626 & D_4 = 40.47298767 \\ D_2 = -0.11386032 & D_5 = 12.55135462 \\ D_3 = -41.76451266 & D_6 = -12.55831122 \end{array}$$

Discusión de los métodos de obtención del factor de compresibilidad por la ecuación R-K y sus modificaciones.

Para llevar a cabo la comparación de las 4 formas se utilizaron los valores del factor de compresibilidad encontrados en las tablas de --- Pitzer a las condiciones siguientes:

a) Para  $T_r = 1.0$ ,  $\omega = 0.2$ .- Observaciones: A bajas presiones todas las ecuaciones concuerdan bien con los valores tabulados; a presiones más altas se encontraron algunas divergencias, pero las expresiones de Ackerman Redlich y Gray et al. fueron claramente mejores aunque todas las formas -- muestran ciertas desviaciones en la inmediata vecindad del punto crítico.

b) Para  $T_r = 1.2$ ,  $\omega = 0.2$ .- Observaciones: A  $P_r \sim 2$  y mayores la ecuación de Gray et al. no debe emplearse.

3) Para  $T_r = 4$ ,  $\omega = 0.2$ .- Observaciones: Todos los métodos producen resultados satisfactorios hasta  $P_r \sim 2$ , (en adelante) la ecuación de --- Ackerman-Redlich es la mejor.

b) Limitaciones.- La modificación de Gray et al. sólo es aplicable cuando se tienen presiones reducidas menores que 2. La correlación de Ackerman-Redlich funciona mejor a presiones reducidas mayores de 2.

c) Confiabilidad.- Las 4 versiones de la ecuación R-K son bastante aproximadas, pero destacan sobre el resto las desarrolladas por Redlich Ackerman y Gray et al., cada una dentro de sus limitaciones.

d) Literatura.- (28), (29), (30), (31), (32).

2.- Líquidos.- Método de Goldhammer modificado (método de la tensión superficial).

Esta correlación, en su forma original, tiene la forma:

$$\rho_L - \rho_v = a (1 - Tr)^{21} \dots \dots \dots (21)$$

en la cual la constante  $a$  parece ser proporcional a la densidad crítica, - algunos autores indican que vale alrededor de 3.5 y para sustancias polares puede estimarse a través de una función compleja de  $\rho_c$ .

Pero una forma a todas luces más útil de la ecuación es la que resulta de la eliminación del parámetro  $a$  sustituido por otro que pueda ser evaluado a partir de un dato confiable de densidad, así obtenemos:

a) Ecuación: 
$$\rho_L = \rho_v + \rho_1 \left[ 1 - \frac{T}{T_c} \right]^{0.1} \dots \dots \dots (22)$$

en donde  $\rho_1$  es el parámetro mencionado y es característico de cada material,  $\rho_v$  es la densidad del vapor y se toma como:

$$\log \frac{\rho_v}{\rho_{v,b}} = 5 \left[ \frac{T}{T_b} - 1 \right] \dots \dots \dots (23)$$

y la densidad en el punto normal de ebullición,  $\rho_{v,b}$  está dada por la relación:

$$\rho_{v,b} = \frac{M}{(82.06) T_b} \dots \dots \dots (24)$$

en estas ecuaciones  $\rho_L$  = densidad del líquido, g/cm<sup>3</sup>

$\rho_v$  = densidad del vapor, g/cm<sup>3</sup>

$\rho_{v,b}$  = " " " en el punto normal de ebullición, g/cm<sup>3</sup>

$T$  = temperatura de cálculo, °K                       $M$  = peso molecular.

$T_c$  = temperatura crítica, °K                       $\rho_1$  = constante.

$T_n$  = temperatura normal de ebullición, °K

b) Limitaciones.- Produce errores promedio del 1% a temperaturas de  $0.85 T_c$ , a temperaturas mayores aumenta hasta un 2 ó 5%. Válida a presiones moderadas.

c) Confiabilidad.- La correlación, probada en 136 compuestos orgánicos, muestra un promedio de desviación de  $\pm 2\%$  para un amplio intervalo de temperaturas.

d) Literatura.- (1), (12).

## 2.- Mezclas.-

2.1.- Sistemas gaseosos.- Nuevamente se dispuso de la ecuación de estado de Redlich-Kwong con sus modificaciones. Usualmente, aunque no --- siempre, los autores de las correcciones a la ecuación original R-K han sugerido técnicas propias de mezclado adecuadas a su expresión, las que se exponen a continuación:

Reglas de Mezclado aplicables a la ecuación de estado de Redlich-Kwong y sus modificaciones:

--- Ecuación original R-K.- Las constantes  $A^*$  y  $B^*$  utilizadas en la ecuación 14 se expresan en el caso de mezclas:

$$(A^*)^{1/2} = \sum_i x_i (A^*)^{1/2}_i \dots \dots \dots (25) ; \quad B^*_{m} = \sum_i x_i B^*_i \dots \dots (26)$$

en donde  $A^*_i$  y  $B^*_i$ , para cada componente, están dados por las ecuaciones 8 y 9 con  $P_r$  y  $T_r$  determinados por el empleo de las propiedades críticas de cada contribuyente puro;  $x_i$  es la fracción mol de cada individuo de la mezcla.

--- Modificación de Cheuh y Prausnitz.- Son discutidas por Reid y

Evans (5).

--- Función de desviación de Redlich-Ackerman.- La ecuación 18 es la relación base y la expresión de las reglas pseudocríticas aplicables a  $T_c$ ,  $P_c$  y  $\omega$  son:

$$T_{c_m} = (E^2 D / F)^{2/3} \dots\dots\dots (27)$$

$$P_{c_m} = (E D^{5/4} / F^{5/4})^{4/3} \dots\dots\dots (28)$$

$$\omega_m = C / F \dots\dots\dots (29)$$

donde C, D, E y F se definen como:

$$F = \sum_j x_j T_{c_j} / P_{c_j}$$

$$C = \sum_j x_j \omega_j T_{c_j} / P_{c_j}$$

$$E = \sum_j x_j T_{c_j}^{5/4} / P_{c_j}^{1/2}$$

$$D = 1 + (1/2) [(C/F) - \sum_j x_j \omega_j]$$

--- Forma modificada de Gray-Rent-Zudkevitch.- Como la anterior, la ecuación 18 es la expresión básica y la ecuación 20 se utiliza para obtener la función de desviación, para este caso las constantes pseudocríticas son deducidas de la siguiente manera:

$$T_{c_m} = \left[ \frac{[\sum_j x_j (T_{c_j}^{5/2} / P_{c_j})^{1/2}]^2}{\sum_j x_j T_{c_j} / P_{c_j}} \right]^{2/3} \dots\dots\dots (30)$$

$$P_{c_m} = T_{c_m} / \sum_j x_j T_{c_j} / P_{c_j} \dots\dots\dots (31)$$

$$\omega_m = \sum_j x_j \omega_j \dots\dots\dots (32)$$

b) Limitaciones.- Son semejantes a las mencionadas para compuestos puros.

c) Confiabilidad.- La exactitud obtenida es la que normalmente se

espera de una ecuación de estado más complicada.

d) Literatura.- (3)

2.2.- Sistemas líquidos.- Método de Yen-Woods.- Sus ecuaciones están basadas en las correlaciones gráficas y tabulares desarrolladas por Lydersen, Greekorn y Hougen. Aunque estas ecuaciones son muy engorrosas para usarlas en cálculos a mano, son ideales para ser tratadas por medio de programas de computadora. Yen y Woods modificaron esta correlación mejorando su precisión y expresando los resultados analíticamente, y así obtuvieron:

a) Ecuación.- 
$$\frac{\rho_s}{\rho_c} = 1 + \sum_{j=1}^4 K_j (1 - Tr)^{1/3} \dots\dots\dots(33)$$

en donde:  $K_1 = 17.4425 - 214.578Z_c + 989.625(Z_c)^2 - 1522.06(Z_c)^3$   
 $K_2 = -3.28257 + 13.6377Z_c + 107.4844(Z_c)^2 - 384.211(Z_c)^3$ , si  $Z_c \leq 0.26$   
 $K_2 = 60.2091 - 402.063Z_c + 501.0(Z_c)^3$ , si  $Z_c > 0.26$   
 $K_3 = 0$   
 $K_4 = 0.92 - K_2$

Para determinar las densidades del líquido no saturado a presiones más altas que la presión de vapor se propuso la siguiente ecuación:

$$(\rho - \rho_s) / \rho_c = \Delta\rho_r + \delta Z_c \dots\dots\dots (34)$$

El primer término del miembro derecho es la corrección por la diferencia de presión:  $\Delta Pr = (P - P^o) / P_c$  para compuestos cuya  $Z_c = 0.27$ ; - el segundo término corrige las variaciones cuando  $Z_c \neq 0.27$ , por tanto si  $Z_c = 0.27$  entonces  $\delta Z_c = 0.0$ .

Así, el valor de  $\Delta\rho_r$  queda como sigue:

$$\Delta\rho_r = E + F \ln \Delta Pr + G \exp(H\Delta Pr) \dots\dots\dots (35)$$

Las constantes E, F, G y H se dan como funciones de Tr:

$$E = 0.714 - 1.626(1 - \text{Tr})^{1/3} - 0.646(1 - \text{Tr})^{2/3} + 3.699(1 - \text{Tr}) - 2.198(1 - \text{Tr})^{4/3}$$

$$F = 0.268\text{Tr}^{2.0967} / [1 + 0.8 (-\ln\text{Tr})^{0.441}]$$

$$G = 0.05 + 4.221(1.01 - \text{Tr})^{0.75} \exp [-7.848(1.01 - \text{Tr})]$$

$$H = -10.6 + 45.22(1 - \text{Tr})^{1/3} - 103.79(1 - \text{Tr})^{2/3} + 114.44(1 - \text{Tr}) - 47.38(1 - \text{Tr})^{4/3}$$

Si P/Pc es menor que 0.2 no se usa la ecuación 35 y en su lugar-- se utiliza la ecuación 36, que es:

$$\Delta\rho_r = [ \Delta\rho_r @ P_r = 0.2 ] [ \Delta\text{Pr}/0.2 ] \dots\dots\dots (36)$$

Si Zc es diferente de 0.27,  $\delta Z_c$  no vale 0 y se calcula:

$$\delta Z_c = I + J \ln \Delta\text{Pr} + K \exp(L \Delta\text{Pr}) \dots\dots\dots (37)$$

Donde I, J, K y L son:

$$I = a_1 + a_2(1 - \text{Tr})^{1/3} + a_3(1 - \text{Tr})^{2/3} + a_4(1 - \text{Tr}) + a_5(1 - \text{Tr})^{4/3}$$

$$J = b_1 + b_2(1 - \text{Tr})^{1/3} + b_3(1 - \text{Tr})^{2/3} + b_4(1 - \text{Tr}) + b_5(1 - \text{Tr})^{4/3}$$

$$K = c_1 + c_2\text{Tr} + c_3(\text{Tr})^2 + c_4(\text{Tr})^3$$

$$L = d_1 + d_2(1 - \text{Tr})^{1/3} + d_3(1 - \text{Tr})^{2/3} + d_4(1 - \text{Tr}) + d_5(1 - \text{Tr})^{4/3}$$

Los parámetros para evaluar las constantes I, J, K y L se detallan en la tabla:

	Zc = 0.29	Zc = 0.25	Zc = 0.23
a <sub>1</sub>	- 0.0817	0.0933	0.0890
a <sub>2</sub>	0.3274	- 0.3445	- 0.4344
a <sub>3</sub>	- 0.5014	0.4042	0.7915
a <sub>4</sub>	0.3870	- 0.2083	- 0.7654
a <sub>5</sub>	- 0.1342	0.05473	0.3367
b <sub>1</sub>	- 0.0230	0.0220	0.0674
b <sub>2</sub>	- 0.0124	- 0.003363	- 0.06109
b <sub>3</sub>	0.1625	- 0.07960	0.06261
b <sub>4</sub>	- 0.2135	0.08540	- 0.2368
b <sub>5</sub>	0.08643	- 0.02170	0.1665
c <sub>1</sub>	0.05626	0.01937	- 0.01393
c <sub>2</sub>	- 0.3518	- 0.03055	- 0.003459
c <sub>3</sub>	0.6194	0.06310	- 0.1611
c <sub>4</sub>	- 0.3809	0.	0.
d <sub>1</sub>	-21.0	- 16.0	- 6.550
d <sub>2</sub>	55.174	30.699	7.8027
d <sub>3</sub>	-33.637	19.645	15.344
d <sub>4</sub>	-28.100	- 81.305	-37.04
d <sub>5</sub>	23.277	47.031	20.169

Parece obvio que este método es inapropiado para utilizarlo sin la ayuda de la computadora.

Las propiedades pseudocríticas, recomiendan los autores, son evaluadas por medio de las reglas modificadas de Prausnitz-Gunn:

$$Tc_m = \sum_j x_j Tc_j \dots\dots (38) \quad \text{y} \quad Pc_m = R \sum_j x_j Zc_j \sum_j x_j Tc_j / \sum_j x_j Vc_j \dots\dots (39)$$

b) Limitaciones.- Prácticamente no las tiene, su validez abarca todo el intervalo de temperatura (del punto de fusión hasta muy cercanas al punto crítico) y soporta con mucho éxito las altas presiones.



c) Confiabilidad.- Se han hecho pruebas con casi 100 líquidos polares y no polares, saturados y no saturados, desde temperaturas cercanas al punto de fusión hasta las vecindades del punto crítico, con presiones--reducidas de alrededor de 30. y los errores ordinariamente son menores de 3 al 6%. Para el caso de las mezclas las desviaciones son ligeramente mayores.

En general, los valores estimados son menores que los determinados experimentalmente.

d) Literatura.- (3), (21), (33).

#### 2.6.d.- CALOR LATENTE DE VAPORIZACION.

El calor latente de vaporización es el nombre con el que comunmente se designa a la entalpia de vaporización,  $\Delta H_v$ .

DEFINICION.- Es el cambio de entalpia para la conversión de fase entre el estado líquido y el vapor. Aunque esa variación requiere de una absorción de calor no se involucra un aumento notable de temperatura.

TEORIA.- Debido a las fuerzas de atracción entre las moléculas -- del líquido, de éstas solamente escapan a la fase vapor aquellas que poseen una velocidad promedio y energía superior al resto. La energía promedio de las demás moléculas en el líquido es reducida y es aprovechada para mantener constante la temperatura. A esta energía se le denomina: energía interna de vaporización,  $\Delta E_v$ . En este proceso se está efectuando un trabajo sobre la fase gaseosa conforme la evaporación procede ya que el volumen del vapor se incrementa si se mantiene constante a la presión de vapor en esas condiciones, dicho trabajo es igual a  $P^0 (V_g - V_l)$ .

Dado que la naturaleza de las fuerzas intermoleculares de los líquidos no ha sido bien estudiada, no se encuentran relaciones teóricas que describan adecuadamente la liga entre la  $\Delta E_v$  ó la  $\Delta H_v$  con las propiedades moleculares, sin embargo, se han tratado de establecer similitudes de esas

fuerzas intermoleculares de atracción con los potenciales de Lennard-Jones, entre otros que puedan servir como base para obtener correlaciones.

DISCUSION.- Se han propuesto cerca de 100 ecuaciones para evaluar esta propiedad, las hay con bases teóricas y las obtenidas empíricamente.- La experiencia ha demostrado que para la estimación del calor latente las correlaciones teóricas fallan con frecuencia (34). Las ecuaciones semiempíricas pueden predecir los calores latentes con muy buena exactitud y las hay de muchos grados de complejidad, con requerimientos de datos muy variados: algunas sólo necesitan el peso molecular y una constante, otras se sirven de un dato de presión de vapor y finalmente aquellas que se valen de las constantes críticas.

PRIMERA VERSION.- Se propuso la ecuación de Procopio y Jen Su, -- las que es recomendada por Frith (2)

$$a) \text{ Ecuación: } \Delta H_{v_b} = 2.034 T_b \ln(P_c) \left\{ \frac{1 - (1/P_c)}{1 - (T_b/T_c)} \right\}$$

donde:  $\Delta H_{v_b}$  = entalpia de vaporización al punto normal de ebullición, -- BTU/lb.

$T_b$  = temperatura normal de ebullición, °K

$T_c$  = temperatura crítica, °K.

$P_c$  = presión crítica, atm.

Para calcular el calor latente a cualquier temperatura se emplea la relación de Watson:

$$\Delta H_v = \Delta H_{v_b} \left\{ \frac{1 - Tr}{1 - (T_b/T_c)} \right\}^{0.33} \dots \dots \dots (2)$$

en donde:  $\Delta H_v$  = calor latente de vaporización a cualquier temperatura, BTU/lb

$Tr$  = temperatura reducida,  $T/T_c$ .

$T$  = temperatura de cálculo, °K.

b) Limitaciones.- Aplicable a la mayoría de los compuestos, orgánicos e inorgánicos.

c) Confiabilidad.- Se reporta un error promedio del 1.85% en 114 sustancias que se probaron (de todo tipo) para la ecuación I. En tanto -- que para la correlación de Watson el porcentaje de desviación es del 4% para todo tipo de compuestos y todo el intervalo de temperatura.

d) Literatura.- (34), (2), (1), (35)

SEGUNDA VERSION.- Como no se sustituyó la ecuación de Procopio y Jen Su no se puede hablar de segunda versión.

#### 2.6.e.- PRESION DE VAPOR.

DEFINICION.- Presión de vapor es la presión a la cual la fase vapor de una sustancia está en equilibrio con la fase líquida de esa sustancia a una determinada temperatura.

TEORIA.- La presión de vapor de un líquido depende de la magnitud de las fuerzas de atracción que actúan entre sus moléculas. Estas fuerzas son función del tamaño de la molécula, su forma y composición. A una temperatura dada todos y cada uno de los líquidos poseen una sola presión de vapor y un solo calor latente de vaporización, y sin embargo, el calor de vaporización decrece y la presión de vapor se incrementa con la temperatura, entonces la función que relacione a ambas variables debe ser compleja.

DISCUSION.- El término es comunmente aplicado a sustancias puras pero también, aunque ocasionalmente, es usado en mezclas. Casi todos los datos de presión de vapor son expresados en la forma:  $P^o = f(T)$ , pero podrían estar relacionados a cualquier otra propiedad intensiva del líquido o del vapor saturado.

Una correlación que es aplicable al equilibrio vapor-líquido aunque ordinariamente es difícil de usar es la ecuación de Clapeyron desarrollada a partir de un tratamiento rigurosamente termodinámico, esta ecuación

presupone los conocimientos detallados de las variaciones del calor latente de vaporización, el volumen del gas y el correspondiente al líquido con la temperatura.

La ecuación de Clapeyron:

$$\frac{dP^{\circ}}{dT} = \frac{\Delta H_v}{T \Delta V_v} = \frac{\Delta H_v}{(RT^2/P^{\circ}) \Delta Z_v} \dots\dots\dots (1)$$

Por tanto:

$$\frac{d(\ln P^{\circ})}{d(1/T)} = - \Delta H_v/R \Delta Z_v \dots\dots\dots (2)$$

La clave de la integración de la ecuación 2 es evaluación de la razón  $\Delta H_v/\Delta Z_v$ ; como una primera aproximación se le considera constante, -- así la ecuación 2 se escribe:

$$\ln P^{\circ} = A + B/T \dots\dots\dots (3)$$

Si se grafica el logaritmo de la presión de vapor contra el recíproco de la temperatura absoluta se origina una línea recta. Frecuentemente la ecuación 3 no es una mala aproximación, pero por lo general, las líneas obtenidas presentan alguna curvatura causada por las variaciones de la razón  $\Delta H_v/\Delta Z_v$  con la temperatura.

Cualquier correlación que trate de representar la presión de vapor de compuestos reales debe incluir la curvatura antes mencionada, por lo tanto, las ecuaciones más aceptables son de alguna manera complejas.

Todas las técnicas para estimar la presión de vapor tienen semejanzas con la ecuación de Clapeyron, desde su descubrimiento se han dedicado los físicos, químicos e ingenieros químicos a modificar la correlación. En cada intento se aplican empirismos para simplificar, generalizar o ayudados por la termodinámica y la teoría molecular hacer más exacta dicha expresión.

PRIMERA VERSION.- No fue implementada esta propiedad en esta etapa.

SEGUNDA VERSION.- La estimación de la presión de vapor se divide - en 2 secciones:

1.- Para el intervalo de presiones entre 10 y 1500 mmHg se utiliza la ecuación semirreducida de Miller.-

$$\text{a) Ecuación.- } \log P^{\circ} = \frac{k}{T_r} [ T_r^2(0.60706T_r - 1.44779) - I_b T_r - 0.98045 ] \dots\dots (1)$$

en donde:

$$I_b = - 1.44779 \left\{ \frac{(T_n/T_c)^2 - 1}{T_b/T_c} \right\} + 0.60706 \left\{ \frac{(T_n/T_c) - 4}{T_n/T_c} \right\} \dots\dots (2)$$

$$k = \frac{\Delta H_v @ T'}{2.303 R T_c(1 - T_r')^{0.38}} \dots\dots (3)$$

$P^{\circ}$  = presión de vapor, atm.

$T_r$  = temperatura reducida,  $T/T_c$ .

$T$  = temperatura de Cálculo, °K.

$T_c$  = temperatura crítica, °K.

$T_b$  = temperatura normal de ebullición, °K.

$\Delta H_v @ T'$  = calor latente de vaporización a una temperatura arbitraria -  $T'$ , cal/g-mol.

$R$  = 1.987

b) Limitaciones.- Sólo aplicable en el intervalo de 10 a 1500 mmHg, válida para la mayoría de los compuestos.

c) Confiabilidad.- A partir de 1000 datos experimentales de 71 -- sustancias, entre los que se encontraban 18 compuestos inorgánicos y 53 orgánicos (45 no polares y 8 polares) el error promedio fue del 2.9%.

d) Literatura.- (1), (36).

2.- Presión de vapor evaluada a temperaturas superiores a la normal de ebullición.- Ecuación reducida de Riedel, Plank y Miller.- Diseñada especialmente para esta región.

a) Ecuación.- 
$$\log P^{or} = - \frac{G}{Tr} [ 1 - Tr^{2.1} + k(1 - Tr)^3 ] \dots (4)$$

en donde:  $G = 0.2271 + 0.19654 a$

$$a = \frac{(T_b/T_c) \ln(P_c)}{1 - (T_b/T_c)}$$

$$k = \left[ \frac{a}{G} - (1 - (T_b/T_c)) \right] / (1 - (T_b/T_c))^2$$

$P^{or}$  = presión de vapor reducida =  $P^o/P_c$

Los demás términos se definen como arriba.

b) Limitaciones.- Puede aplicarse a cualquier temperatura, aún a presiones menores de 1500 mmHg, mediante el cambio apropiado de las constantes de la ecuación 5. Su validez se extiende a un número muy grande de sustancias.

c) Confiabilidad.- De 250 valores obtenidos experimentalmente para 24 compuestos se encontró un porcentaje de desviación del 1.54 %.

d) Literatura.- (1), (36)

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

2.G.f.- TENSION SUPERFICIAL.

DEFINICION.- La tensión superficial puede considerarse como la ---tendencia de un líquido a disminuir su superficie. Esta tendencia es el --resultado del desbalanceo de las fuerzas de atracción a las que están sujetas las moléculas que forman la interfase líquido-gas, cuya fuerza neta en-

dirección al interior tiende a contraer al líquido a su área más pequeña - compatible con la masa del material y las paredes del recipiente que lo -- contiene.

TEORIA.- La interfase gas-líquido puede, en cierta manera, ser -- considerada una tercera fase con propiedades intermedias entre las del gas y las propias del líquido. Existen grandes gradientes de densidad y de -- energía molecular y el grosor efectivo de la película es solamente de unas pocas moléculas, estas grandes diferencias en las características del material definen los desequilibrios de las fuerzas superficiales, así tenemos -- que dentro del cuerpo de un líquido alrededor de una molécula actúan atracciones casi simétricas; en la superficie, sin embargo, dicha molécula se - encuentra sólo parcialmente rodeada por otras semejantes y, en consecuencia, experimenta una atracción hacia el seno del líquido. Esta atracción tiende a arrastrar las moléculas superficiales hacia el interior, es el efecto responsable de la resistencia que un líquido presenta a la penetración superficial.

DISCUSION.- A la tensión superficial se le ha tratado de relacionar con otras propiedades de los líquidos, tales como compresibilidad, calor latente de vaporización, presión de vapor, volumen molecular y el índice de refracción, a través de los diversos intentos por encontrar un método de estimación preciso, pero los resultados no han sido satisfactorios.

Experimentalmente, se ha encontrado que la mayoría de los materiales orgánicos poseen valores de tensión superficial entre 24 y 40 dinas/cm a temperatura ambiente, algunos escapan a este intervalo como lo son ciertos alcoholes y fluorocarbonos. Para los metales líquidos es de 300 a 600 dinas/cm y para el agua a 20°C de 72.75 dinas/cm.

PRIMERA VERSION.- No se llevó a cabo para esta propiedad.-

SEGUNDA VERSION.- En vista del problema que se presenta en la estimación de esta propiedad para determinados compuestos buscamos una correlación que basada en por lo menos 2 determinaciones experimentales, ajustara

los valores de la tensión superficial en un intervalo de temperatura conveniente. De esta forma se propuso la ecuación de Mitra-Sanyal, expresada - así:

a) Ecuación.- 
$$\sigma = (A - B \cdot T)^{1.2}$$

en donde A y B son constantes evaluadas por dos valores experimentales de  $\sigma$ .

T = temperatura de cálculo, °K.

$\sigma$  = tensión superficial, dinas/cm.

b) Limitaciones.- Debe tenerse mucho cuidado en extrapolaciones a temperaturas cercanas al punto crítico, así como al aplicar presiones elevadas, debido a que en esos casos los efectos de solubilidad y adsorción - del gas en el material líquido adquieren importancia notable.

c) Confiabilidad.- En la medida que la temperatura de cálculo esté más próxima a aquellas que se utilizaron para determinar las constantes la precisión que se alcance será mayor.

Para 321 compuestos orgánicos de prueba dio un error promedio del 0.5 %, para 25 sustancias inorgánicas: 2.5 %.

d) Literatura.- (12)

## 2.6.g.- V I S C O S I D A D.

DEFINICION.- Viscosidad es una medida que tienen los fluidos para resistir una fricción interna que tiende a oponerse a cualquier cambio dinámico en el movimiento del mismo.

Newton presenta una ley para definir en forma matemática este mecanismo de Transporte ocasionado por el movimiento molecular. Así, cuando la fricción interna del fluido (en capas) sobre cualquier elemento de



volumen en movimiento es proporcional al gradiente de velocidad en la dirección perpendicular ( $y$ ) a la del fluido, éste es llamado "Fluido Newtoniano", es decir, al establecerse el perfil de velocidad ( $v$ ) en el régimen estacionario es necesario aplicar una fuerza constante  $F$  para conservar el movimiento de la capa inferior del fluido. Esta fuerza viene dada por:

$$\frac{F}{A} = \mu \frac{v}{y}$$

o sea, que la fuerza por unidad de área es proporcional a la disminución de la velocidad con la distancia  $y$ . La constante de proporcionalidad  $\mu$  se denomina VISCOSIDAD del fluido.

TEORIA.- Para poder expresar en forma más explícita el concepto de viscosidad es necesario hacer mención del concepto "esfuerzo cortante" el cual se ejerce en una dirección  $-x$  sobre la superficie de un fluido situado a una distancia constante  $-y$ , así en la región donde el fluido existente es menor se le denomina como  $\tau_{yx}$ , y el componente  $-x$  del vector velocidad del fluido por  $V_x$ . Así

$$\tau_{yx} = -\mu \frac{dv_x}{dy}$$

Existen los llamados fluidos "No-Newtonianos" y son los que no cumplen con esta relación entre sí. Entre ellos se cuentan los polímeros, pastas, suspensiones, etc.

Nuestro sistema esta programado para trabajar unicamente con fluidos Newtonianos como gases, hidrocarburos líquidos e inorgánicos líquidos sencillos.

De la expresión anterior las unidades correspondientes serían:

$$\zeta_{\eta} = \text{dina cm}^{-2}$$

$$v_x = \text{cm seg}^{-1}$$

$$y = \text{cm}$$

por lo tanto,

$$\begin{aligned} \eta &= -\zeta_{\eta} \left( \frac{dv_x}{dy} \right)^{-1} = ( \text{g cm}^{-1} \text{seg}^{-2} ) ( \text{cm seg}^{-1} \text{cm}^{-1} )^{-1} \\ &= \text{g cm}^{-1} \text{seg}^{-1} \\ &= 1 \text{ poise} \end{aligned}$$

La viscosidad es una función directa de la Temperatura, Presión y estructura molecular del fluido. En todos los líquidos Newtonianos la viscosidad decrece con un aumento en la temperatura a presión constante. Gran cantidad de correlaciones de compuestos líquidos están expresadas en función únicamente de la temperatura.

Respecto a los gases su viscosidad aumenta con la temperatura a presión constante. Este comportamiento va ligado al comportamiento cinético de los gases la que predice que la viscosidad es proporcional a la densidad, la velocidad promedio de las moléculas y el camino libre medio de las mismas. Cuando al aumentar la temperatura a presión constante la densidad disminuye, lo hace a una razón considerablemente menor que la razón a la cual la velocidad y el camino libre medio aumentan, dan como resultado que la viscosidad aumente con la temperatura.

A temperatura arriba del punto normal de ebullición la presión del líquido es la presión de saturación. Así los compuestos líquidos aumentan su viscosidad con la presión a temperatura constante. Sin embargo, abajo de la presión crítica el efecto de la presión es pequeño. La viscosidad de gases siempre aumenta con la presión.

De acuerdo con la teoría cinética de los gases su viscosidad debería ser independiente de la presión. Esto es cierto solo para gases reales a temperaturas reducidas altas y presiones reducidas bajas.

Los datos de viscosidad son muy empleados ya sea en forma directa o en números adimensionales tales como:

$$R_e = \frac{Dv \rho}{\mu} \quad \text{No. de Reynolds}$$

$$P_r = \frac{C_p \mu}{k} \quad \text{No. de Prandtl}$$

$$S_c = \frac{\mu}{\rho D_{AB}} \quad \text{No. de Schmidt}$$

entre otros.

#### PRIMERA VERSION.

Siendo 55 los compuestos seleccionados y del tipo no-Newtonianos (líquido y gas) se escogieron aquellas correlaciones que nos proporcionarían un mínimo de error y fueran fácilmente adaptables al lenguaje Fortran-IV, de esta forma de entre las correlaciones disponibles para la Viscosidad (ver Apéndice II-I) las siguientes fueron tratadas:

#### SISTEMA GASEOSO.- Comentarios del método.

Discusión.- El método está basado en datos de colisión integral de gases. Dichos datos fueron aplicados por Wilke y Lee en una ecuación polinomial de 6to. grado.

#### Ecuación de Hirschfelder, Bird y Spatz.- Gases

$$\mu_j = \frac{6.46 \times 10^{-3} (MT)^{0.5} I_{jk}}{(r_c)^2}$$

donde:

$$I_{\mu} = 0.25277 + 0.28345 \left( \frac{TK}{\epsilon} \right) - 0.30566 \left( \frac{TK}{\epsilon} \right)^2 - 0.16963 \left( \frac{TK}{\epsilon} \right)^3 \\ - 0.19647 \left( \frac{TK}{\epsilon} \right)^4 + 0.20887 \left( \frac{TK}{\epsilon} \right)^5 - 0.05473 \left( \frac{TK}{\epsilon} \right)^6$$

$I_{\mu}$  = cohesión integral

$r_{ca}$  =  $1.18 (V_0)^{1/3}$  = diámetro de colisión, ft/mol

$\frac{c}{K}$  =  $0.77T_c$  = Fuerza constante, °K

$\mu_g$  = viscosidad del gas, centipoises

M = peso molecular

T = temperatura, °K

$T_c$  = temperatura crítica, °K

$V_0$  = volumen molal al punto normal de ebullición, ft<sup>3</sup>/mol

LIMITACIONES.- Se aplica a un gran número de hidrocarburos (incluyendo los de este programa) y algunos inorgánicos - (excepto O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> para los cuales el error es mayor). Los rangos de aplicabilidad son extensos sin llegar a condiciones cercanas a las críticas.

CONFIABILIDAD.- Dentro de condiciones normales el error promedio -- esperado es menor al 3%.

LITERATURA.- (2), (37)

SISTEMA LIQUIDO.- Comentarios del método.

Discusión.- Debido a la escasez de técnicas desarrolladas para el cálculo de la viscosidad de líquidos a partir de propiedades moleculares o estructurales es necesario hacer estimaciones empíricas como es el caso de la Ecuación de Thomas ampliamente utilizada para cálculos ingenieriles.

Ecuación de Thomas.- Líquidos.

$$\mu_L = (0.1667 (\xi_L)^{0.5}) 10^\alpha$$

donde:

$\mu_L$  = viscosidad del líquido, centipoises

$$\xi_L = \sqrt{\mu_{LBP}/0.2838} \times 59.81$$

$$\mu_{LBP} = 0.275 (\text{s.g.})^{0.5} = \text{viscosidad al punto normal de ebullición}$$

s.g. = gravedad específica, adimensional

$$\alpha = \beta (1 - T_r) / T_r$$

$$T_r = T / T_c, \text{ } ^\circ\text{K ambas.}$$

Las constantes  $\alpha$  y  $\beta$  se evaluaron usando datos de la viscosidad en el punto normal de ebullición y con la resolución de ecuaciones simultáneas.

LIMITACIONES.- Es muy aceptable a temperaturas normales de trabajo (abajo del punto de ebullición). Además los errores son un poco altos debido al cálculo por contribución de grupo. La  $T_r$  debe ser menor o igual a 0.7.

CONFIABILIDAD.-

Compuesto	Número de Compuestos	Error %
Orgánicos	523	-32.1 ± 82.3
Orgánicos Polares	423	-13.6 ± 81.3
Orgánicos asociados (H <sub>2</sub> )	103	-73.9 ± 41.8
Orgánicos polares no asociados	318	-0.5 ± 32.6
Orgánicos no polares	100	-13.6 ± 76
Inorgánicos	19	-70.4 ± 63.5

LITERATURA.- (2).

## SEGUNDA VERSION.

MODIFICACIONES.- Una vez comparados los datos obtenidos en la primera versión contra los experimentales se encontraron valores aceptables en condiciones normales. El problema se presentó a condiciones cercanas a las críticas. Algunos hidrocarburos se desviaron de la realidad hasta un 50% y en el caso de los inorgánicos como el  $O_2$  se encontraron valores negativos de viscosidad debidos al término de 6to. grado de la ecuación. Por ésta razón se sustituyeron las correlaciones de ambos estados físicos por correlaciones que emplearan valores experimentales y constantes específicas quedieran una gran aproximación.

SISTEMA GASEOSO.- Comentarios del método.

DISCUSION.- Se escogieron dos correlaciones empíricas para cubrir todo el rango de temperatura. Una de ellas para condiciones abajo de las críticas (temperatura) y otra para condiciones superiores.

Condiciones inferiores a las críticas.- Gases

$$\frac{\mu}{\mu^0} = \left( \frac{T}{273.1} \right)^n$$

donde:

$\mu$  = viscosidad, cp

$\mu^0$  = viscosidad a  $0^\circ C$ , cp

$n$  = constante determinada con un juego de datos de  $\mu^0$  y  $T_c$ .

Método de Sutherland.- Condiciones superiores a las críticas.

$$\frac{\mu}{\mu^0} = \frac{273.1 + C}{T + C} \left( \frac{T}{273.1} \right)^{2.75}$$

donde:

$\mu$  = viscosidad del gas, cp

$\mu_0$  = viscosidad a 0°C, cp

T = Temperatura, °K

C = constante evaluada mediante datos disponibles o tabulados.

**LIMITACIONES.**- Ambas correlaciones concuerdan correctamente con los valores experimentales para una gran cantidad de gases (orgánicos e inorgánicos) tanto a temperaturas bajas como por encima de la temperatura crítica. Para el caso del Hidrógeno y Helio es preferible utilizar el método de Sutherland.

**CONFIABILIDAD.**- Por ser métodos basados en datos experimentales -- dan resultados muy próximos a la realidad ya que el error esperado es menor al 5%.

**LITERATURA.**- (38), (1), (6)

**SISTEMA LIQUIDO.**- Comentarios del método.

**DISCUSION.**- La viscosidad de los líquidos es muy sensible a la temperatura lo que hace que la Ecuación de Andrade sea la que más se apegue a este efecto. Requiere de dos constantes. "A" es del orden de magnitud de la viscosidad del gas y "B" es muy aproximado al valor del calor de fusión dividido por la constante del gas. Ambos valores se determinan con juegos de datos experimentales y temperaturas.

**METODO DE ANDRADE.**- Líquidos.  $\mu_L = A e^{B/T}$

$\mu_L$  = viscosidad del líquido, cp

T = temperatura, °K

A y B = constantes experimentales.

LIMITACIONES.- Este método se limita en el rango que va del punto de congelación (estado líquido) hasta temperaturas abajo del punto de ebullición. Para temperaturas arriba de dicho punto el método no se aplica.

En cuanto a los compuestos aplicables es la siguiente:

Compuestos	# compuestos	Error %
Todos los orgánicos	523	-3.4 ± 29.8
Orgánicos polares	423	-4.4 ± 30.4
Orgánicos asociados	107	-9.7 ± 49.8
Orgánicos P. no asociados	329	-1.5 ± 9.4
Orgánicos no polares	87	1.3 ± 24.0
Inorgánicos	34	-9.8 ± 38.2

CONFIABILIDAD.- Como puede verse los errores esperados son aceptables. Según las recomendaciones en la literatura (1) es el método más simple y que mejor se ajusta a la realidad.

LITERATURA.- (1), (39), (40)

#### CORRECCION POR PRESION EN VISCOSIDAD

Las correlaciones anteriormente mencionadas únicamente tienen efecto por temperatura sobre la viscosidad de los compuestos puros. Así con el fin de ampliar la aplicabilidad del sistema se introdujo la corrección por presión para ambos estados físicos - líquido y gas- aunque en los primeros no tiene mucha importancia.

DISCUSION.- Este método está basado en la viscosidad residual  $\mu - \mu^0$



que es corregida con la densidad. Una gran aproximación se encuentra al aplicar la siguiente correlación:

#### Gases No-polares

$$[(\mu - \mu^0) \xi + 10^{-4}]^{0.2 \xi} = 0.1023 + 0.023364 \rho_r + 0.058533 \rho_r^2 - 0.040758 \rho_r^3 + 0.0093324 \rho_r^4$$

#### Gases polares

$$(\mu - \mu^0) \xi = (16.56 \times 10^{-5})^{1.11} \quad \rho_r \leq 0.1$$

$$(\mu - \mu^0) \xi = (0.607 \times 10^{-5}) (9.045 \rho_r + 0.63)^{1.739} \quad 0.1 \leq \rho_r \leq 0.9$$

$$\text{Log} [-\log(\mu - \mu^0) \xi] = 0.6439 - 0.1005 \rho_r - \Delta \quad 0.9 \leq \rho_r \leq 2.6$$

$$\Delta = \begin{cases} 0 & 0.9 \leq \rho_r \leq 2.2 \\ 4.75 \times 10^{-4} (\rho_r^3 - 10.65)^2 & 2.2 \leq \rho_r \leq 2.6 \end{cases}$$

$$(\mu - \mu^0) \xi = 0.009 \quad \rho_r = 2.8$$

$$(\mu - \mu^0) \xi = 0.0250 \quad \rho_r = 3.0$$

donde:

$\mu$  = viscosidad, cp

$\mu^0$  = viscosidad a presión baja y a la misma T, cp

$$\xi = T_c^{1/6} / M^{1/2} P_c^{2/3}$$

$\rho_r$  = densidad reducida  $\rho/\rho_c = V_c/V$ , adimensional

$\rho$  = densidad, lb/ft<sup>3</sup>

$\rho_c$  = densidad crítica, lb/ft<sup>3</sup>

$V$  = volumen, ft<sup>3</sup>/lb

$V_c$  = volumen crítico, ft<sup>3</sup>/lb

$T_c$  = temperatura crítica, °K

$M$  = Peso molecular

$P_c$  = presión crítica, atm.

Limitaciones.- En cuanto a compuestos no tiene limitaciones ya que se ha probado con gases diatómicos (Shimotake y Thodos), gases inertes (Eakin y Ellington) hidrocarburos ligeros (Kestin y Moszyrki) así como vapores y algunos líquidos. Cubre además un rango de  $0.1 \leq \rho_r \leq 3.0$  para el caso de No-polares y  $0.1 \leq \rho_r \leq 2.6$  para Polares. Este alto rango de  $\rho_r$  permite que el método se emplee para compuestos líquidos con una gran aproximación a diferentes presiones.

CONFIABILIDAD.- Los errores esperados son menores al 10 ó 15%. De las ecuaciones existentes es la más confiable (1)

LITERATURA.- (1)

M E Z C L A S.

TEORIA.- Como complemento a esta propiedad de transporte se añade el cálculo de mezclas. Dentro de las propiedades de transporte la viscosidad de una mezcla es la que se puede predecir con mayor aproximación.

La viscosidad de la mezcla gaseosa (binaria) es comúnmente no lineal en cuanto a su composición, así en la viscosidad de mezclas los valores obtenidos por una fracción mol promedio son un poco mayor que los reales. Tal observación nos refleja las grandes variaciones que producen las moléculas en sus colisiones. Por otro lado se observa que el valor de la mezcla es un poco mayor al de cada componente puro.

Para gases a bajas presiones la Teoría Cinética de Chapman-Enskog puede tomarse como base para desarrollar una ecuación para mezcla de gases con multicomponentes. La primera aproximación fué la siguiente:

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^n \mu_i}{1 + \sum_{j=2}^n \rho_{1j} (y_j/y_1)}$$

$$\phi_{ij} = 6/5 A_{ij} (RT/M_i) (\mu_i/D_{ij})$$

La expresión no es complicada y consiste del radio de dos determinantes los cuales contienen términos tales como fracción mol, peso molecular, viscosidad del componente puro, temperatura e integrales de colisión.

Wilke simplificó la ecuación anterior por una aproximación del coeficiente de difusión con la teoría cinética de Sutherland.

Existen otras modificaciones basadas en ésta teoría cinética, entre ellos se cuentan:

- a).- Strunk y Fehsenfeld ( AIChE J. 11 (3) 389 (1965) basada en la viscosidad del componente puro.
- b).- González y Lee ( AIChE J. 14 (2) 242 (1968) con correlaciones empíricas para mezcla de gases no-polares del tipo gráfico. - Incluye algunos parámetros constantes, peso molecular modificado, presión y temperaturas reducidas.
- c).- Dean y Stiel ( AIChE J. 11 (3) 526 (1965) también para gases no-polares con una ecuación para bajas presiones y varias ecuaciones para desviaciones a altas presiones. No se usa para mezcla de líquidos ya que la temperatura no es un parámetro para estas ecuaciones.
- d).- Lee, Starling, Dollan y Ellington ( AIChE J. 10 (5) 694 (1964). Es una ecuación semiempírica conteniendo peso molecular, temperatura, densidad como parámetros. Es muy aproximada para hidrocarburos y puede usarse también en la región líquida.

Las correlaciones de Wilke y la de Lee han sido seleccionadas para ser aplicadas a los cálculos de la computadora por su gran aproximación y/o rango de aplicación altos.

SISTEMA GASEOSO.- Comentarios del método.

DISCUSION.- La ecuación de Wilke es muy aceptada para mezclas binarias y ternarias así como para gases no polares. Para multicomponentes es aplicable con un pequeño aumento de error. La ecuación no es válida para presiones mayores a la atmosférica.

Ecuación de Wilke.- Viscosidad de mezclas para gases a presiones abajo o igual de la atmosférica

$$\mu_m = \frac{\sum_{i=1}^n \mu_i}{1 + \sum_{j=1, j \neq i}^n \phi_{ij} (X_j / X_i)}$$

$$\phi_{ij} = \left\{ 1 + \left( \mu_i / \mu_j \right)^{1/2} \left( M_j / M_i \right)^{1/4} \right\}^2 / 8 \left[ 1 + \left( M_i / M_j \right)^{1/2} \right]$$

donde:

$\mu_m$  = viscosidad de la mezcla, cp

$\mu_i$  = viscosidad del componente puro, cp

$x_i, x_j$  = fracción mol

$M_i, M_j$  = peso molecular

LIMITACIONES.- Para mezclas binarias y ternarias y gases no polares es muy usado el método. En cuanto a polares y multicomponentes también es aplicable. Es poco usado en mezclas como  $H_2 - N_2$ . No tiene limitaciones en cuanto a la temperatura. La presión máxima permitida es la atmosférica.

CONFIABILIDAD.- El error esperado es menor al 1% para gases no polares y mezclas binarias o ternarias. Para gases polares (n-butanol, metil, etil, propil, alcoholes) y multicomponentes el error es del 3-4% para mezclas que contengan Hidrógeno o Helio el error llega a ser del 50% mayor a aquellos hallados experimentalmente.

LITERATURA.- (21), (1)

CORRECCION DE PRESION Y SISTEMA LIQUIDO

DISCUSION.- La predicción de la viscosidad de mezclas de gases a altas presiones y líquidos por el método de Lee, Starling, Dolan y Ellington está basada en la teoría de la viscosidad de Born y Green (1) obteniendo la siguiente correlación semiempírica;

Método de Lee y otros.- Gases a altas presiones y líquidos.

$$\mu_m = J \exp (Ld^y)$$

donde:

$\mu_m$  = viscosidad de la mezcla, cp

$$J = \frac{(7.77 + 0.0063M) T'}{122.4 + 12.9 M + T'}$$

$$L = 2.57 + \frac{1914.5}{T'} + 0.0395 M$$

$$y = 1.11 + 0.04 L$$

M = peso molecular

T' = temperatura, °R

Las constantes usadas en la ecuación fueron determinadas a partir de datos del metano, etano, propano, n-butano y mezclas de metano y n-butano, ambos líquidos y gases a altas presiones.

LIMITACIONES.- No tiene limitaciones de presión y para compuestos como pentano, hexano contenidos en la mezcla los errores esperados son mayores.

CONFIABILIDAD.- Para gases a presiones moderadas y líquidos el error esperado es menor al 5% y para mezclas que contengan pentano o hexano se pueden alcanzar errores de 15%.



LITERATURA.- (21), (1).

QUINTO.

RECOMENDACIONES.- Para la predicción de la viscosidad del componente puro en ambos estados (líquido y gas) es recomendable trabajar con condiciones prácticas de presión y temperatura ya que a estas condiciones y con ayuda de datos experimentales se han probado los métodos escogidos, obteniéndose valores muy cercanos a los reales. La viscosidad tiene un comportamiento muy especial en las regiones críticas a consecuencia de la variación de la densidad.

Referente a las mezclas el programa tiene opción para una mezcla de diez componentes como máximo. Esto quiere decir que calcula la viscosidad de la mezcla de cinco o mas componentes con una gran aproximación aunque se cuenta con poca información para sistemas de más de tres compuestos. Es por eso que para mezclas binarias o terciarias el método es muy exacto, siempre y cuando sean compuestos comunes.

Se puede tener la seguridad que tanto para componentes puros y mezclas de los que no se cuenta con información experimental suficiente los resultados obtenidos no van a ser muy erróneos.

#### 2.6. h.- CONDUCTIVIDAD TERMICA.

##### D E F I N I C I O N .

La conductividad térmica junto con la viscosidad y coeficiente de difusión constituyen el grupo de las propiedades de transporte de los fluidos, siendo la primera una medida de la habilidad de una sustancia para transferir calor por conducción molecular debido a la interacción entre

las moléculas por la existencia de diferentes tipos de regiones a diferentes temperaturas.

La definición matemática de la conductividad térmica viene dada -- por la siguiente ecuación diferencial (1):

$$\frac{q}{A_q} = -k \frac{dT}{dy}$$

donde:

$q$  = razón de flujo de calor por unidad de tiempo.

$A_q$  = área de flujo (transferencial)

$dt/dy$  = gradiente de temperatura del material

$k$  = conductividad térmica de la sustancia

El signo negativo se debe a que el calor es transferido de una temperatura alta a una más baja. La ecuación es dimensionalmente correcta -- siendo las unidades de "k" la razón de transferencia de energía por unidad de área seccional por unidad de gradiente de temperatura: (mL/t<sup>2</sup>T)

TEORIA.- Esta propiedad física está definida como la constante de proporcionalidad -k-, en la Ley de Fourier para la transmisión de calor por conducción, que dice: Considerando un material plano de area "A" entre dos platos paralelos separados una distancia "Y". Para un tiempo = 0 imaginamos una temperatura inicial "To" para el material, una alta temperatura constante para el plato inferior, en el estado estacionario es necesario un flujo de calor que mantenga la diferencia de temperaturas:  $T = T_1 - T$ . Si la distancia "Y" se aproxima a 0 entonces se tiene que:

$$q_x = -k \frac{dT}{dY}$$

donde el flujo de calor local por unidad de área en la dirección positiva de "Y" es  $q_x$ . Es válida cuando  $T = T(Y)$ .

Unidades.-

$$q_1 \quad [ - ] \quad \text{cal cm}^{-2} \text{ seg}^{-1}$$

$$T \quad [ - ] \quad ^\circ\text{K}$$

$$Y \quad [ - ] \quad \text{cm}$$

$$\text{entonces} \quad k \quad [ - ] \quad \text{cal cm}^{-1} \text{ seg}^{-1} \text{ } ^\circ\text{K}^{-1}$$

La conductividad térmica sufre grandes variaciones con la temperatura, la presión, la composición química y los estados físicos, así para un simple compuesto químico la conductividad térmica aumenta en la siguiente secuencia: vapor, líquido, sólido amorfo y cristal.

La conductividad térmica en una gran cantidad de líquidos decrece con la temperatura. Primeramente se debe a que es función de la densidad-- así como de la velocidad del sonido la cual decrece con la temperatura para líquidos orgánicos. A veces la velocidad del sonido aumenta con la temperatura por lo tanto la conductividad térmica aumenta, esto sucede con el agua por ejemplo, la conductividad térmica aumenta a un máximo y después cae al aumentar la temperatura.

Por otro lado, los gases son fuertemente influenciados por la viscosidad y calor específico del compuesto a volumen constante.

En los materiales no metálicos la conductividad térmica aumenta -- con la presión. En altas presiones se presentan anomalías debidas a la -- función de la temperatura. En general, la conductividad térmica de gases-- es independiente de la presión abajo de la presión reducida igual a 0.2, -- arriba de esta aumenta su valor rapidamente y en el caso del líquido es in-- dependiente de la presión abajo de  $P_r = 0.1$ .

Los datos de conductividad térmica son muy usados directamente para balances de energía o en números adimensionales para el diseño de equipos por ejemplo, entre ellos se tiene el No. de Prandlt, de Nuselt y números de Graetz.



#### PRIMERA VERSION.

De las correlaciones disponibles (apéndice C) se escogieron las más apropiadas y recomendadas (2) para ser adaptadas al sistema electrónico tal es el caso de la correlación corregida de Palmer para el estado líquido y el método de Eucken para los gases.

Ambas ecuaciones son función de otras propiedades tales como calor latente de vaporización, viscosidad y calor específico siendo también calculadas por el programa. Los comentarios de las ecuaciones es el siguiente:

SISTEMA LIQUIDO.- Comentarios del método

DISCUSION.- El efecto de la temperatura viene dado por el término  $(0.55/T_r)$  incluido en la ecuación como un factor de corrección.

Ecuación corregida de Palmer.- Líquidos

$$k_L = 41.2 \text{ cp}_L (\text{s.g.}/M)^{1.333} (T_{BP}/H_v) (0.55/T_r)$$

donde:

- $k_L$  = conductividad térmica del líquido, BTU/hr ft<sup>2</sup> °F/ft
- $C_{p_L}$  = calor específico del líquido, BTU/lb °F
- s.g. = gravedad específica, adimensional
- M = peso molecular
- $T_{BP}$  = Temperatura en el punto de ebullición, °K
- $H_v$  = calor latente de vaporización en el punto de ebullición
- $T_r$  = temperatura reducida,  $T/T_c$
- $T_c$  = temperatura crítica, °K

LIMITACIONES.- En cuanto a los compuestos puede utilizarse en casi todos los hidrocarburos orgánicos así como para al-

gunos inorgánicos. La ecuación depende de valores de  $H_v$  y  $C_{p,v}$ , por lo tanto las limitaciones que estos métodos tengan influyen en éste. Se usa aún en temperaturas arriba del punto de ebullición aumentando su rango de aplicación. Se recomienda usar se con temperaturas bajas.

CONFIABILIDAD.- Las regiones abajo y cercanas al punto de ebullición dan un error promedio menor al 10%.

LITERATURA.- (2)

SISTEMA GASEOSO.- Comentarios del método.

DISCUSION.- Se aplicará la ecuación corregida de Eucken como una función de la viscosidad.

$$k_g = 2.42 \mu_g [ C_{p,v} + (2.48/M) ]$$

donde.

$k_g$  = conductividad térmica del gas, BTU/hr ft<sup>2</sup> °F/ft

$\mu_g$  = viscosidad del gas, cp

$C_{p,v}$  = calor específico del vapor, BTU/lb °F

M = peso molecular

LIMITACIONES.- No hay limitaciones en cuanto a los compuestos y puede trabajarse a altas temperaturas obteniéndose un error aceptable, sin embargo, la mayor aproximación con lo experimental es a temperaturas bajas. - Con los gases polares el método produce un pequeño aumento del valor real.

CONFIABILIDAD.- Para condiciones de altas temperaturas o en el caso de gases polares el error esperado es menor al 15%.

LITERATURA.- (2)

## SEGUNDA VERSION.

Como se ha mencionado con anterioridad la primera versión es única-  
mente un camino para simplificar el programa y poder determinar con mayor-  
precisión los métodos de cálculo requeridos. Una vez probada esta primera  
versión se encontraron resultados en desacuerdo con lo experimental teniéndose  
que complementar las correlaciones escogidas por otras mejores sin im-  
portar el método de cálculo y las constantes requeridas. A saber:

SISTEMA GASEOSO.- Comentarios del método.

DISCUSION.- El sistema se modificó únicamente en cuanto a la co-  
rrección por presión ya que el método de cálculo a con-  
diciones bajas quedó el mismo. Ecuación de Eucken, dis-  
cutido ya anteriormente.

Dicha corrección está basada en el principio de los es-  
tados correspondientes ( $k/k^0$  vs  $P_r$ ). Stiel y Thodos -  
han generalizado una ecuación en función de la densi-  
dad dependiente sólo de condiciones críticas ( $t_c, P_c, V_c$ )  
y de la densidad y la viscosidad, que con un análisis-  
dimensional obtuvieron una correlación entre  $k-k^0$ ,  $Z_c$ ,  
y densidad reducida.

Corrección por presión.

$$(k-k^0) \xi Z_c^5 = 14 \times 10^{-8} (e^{-0.535 P_r} - 1) \quad P_r \leq 0.5$$

$$(k-k^0) \xi Z_c^5 = 13.1 \times 10^{-8} (e^{0.07 P_r} - 1.069) \quad 0.5 \leq P_r \leq 2.0$$

$$(k-k^0) \xi Z_c^5 = 2.976 \times 10^{-8} (e^{1.15 P_r} - 2.016) \quad 2.0 \leq P_r \leq 2.8$$

donde:

$k$  = conductividad térmica del gas a altas presiones, BTU/hr ft<sup>2</sup>  
°F/ft

$k^0$  = conductividad térmica a presión atmosférica (Ec. de Eucken), -  
BTU/hr ft<sup>2</sup> °F

$$\xi = T_c^{1/6} M^{1/2} / P_c^{2/3}$$

$T_c$  = temperatura crítica, °K

$M$  = peso molecular

$P_c$  = presión crítica, atm.

$Z_c$  = factor de compresibilidad crítico

$\rho_r$  = densidad reducida,  $\rho/\rho_c$

$\rho$  = densidad, gmol/cc

$\rho_c$  = densidad crítica, gmol/cc

**LIMITACIONES.**— Su principal limitación es que se alcanzan errores mayores al tratarla con compuestos polares o Hidrógeno y Helio. En las regiones cercanas a las críticas la densidad varía fuertemente y como consecuencia la conductividad térmica también. Es la correlación más general hoy en día.

**CONFIABILIDAD.**— Los errores máximos son  $\pm 10\%$  al  $20\%$  en condiciones no cercanas a las críticas.

**LITERATURA.**— (1).

**SISTEMA LIQUIDO.**— Comentarios del método

**DISCUSION.**— Este método se divide en dos partes una para compuestos inorgánicos aplicando la ecuación corregida de Palmer (primera versión) y una segunda para compuestos orgánicos por el método de Robbins-Kingrea. Ambos como una función de la temperatura.

**Método corregido de Palmer.**— Este ya ha sido ampliamente discutido en la primera versión sin hacersele ningún cambio.

**Método de Robbins-Kingrea**

$k_L$  = conductividad térmica del líquido, BTU/hr ft<sup>2</sup> °F/ft

$$K_L = \frac{86.0 - 4.83 H}{1000 (\Delta S^\circ)} \left( \frac{0.55}{T_r} \right)^n \left( \frac{\rho}{M} \right)^{1/3} \rho \text{ cp}$$

donde:

H = factor estructural de hidrancia (tablas)

$$\Delta S^\circ = \frac{H_v}{T_b} + R \ln \frac{492}{T_b} = \text{constante de Everett, BTU/lb mol } ^\circ\text{R}$$

$H_v$  = calor latente de vaporización al punto de ebullición

$T_b$  = temperatura de ebullición,  $^\circ\text{R}$

R = constante del gas, 1.987 BTU/lbmol  $^\circ\text{R}$

$T_r$  = temperatura reducida, T/Tc

T = temperatura,  $^\circ\text{R}$

Tc = temperatura crítica,  $^\circ\text{R}$

$\rho$  = densidad a 68 $^\circ\text{F}$ , lb/ft<sup>3</sup>

M = peso molecular

cp = calor específico, BTU/lb  $^\circ\text{F}$

**LIMITACIONES.**— Para el método corregido de Palmer las limitaciones son las mismas que las discutidas en la primera versión.

El método de Robbins-Kingrea tiene como limitación fundamental que únicamente se usa para compuestos orgánicos. Ha sido probada para 70 compuestos líquidos. Los valores del Cp a veces tienen que ser extrapolados para efectuar el cálculo. La aplicabilidad como efecto de la temperatura es de  $0.4 \leq T_r \leq 0.9$ , para tener un error mínimo, el rango es de 0.5 a 0.7. En cuanto a la presión debe ser abajo de 500 psia.

CONFIABILIDAD.- Para 142 valores de conductividad térmica de líquidos a varias temperaturas el promedio de desviación contra los datos experimentales es de 3.7% para el rango de  $T_r$  entre valores de 0.5 a 0.7 y menor del 10% para 0.4 a 0.9 de  $T_r$ . Ambas abajo de 500 psia.

LITERATURA.- (4), (2), (1).

#### CONDUCTIVIDAD TERMICA DE MEZCLAS

GENERALIDADES.- Con respecto a la conductividad térmica de mezclas de gases se dice que usualmente no es función lineal de la composición.

Las moléculas difieren grandemente en polaridad lo que hace que el valor de  $K_j$  de mezclas sea mayor - al calculado con la fracción mol promedio, lo contrario ocurre para gases no polares.

En base a ésto, en 1904 Wassiljewa propone la primera aproximación para mezclas monoatómicas continuando después para poliatómicas en función de la energía interna de transporte. Así su ecuación general fué:

$$K_j = \sum_{i=1}^n k_i / [ 1 + \sum_{i \neq j} A_{ij} (y_i/y_j) ]$$

Existiendo algunas modificaciones en cuanto al término  $A_{ij}$  tanto para gases mono como poliatómicos. Mason y Saxena como una función del peso molecular. Lindsay y Bromley basándose en el modelo del gas de Sutherland corrigieron a  $A_{ij}$ , en función del peso molecular, viscosidad, temperatura y la constante de Sutherland. Cheung, Bromley and Wike usaron el peso molecular, viscosidad, calor específico y parámetros de corrección. Todo fué para bajas presiones.

Los efectos de temperatura en gases muestran desviaciones negativas a condiciones bajas y desviaciones positivas a altas. Poca información experimental se tiene acerca del efecto de la presión para poder desarrollar un confiable método de estimación. Sin embargo, Stiel y Thodos hicieron razonables estimaciones en base al componente puro y tratando la mezcla como un componente puro hipotético con propiedades pseudocríticas - utilizando las reglas de mezclado de Gunn y Prausnitz.

Es sabido que la conductividad térmica de la mezcla líquida es independiente de la presión, así abajo de 500 psia decrece linealmente con el aumento de temperatura del punto de congelación al punto normal de ebullición. Esta linealidad se cumple sólo a temperaturas menores a 0.8 de  $T_r$  donde la conductividad térmica del líquido empieza a decrecer más rápidamente conforme se acerca al punto crítico.

Para altas presiones es necesario hacer una corrección ya que su valor aumenta con la presión.

SISTEMA GASEOSO.- Comentarios del método.

DISCUSION.- En este estado la mezcla se comporta muy semejantemente al compuesto puro ya que sufre alteraciones considerables tanto por el efecto de la temperatura como de la presión. Así para la presión atmosférica y como función de la temperatura la correlación de Lindsay y Bromley es la más indicada. Para el caso de presiones altas la ecuación general de Stiel y Thodos basada entre regiones de presión como la recomienda Reid and Sherwood y junto con las reglas de mezclado de Gunn -- Prausnitz para las constantes pseudocríticas.

Ecuación de Lindsay y Bromley.- Gases a bajas presiones.

$$k_{12}^0 = \sum_{i=1}^n k_i / \left[ 1 + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n A_{ij} (X_i/X_j) \right]$$

$$A_{i,j} = \frac{1}{4} (1 + [\mu_i/\mu_j] (M_j/M_i)^{3/4}) \{ [(1 + S_i/T)/(1 + S_j/T)]^{1/2} \}^2$$

$$\{ (1 + S_{i,j}/T) / (1 + S_i/T) \}$$

donde:  $k_{..}^0$  = conductividad térmica de la mezcla a bajas presiones del gas-  
BTU/hr ft<sup>2</sup> °F/ft

$k_i$  = conductividad térmica del gas, BTU/hr ft<sup>2</sup> °F/ft

$x$  = fracción mol

$\mu_i$  = viscosidad del componente cp

$M$  = peso molecular

$S_i = 1.5 T_{bi}$

$S_{i,j} = (S_i S_j)^{1/2}$

$T_{bi}$  = temperatura de ebullición del componente  $i$ , °K

$T$  = temperatura, °K

**LIMITACIONES.**- Se utiliza para gases poli y monoatómicos, hidrocarburos, orgánicos y algunos inorgánicos. Las mezclas incluyen sistemas polar (NH<sub>3</sub>) y no polar, excepto - mezclas polar-polar ya que el error es desconocido. El método no es confiable para mezclas de moléculas poliatómicas complejas (argón-n-hexano) o mezclas - de gases raros, para ambas el error es del 10% y 5% respectivamente.

**CONFIABILIDAD.**-Con respecto a las demás correlaciones existentes - esta es la más general y confiable pues los errores obtenidos son bajos. Así para mezclas no polares - es del 1.9%, para mezclas ternarias del 2.0%. Sistemas polar-no polar el error es menor al 4.7%.

Para mezclas polar-polar no hay un método de estimación pero la ecuación de Lindsay y Bromley es la -- más aproximada sin saber exactamente que comportamiento se va a tener.



LITERATURA (1), (21)

Correlación de Stiel y Thodos.- Altas presiones.

$$(k_m - k_m^0) / k_m^0 Zc_m^{0.5} = 14 \times 10^{-3} (e^{0.525 \rho_r} - 1) \quad \rho_r \leq 0.5$$

$$(k_m - k_m^0) / k_m^0 Zc_m^{0.5} = 13.1 \times 10^{-3} (e^{0.525 \rho_r} - 1.069) \quad 0.5 \leq \rho_r \leq 2.0$$

$$(k_m - k_m^0) / k_m^0 Zc_m^{0.5} = 2.976 \times 10^{-3} (e^{1.155 \rho_r} + 2.016) \quad 2.0 \leq \rho_r \leq 2.8$$

donde:

La nomenclatura es la misma que en la del componente puro (ver primera versión). Excepto el valor de  $Zc_m$  que proviene de las reglas de mezclado de Gunn y Prausnitz:

$$Zc_m = \sum_{i=1}^N x_i Zc_i$$

$$T_{c_m} = \sum_{i=1}^N x_i T_{c_i}$$

$$M_m = \sum_{i=1}^N x_i M_i$$

$$Vc_m = \sum_{i=1}^N x_i Vc_i$$

$$Pc_m = Zc_m RT / Vc_m$$

$$\rho_r = M_m^{1/2} T_{c_m} / Pc_m^{2/3}$$

$$\rho_{rm} = \rho_m / \rho_{c_m}$$

$$\rho_m = \sum_{i=1}^N x_i \rho_i$$

$$\rho_{c_m} = \sum_{i=1}^N x_i \rho_{c_m}$$

LIMITACIONES.- El error esperado es menor al 5% para mezclas no polares simples a una temperatura pseudoreducida ----  $(T / \sum_{i=1}^N y_i T_{c_i})$  mayor que 1.3. Este método puede usarse también para mezclas polares o gases poliatómicos y temperaturas pseudoreducidas menores pero pueden anticiparse errores más altos.

CONFIABILIDAD.- Como se mencionó anteriormente éste método además de ser el más general es el más confiable ya que los errores obtenidos para mezclas simples son los más bajos.

Literatura.- (1), (21).

SISTEMA LIQUIDO.- Comentarios del método.

DISCUSION.- Muy poca información se tiene acerca de la conductividad térmica de mezclas líquidas, así únicamente para sistemas binarios del tipo alcohol-hidrocarburo se --- cuenta con la correlación de Jordan y Coates:

$$\ln(k_m) = w_1 \ln(k_{L_1}) + w_2 \ln(k_{L_2}) + w_1 w_2 \ln(J)$$

donde:

$$J = \exp(k_{L_2} - k_{L_1}) - 0.5(k_{L_1} + k_{L_2})$$

$k_p$  = conductividad térmica de la mezcla líquida, BTU/hr ft<sup>2</sup>  
°F/ft

W = fracción peso

1 y 2 = se refieren al componente puro

LIMITACIONES.- Únicamente es útil para sistemas binarios. Además la fracción debe estar dada en peso. No se limita a los compuestos de la mezcla excepto para el sistema anilina-ácido acético).

CONFIABILIDAD.- El error esperado es menor al 3%.

LITERATURA.- (3)

COMENTARIOS.- Para el buen uso del sistema no se recomienda condiciones altas de presión y temperatura ya que la conductividad térmica tanto del componente puro como de la mezcla se altera en forma particular y hace difícil su predicción con exactitud.

En cuanto a los compuestos, la polaridad, tiene una fuerte influencia sobre esta propiedad sobre todo en el caso de gases y mezclas donde el comportamiento molecular (polar) es aún un campo no muy conocido.

En cuanto a las mezclas, deben usarse compuestos de los que se disponga de cierta información y poder - comparar los valores obtenidos ya que el sistema -- opera matemáticamente y arroja resultados dependien do de los datos proporcionados. Las correlaciones- aquí empleadas son las mejores y más generales que- reportó la literatura.

### 2.6. i.- COEFICIENTE DE DIFUSION.

DEFINICION.- Difusión es el transporte neto de una substancia de - una región a otra dentro de una misma fase (Líquido,- Gas o Sólido) sin posibilidad de mezclado.

El transporte puede ser a difusión térmica, difusión- por presión, difusión molecular (concentración) o por convección y siempre en la dirección de decrecimiento del gradiente. El coeficiente de difusión comúnmente llamado difusividad es la constante de proporcionali- dad entre la densidad de flujo de la especie en difu- sión y el gradiente del potencial apropiado dado por- la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{N_m}{A_{N_m}} = - D \frac{dC_m}{d_y}$$

donde.

$N_m$  = radio molar difusión

$A_{N_m}$  = area

$dC_m/d_y$  = gradiente de concentración de la sustancia en difu- sión

$D$  = coeficiente de difusión.

El coeficiente de difusión depende de los dos o más componentes el- sistema.

TEORIA.- El coeficiente de difusión es la propiedad de transporte más difícil de predecir. La primera razón es la escasez de datos experimentales que cubran un gran rango de temperatura y presión así como el error asociado con dichos datos experimentales.

Los coeficientes de difusión basados en los gradientes de concentración son universalmente empleados para los sistemas Líquido y Gaseoso.

La difusividad  $D_{12}$  a través de una mezcla binaria a presión constante del compuesto 1 (soluto) al compuesto 2 (solvente) está definido por:

$$J_1 = - D_{12} \text{ grad } C_1$$

o para difusión unidireccional en el eje z:

$$J_1 = - D_{12} (dc_1/dz)$$

donde  $J_1$  es el flujo molar de la especie 1, gmol/seg  $\text{cm}^2$ ;  $c_1$  es la concentración de la especie en difusión gmol/cc; y z es la distancia en dirección de la difusión, cm. El coeficiente  $D_{12}$  tiene unidades de  $\text{cm}^2/\text{seg}$ .

#### PRIMERA VERSION.

No fué incluida esta propiedad de transporte en la primera versión.

#### SEGUNDA VERSION.

Tratando de aumentar la capacidad de nuestro sistema se introdujo - esta útil propiedad de transporte para cálculos teóricos o ingenieriles involucrados en la transferencia de masa como la absorción, extracción, destilación y reacciones químicas.

Para lograr tal objetivo seleccionamos de la literatura las mejores correlaciones (apéndice II-E) y las probamos en la computadora con el propó

sito de obtener la mayor aproximación de los datos calculados con los experimentales ya sean inter o extrapolados debido a la escasez de los mismos.

Logrando lo anterior se escogieron las siguientes:

SISTEMA GASEOSO.- Comentarios del método.

DISCUSION.- La ecuación de predicción para el coeficiente de difusión del gas de Hirschfelder, Bird y Spatz está basada en la teoría de los gases no uniformes. Utilizaron las relaciones de Lennard-Jones para la función potencial de las colisiones integrales.

Ecuación de Hirschfelder, Bird y Spatz. Gases.

$$D_{ij} = \frac{0.001858 T^{3/2} [(M_i + M_j)/M_i M_j]^{1/2}}{P \sigma_{ij} \Omega_D}$$

donde:

$$\sigma_{ij} = 1/2 (\sigma_i + \sigma_j)$$

$$\sigma = 5/6 Vc^{1/3}, \text{ \AA}$$

El término de  $\Omega_D$  es función de  $\frac{KT}{\epsilon_o}$  donde  $\frac{\epsilon_o}{K} = 0.75 Tc$

$$1/\Omega_D = 0.18029 + 0.71794 \left(\frac{KT}{\epsilon_o}\right) - 0.23601 \left(\frac{KT}{\epsilon_o}\right)^2 + 0.03226 \left(\frac{KT}{\epsilon_o}\right)^3$$

$$\text{para } \frac{KT}{\epsilon_o} \leq 2.3$$

$$1/\Omega_D = 0.70971 + 0.14207 \left(\frac{KT}{\epsilon_o}\right) - 0.01674 \left(\frac{KT}{\epsilon_o}\right)^2 + 0.0002811 \left(\frac{KT}{\epsilon_o}\right)^3$$

$$\text{para } 2.3 \leq \frac{KT}{\epsilon_o} \leq 20$$

$D_{ij}$  = coeficiente de difusión,  $\text{cm}^2/\text{seg}$

T = temperatura,  $^{\circ}\text{K}$

M = peso molecular  
 P = presión, atm  
 Vc = volumen crítico, cc/gmol  
 Pc = Presión crítica, atm  
 Tc = temperatura crítica, °K

LIMITACIONES.- No hay limitaciones en cuanto a los compuestos y la temperatura pero la presión si influye pues a más de 20 atm el método no se emplea.

CONFIABILIDAD.- Reid and Sherwood reportan un error menor al 7.6% y como la correlación más confiable.

LITERATURA.- (1), (21).

SISTEMA LIQUIDO.- Comentarios del método.

DISCUSION.- Se escogió la correlación propuesta por Schelber para el coeficiente de difusión a dilución infinita siendo una corrección de la ecuación de Wilke-Chang.

Se dice que es a dilución infinita (muy baja concentración de soluto en dilución) pues las correlaciones que nos dan la variación de la difusión a una concentración dada son complejas y difíciles de manipular en el sistema electrónico pues requieren de constantes en función del acercamiento de las moléculas como lo son su radio, configuración, actividad, etc.

Ecuación de Scheibel.- Líquidos.

$$D_{12}^{\infty} = 8.2 \times 10^{-4} \frac{T}{\mu_2} \frac{1 + \left(\frac{3V_2}{V_1}\right)^{1/3}}{V_1^{1/2}}$$

donde:

$D_{12}^{\infty}$  = coeficiente de difusión a dilución infinita, cm<sup>2</sup>/seg

T = temperatura, °K

$\mu_L$  = viscosidad de solución (solvente), cp

$V_1$  = volumen molar del soluto al punto normal de ebullición, --  
cm<sup>3</sup>/gmol

$V_2$  = volumen molar del solvente al punto de ebullición, cm<sup>3</sup>/gmol

LIMITACIONES.- Puede ser usado para muchos solventes como agua, benceno, etc. La ecuación nos representa el comportamiento de moléculas largas en soluciones diluidas-- con difusión a través de un solvente de pequeñas moléculas. La aproximación es correcta cuando  $V_1 \approx 2V_2$  o  $V_1 = V_2$ . La desviación aumenta para valores de  $V_1$  menor a 40. No se puede usar para sistema de -- más de dos componentes.

CONFIABILIDAD.-Debido a la dificultad de calcular el coeficiente - de difusión el error esperado por éste método es -- del orden de 15% y no menor al 5%.

LITERATURA.- (42), (1)

EFFECTO DE LA PRESION SOBRE LA DIFUSIVIDAD DE GASES.

DISCUSION.- Este método está basado en el efecto de la presión sobre las moléculas al formarse paquetes entre ellas como es el caso de los flúidos densos. Incluyendo también el tamaño de las mismas así como su frecuencia de colisión. Abajo de 20 atm no sufre efecto por presión.

$$\frac{D_{12}^0(a, T, y, P)}{D_{12}^0(a, T, y, p \text{ baja})} = \frac{1}{x}$$

donde:

$$x = 1.0 + 1.31(n\sigma^{-3}) + 1.26(n\sigma^{-3})^2 + 1.06(n\sigma^{-3})^3$$

$$n\sigma^{-3} = 0.00735 P\sigma^{-3}/ZT$$

$D_{12}$  = coeficiente de difusión a altas presiones, cm<sup>2</sup>/seg

$D_{1,2}^0$  = coeficiente de difusión a bajas presiones,  $\text{cm}^2/\text{seg}$

P = presión, atm

T = temperatura,  $^{\circ}\text{K}$

$\sigma$  =  $5/6 V_c^{1/3}$

$V_c$  = volumen crítico,  $\text{cc/gmol}$

$\rho_c$  = Densidad (a T y P baja)

$\rho$  = Densidad (a T y P).

LIMITACIONES.- No se ha determinado aún la presión máxima de aplicación del método ya que no se ha experimentado mucho en este campo, sin embargo para presiones alrededor de 100 atm el error es bastante aceptable.

CONFIABILIDAD.- A presiones de 100 atm el error promedio es de 10%.

LITERATURA.- (1)

COEFICIENTE DE DIFUSION DE MULTICOMPONENTES.-

DISCUSION.- La siguiente ecuación es útil para estimar coeficientes de difusión de sistemas multicomponentes en estado gaseoso a partir del coeficiente de difusión del par de componentes en la mezcla.

Ecuación de Wilke.

$$D_{1,2,3,4, \dots} = \frac{(1 - y_1)}{\sum_{j=2}^m (y_j / D_{1,j})}$$

donde

$D_{1,2,3, \dots}$  = Coeficiente de difusión del componente 1 en una mezcla de "m" componentes,  $\text{ft}^2/\text{hr}$

$y_j$  = fracción mol del componente en el gas

$D_{1,2,3, \dots}$  = coeficiente de difusión del componente en la mezcla binaria,  $\text{Ft}^2/\text{hr}$



LIMITACIONES.- Se ha usado con muy pocos datos experimentales para sistemas gaseosos y no se ha intentado con sistemas líquidos.

CONFIABILIDAD.- Su estimación da un 5% de error.

LITERATURA.- (7), (1)

RECOMENDACIONES GENERALES.- El sistema puede ser utilizado en un gran rango de presiones y temperaturas para el cálculo del coeficiente de difusión binario o de multi componentes ya que las correlaciones que lo estructuran están corregidas por el efecto de ambos.

Con la ayuda de nomogramas, tablas y gráficas de diferentes investigadores se probaron los resultados por la computadora para un gran número de sistemas binarios y algunos multicomponentes verificando de esta forma los errores dados por la literatura de dichas ecuaciones.

Esto quiere decir que para sistemas o condiciones de trabajo (P y T) que no han sido obtenidos experimentalmente pueden calcularse con el sistema con gran confiabilidad.

# C A P I T U L O

# III

---

## Detalles de la Estructura del Sistema

- 3.1.- Introducción.
- 3.2.- Capacidades del sistema.
- 3.3.- Estructura modular.
- 3.4.- Programa Principal.
- 3.5.- Ejemplo del procedimiento que sigue la computadora para evaluar cierta propiedad.
- 3.6.- Subrutinas que efectúan la estimación de propiedades.
  - a.- Calor latente de vaporización.
  - b.- Capacidad calorífica (puros).
  - c.   "               "               (mezclas).
  - d.- Conductividad térmica (puros).
  - e.-   "               "               (mezclas).
  - f.- Densidad (puros).
  - g.-   "               (mezclas).
  - h.- Coeficiente de difusión de sistemas binarios.
  - i.-   "               "               "               "               "               de multicomponentes-gaseosos.

- j.- Entalpias (puros)
- k.- Entalpias (mezclas).
- l.- Factor de compresibilidad.
- m.- Presión de vapor.
- n.- Tensión superficial.
- o.- Viscosidad (puros)
- p.- " (mezclas).

**3.7.- Subrutinas Auxiliares.**

- a.- Selección de la clave.
- b.- Cambio de unidades.
- c.- Subrutina ERROR.
- d.- " SELECP.
- e.- " SELECM.
- f.- " TABLA.
- g.- " TABLAM.
- h.- " GRAFIC.
- i.- " GRAFIM.

**3.8.- Banco de Datos.**

**3.9.- Como hacer modificaciones al sistema.**

## ESTRUCTURACION DEL SISTEMA.

### 3.1.- I N T R O D U C C I O N

Esta sección corresponde a la descripción de la estructura propia del sistema tal como quedó programado.

Su fundamento estriba en un banco de datos (Block Data) que posee toda la información referente a las constantes físicas de los 55 compuestos que la integran. Esto reduce al máximo la información que debe ser suministrada por el usuario como son las condiciones de trabajo (T, P y X), la opción de unidades, el nombre del compuesto, la propiedad a evaluar, en fin, todos aquellos datos variables en cada caso específico.

En este capítulo se detallarán cada una de las subrutinas (subprogramas), su nomenclatura, un listado de ellas, los pasos que sigue la computadora, las variaciones que se le pueden hacer, de igual forma se tratará el programa principal y el banco de datos.

Se hicieron comparaciones con otros programas existentes en cuanto a sus capacidades, número de constantes en el banco de datos, propiedades que puede calcular, etc.

La idea es dar a conocer en detalle como está programado y estructurado el sistema en el lenguaje Fortran IV y si se piensa en alguna modificación, cambio o simplemente complementarlo saber qué tarjetas hay que cambiar, dónde colocarlas y porqué.

### 3.2.- CAPACIDADES DEL SISTEMA

Tratando de resumir lo que en incisos posteriores se va a detallar es necesario hacer mención de lo que es capaz de hacer el programa.

Consta de 55 compuestos seleccionados por su uso común contando en tre ellos algunos orgánicos como hidrocarburos simples, alcoholes, etc. y compuestos inorgánicos. Respecto a las propiedades que puede calcular están divididas en compuestos puros y mezclas. Entre las primeras se cuentan 9: Calor latente de vaporización, capacidad calorífica, conductividad térmica, densidad, difusividad, entalpia, presión de vapor, tensión superficial, viscosidad. En el caso de mezclas son: capacidad calorífica, conductividad térmica, densidad, Difusividad, entalpia y viscosidad. En ambos casos se calculan unicamente los estados físicos líquido y gaseoso.

El número máximo de componentes aceptado por la mezcla es de 10.

En el banco de datos se tienen 38 parámetros constantes algunos generales a todas las propiedades y otros específicos a algunas correlaciones empleadas.

La generación de tablas y gráficas variando ya sea la temperatura o la presión y manteniendo constante la otra, le dan una considerable importancia al sistema por ser una innovación en este tipo de trabajos.

Internamente el programa tiene la capacidad de predecir el estado físico en que se encuentra el compuesto puro. Cuenta también con una subrutina que efectúa el cambio de unidades ya que el usuario puede suministrar juegos de datos de T y P (condiciones de trabajo) las cuales tienen varias opciones.

Los datos de salida tienen diferentes estructuras según se trate del compuesto puro, la propiedad, una mezcla o para la generación de tablas y gráficas tratando de que su lectura sea lo más legible posible.

### 3.3 - ESTRUCTURA MODULAR

La estructura del sistema es modular, es decir, está formado por módulos independientes entre sí, los cuales están coordinados por un programa principal.

Se diseñó el programa de esta manera con la finalidad de tener un sistema actualizado, ya que la independencia entre los módulos nos permite en un momento dado y sin cambiar la estructura del sistema realizar las siguientes modificaciones:

- 1.- Reevaluación de Ctes. Físicas.
- 2.- Incluir nuevos procedimientos de cálculo
- 3.- Adición de propiedades, compuestos, Ctes, correlaciones, ecuaciones específicas.
- 4.- Adoptar métodos estadísticos para determinar la mejor correlación a emplear bajo determinadas condiciones de operación.
- 5.- Incluir valores experimentales para determinar el % de desviaciones o para aplicación directa en las ecuaciones.
- 6.- Implantar otras opciones.
- 7.- Optimización del programa en cuanto al tiempo empleado en la computadora.
- 8.- Cálculo de propiedades de compuestos cuyas Ctes. no estén incluidas en el banco de datos.
- 9.- Inclusión de propiedades de sólidos.

Todas estas posibilidades hacen del programa un medio versátil y de amplias capacidades en la evaluación de propiedades termodinámicas y de transporte de los materiales.

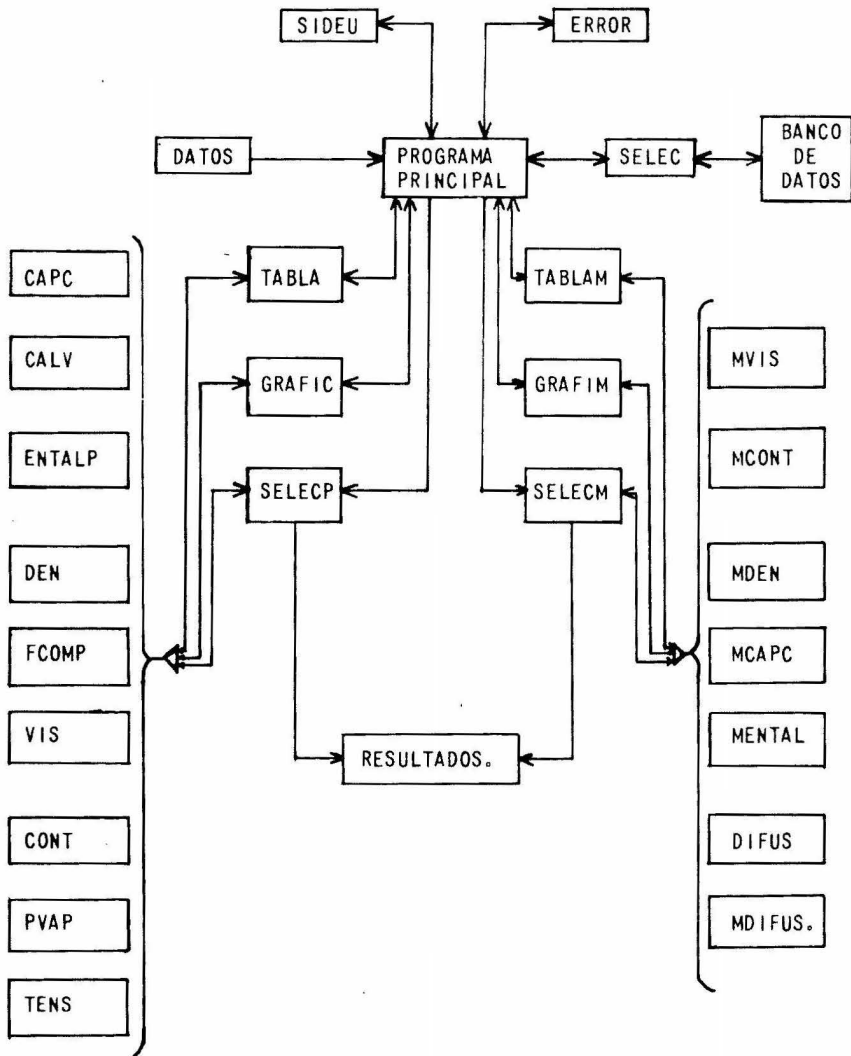


DIAGRAMA DE FLUJO.

### 3.4 - PROGRAMA PRINCIPAL

Es el elemento central de la estructura modular del programa. De él salen y convergen todas las subrutinas que complementan al sistema. Coordina todas las actividades que se van a desarrollar para la obtención de la propiedad requerida y presenta además las siguientes capacidades:

1.- Efectúa la trasposición de la matriz formada por el banco de datos y la ordena en una forma adecuada para extraer de ella las constantes requeridas por las subrutinas de evaluación de propiedades.

2.- Hace una primera lectura de datos; lee la propiedad, la opción de salida o condición, el número de componentes, temperatura y presión de cálculo, temperatura de referencia y la clave que designa la opción de unidades utilizada por el usuario al suministrar los datos.

3.- Si el número de compuestos no es perforado o es mayor que 10 - llama al subprograma ERROR que clasifica e imprime el anuncio apropiado, dándose por terminada la ejecución.

4.- Selecciona por comparación la opción de salida deseada y envía el control hasta la sección correspondiente (PUROS o MEZCLAS). De no estar catalogada la opción o estar mal perforada llama a la subrutina ERROR que escribe el letrero que indica la falta cometida, también para este caso termina el desarrollo del programa.

5.- Contiene un segmento que trata a los compuestos puros, lleva a cabo los siguientes pasos:

- a) Da lectura al nombre del compuesto.
- b) Determina la clave del material por medio del subprograma SELEC.
- c) Separa las diferentes opciones de sustancias puras, en esta parte hace la lectura de la temperatura final e incremento de temperatura o presión final e incremento de presión si lo que se desea es la generación de tablas o gráficas por variación de temperatura o presión, respectivamente.



- d) Si las unidades de los datos son diferentes a las manejadas internamente por el programa ( $^{\circ}\text{K}$ , atm) se efectúa el cambio de -- unidades mediante la subrutina SIDEU.
- e) Fija el estado físico del compuesto al comparar su presión de -- vapor evaluada a la temperatura de cálculo o inicial, por el -- mismo programa, según sea el caso con la presión de cálculo que se da como dato.
- f) Escribe tabla de las constantes físicas más significativas del -- compuesto en cuestión.
- g) Separa nuevamente las opciones para materiales puros con el fin -- de llamar a los programas secundarios correspondientes y que -- evalúen e impriman los resultados convenientes de acuerdo al -- deseo del usuario.

6.- Comprende una sección que maneja las opciones de mezclas:

- a) Lee estado físico y nombres de los componentes de la mezcla, -- así como sus fracciones mol.
- b) Les confiere a los contribuyentes sus claves respectivas a tra-- vérs de la subrutina SELEC.
- c) Comprueba que la suma de las fracciones mol sea igual a uno, de -- no ser así se marca el error correspondiente y cesa la ejecución -- del programa.
- d) Ordena la evaluación de la propiedad de la mezcla a una presión -- y temperatura dadas, realizando antes el cambio de unidades si -- es necesario.
- e) Si se van a generar tablas o gráficas se lee la temperatura fi-- nal e incremento de temperatura o presión final e incremento de -- presión si la opción así lo requiere. De nuevo se cambian uni-- dades con oportunidad.
- f) En este momento, manda llamar al subprograma apropiado (TABLAM-- o GRAFIM) para ordenen el cálculo de la propiedad y escriba re-- sultados.

7.- Finalmente, efectúa la terminación normal del programa.

```

C
C SISTEMA DE EVALUACION DL PROPIEDADES TERMODINAMICAS Y DE TRANSPORTE
C                                     *** JOR/PROP ***
C                                     -- DIVISION DE ESTUDIOS SUPERIORES --
C                                     INGENIERIA QUIMICA Y DEPTO. DE COMPUTACION
C                                     FACULTAD DE QUIMICA
C                                     UIIAM
C
C PROGRAMA PRINCIPAL

```

```

FILE 5=FILES,UNIT=READER,RECORD=10
COMMON/AUX/ARR(38,55)
COMMON/CUNS/VAL(55,38)
COMMON/EST/T,P,CDD,TRE,INDEX
COMMON/MT/TF,TINC,PF,PINC,AEDO
COMMON/MIX/NCOMP,X(10),ANOM(40),COND,INDICE(10)
DO 40 I=1,55
DO 40 J=1,38
40 VAL(I,J)=ARR(J,I)
READ (5,49) PROP, COND, NCOMP
49 FORMAT (A6,23X,A6,4X,I2)
IF (NCOMP.GT.0.OR.NCOMP.LE.10) GO TO 48
CALL ERROR (1)
48 READ (5,51) T, P, TRE, DU
51 FORMAT (3F10.4,A6)
IF (COND.EQ.6HPURD ) GO TO 10
IF (COND.EQ.6HHEZCLA) GO TO 50
IF (COND.EQ.6HTTPURD) GO TO 10
IF (COND.EQ.6HTPPURD) GO TO 10
IF (COND.EQ.6HGTPURD) GO TO 10
IF (COND.EQ.6HGPPURD) GO TO 10
IF (COND.EQ.6HTTMEZC) GO TO 50
IF (COND.EQ.6HTPMEZC) GO TO 50
IF (COND.EQ.6HGTMEZC) GO TO 50
IF (COND.EQ.6HGPMZC) GO TO 50
CALL ERROR (5)
10 READ (5,52) (ANOM(JJ),JJ=1,4)
52 FORMAT (4A6)
CALL SELEC (ANOM,INDEX)
IF (COND.EQ.6HPURD ) GO TO 29
IF (COND.EQ.6HTPPURD.OR.COND.EQ.6HGPPURD) GO TO 31

```

```

READ (5,59) TF,TINC
59 FORMAT (2F10.3)
GO TO 29
31 READ(5,59) PF,PINC
29 IF(OU.EQ.6)KATH ) GO TO 901
CALL SIDEU (OU)
901 CALL PVAP(PV)
PV=PV/760.
IF (PV.GT.P) GO TO 81
ADD=3HLIQ
GO TO 83
81 ADD=3HGAS
83 WRITE(6,500) (ANOM(JJ),JJ=1,4),INDEX,ADD,(VAL(INDEX,J),J=8,14),VAL
1(INDEX,37),(VAL(INDEX,J),J=15,20)
500 FORMAT (10X,"CONSTANTES FISICAS",//,10X,"COMPUUESTO.",31X,4A6//,10X
1,"CLAVE",36X,I2//,10X,"ESTADO FISICO",28X,A3//,10X,"PESO MOLECULAR
2",26X,F6.2//,10X,"TEMP. NORMAL DE EBULLICION K",12X,F6.2//,10X,"DE
3NSIDAD RELATIVA A 25 C G/CC",13X,F6.4//,10X,"TEMPERATURA CRITICA K
4",19X,F6.2//,10X,"PRESION CRITICA ATM",21X,F6.2//,10X,"DENSIDAD CR
5ITICA G/CC",21X,F6.4//,10X,"FACTOR COMP. CRITICO",22X,F5.3//,10X,"
6FACTOR ACENTRICO",26X,F5.3//,10X,"CONSTANTES DLL CP GASEOSO",//,10
7X,"A",39X,F10.6//,10X,"B",40X,E13.6//,10X,"C",40X,E13.6//,10X,"D",
840X,E13.6//,10X,"LIMITE INFERIOR TEMP. K",17X,F5.1//,10X,"LIMITE S
9UPERIOR TEMP. K",16X,F6.1//)
WRITE (6,501) (VAL(INDEX,J),J=21,22),VAL(INDEX,36),(VAL(INDEX,J),J
1=23,24),T,P,TRF
501 FORMAT (10X,"CONSTANTES DEL CP LIQUIDO",//,10X,"A",40X,F7.3//,10X,
1"B",40X,E13.6//,10X,"C",40X,E13.6//,10X,"LIMITE INFERIOR TEMP. K",
217X,F6.1//,10X,"LIMITE SUPERIOR TEMP. K",17X,F6.1//,10X,"TEMPERAT
3URA DE CALCULO K",15X,F7.2//,10X,"PRESION DE CALCULO ATM",19X,F5.2
4,//,10X,"TEMPERATURA DE REFERENCIA K ",11X,F7.2//)
IF (ADD.EQ.3HGAS) GO TO 82
EDU=0
GO TO 84
82 EDU=1
84 IF(COND.NE.6HPURO ) GO TO 152
CALL SELECP(PROP)
GO TO 950
152 IF(COND.EQ.6HGTPURO.OR.COND.EQ.6HGPPURO) GO TO 57
CALL TABLA (PROP)
GO TO 950
57 CALL GRAFIC (PROP)
GO TO 950
50 READ (5,44) AEDD
44 FORMAT (A3)
IF (AEDD.EQ.3HLIQ) GO TO 102
EDD=1
GO TO 21
102 EDD=0
21 DO 88 I=1,NCOMP
READ(5,53) (ANOM(KK),KY=1,4), X(I)
53 FORMAT (4A6,5X,F6.4)
CALL SELEC (ANOM,INDEX)
INDIC(I)=INDEX
88 CONTINUE
SUM=0.0
DO 112 I=1,NCOMP
112 SUM=SUM+X(I)
IF (SUM.EQ.1.0000) GO TO 101

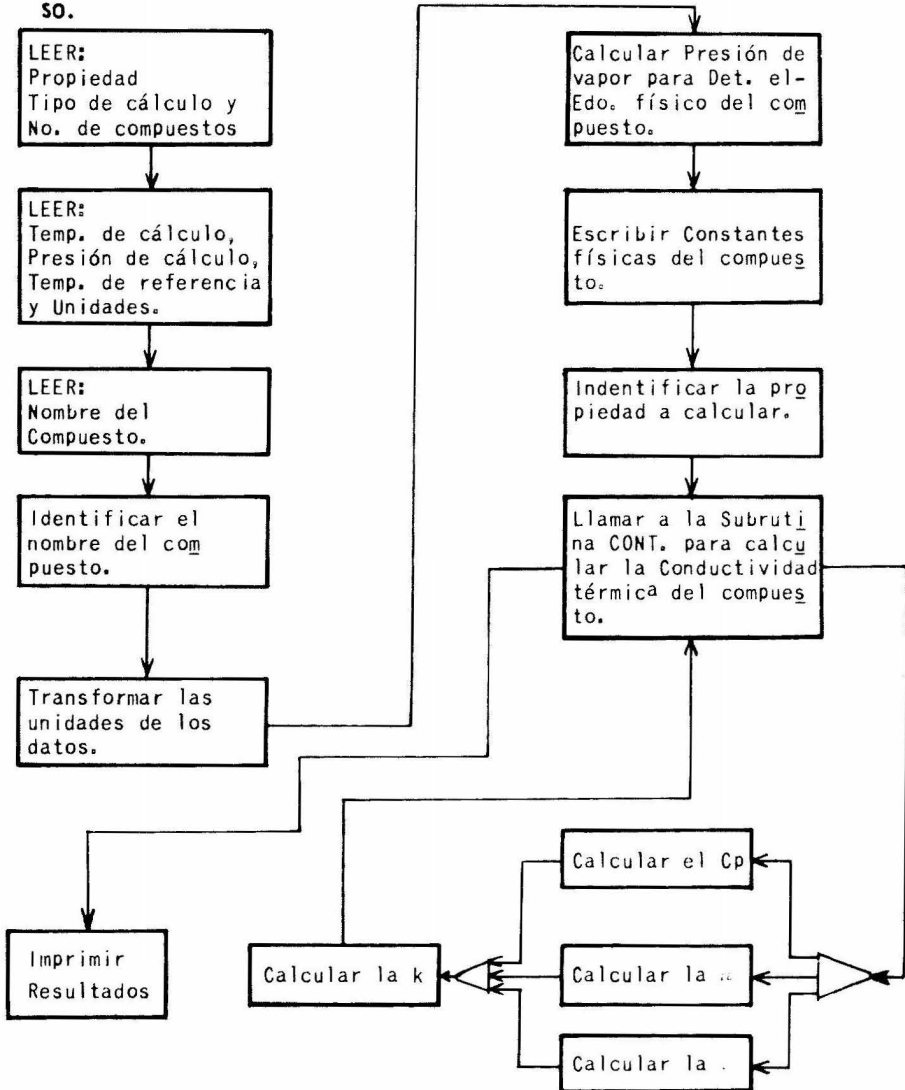
```

```

CALL ERRGR (6)
101 IF(COND.NE.6HMEZCLA) GO TO 20
    IF (OU.EQ.6HKATH ) GO TO 151
    CALL SIDEU (OU)
151 CALL SELECH (PROP)
    GO TO 950
    20 IF(COND.EQ.6HTTMEZC.OR.COND.EQ.6HGTMEZC) GO TO 13
    READ (5,59) PF, PINC
    GO TO 14
    13 READ (5,59) TF, TINC
    14 IF (OU.EQ.6HKATH ) GO TO 154
    CALL SIDEU (OU)
154 IF(COND.EQ.6HGTMEZC.OR.COND.EQ.6HGPMEZC) GO TO 61
    CALL TABLAM (PROP)
    GO TO 950
    61 CALL GRAFIM (PROP)
950 CALL EXIT
END

```

3.5.- EJEMPLO QUE MUESTRA EL CAMINO SEGUIDO POR LA COMPUTADORA PARA EVALUAR UNA PROPIEDAD, EN ESTE CASO: CONDUCTIVIDAD TERMICA DE UN COMPUESTO PURO EN ESTADO GASEOSO.



### 3.6.- SUBROUTINAS QUE EFECTUAN LA ESTIMACION DE PROPIEDADES

#### 3.6.a.- SUBROUTINA CALV.

Nombre	Descripción	Ctes. Físicas Requeridas.	Información suministrada por el usua- rio	Unidades de Salida.
CALV	Calor latente de Vap. en el punto normal de Eb. por el método de- Procopio-Jen Su; ex- trapolación a cual- quier Temp. por la co- rrelación de Watson.	TC, TPE, PC, M	T	BTU/Lb.

C SUBROUTINA PARA CALCULAR EL CALOR LATENTE DE VAPORIZACION EN BTU/LB  
C POR EL METODO DE PROCGPIU Y JEN SU

```
SUBROUTINE CALV(HV)
COMMON/CONS/VAL(55,38)
COMMON/EST/T,P,CDD,TRE,INDEX
TC=VAL(INDEX,11)
TPE=VAL(INDEX,9)
PC=VAL(INDEX,12)
IF (T.GE.TC) GO TO 25
HV=(2.034*TPE*ALOG(PC)*(1.-1./PC))/(1.-TPE/TC)+((1.-T/TC)/(1.-TPE/
1TC))*0.38
GO TO 20
25 WRITE(6,201)
201 FORMAT (10X,"CALOR LATENTE: LA TEMPERATURA ES MAYOR QUE LA TEMPERA
1TURA CRITICA")
20 RETURN
END
```

N O M E N C L A T U R A.

Descripción		Calculada	Almacenada en el Banco de Datos.
TC	Temperatura Crítica		X
TPE	Temperatura en el - Pto. Normal de Eb.		X
PC	Presión Crítica.		X
HV	Calor Latente de Vap.	X	



3.6.b.- SUBROUTINA CAPC.

Nombre	Descripción	Ctes. Físicas Requeridas.	Datos Props. por usuario.	Unidades de salida.
CAPC	Cálculo del Cp mediante la Ec. del polinomio - para compuestos puros.	TC, PC, M, W y Ctes. A, B, C, D	T, P	Cp.- Cal/gmol-°K

C SUBROUTINA PARA CALCULAR EL CP DE UN COMPUESTO EN CAL/G-MOL-K  
 C MEDIANTE LA ECUACION DEL POLINOMIO

```

SUBROUTINE CAPC(CP)
COMMON/CUNS/VAL(55,38)
COMMON/EST/T,P,FDO,TRE,INDEX
M= VAL(INDEX,8)
TC= VAL(INDEX,11)
PC=VAL(INDEX,12)
W=VAL(INDEX,37)
IF(EDO.EQ.1) GO TO 100

```

C  
 C CALCULO DEL CP DEL COMPUESTO LIQUIDO  
 C

```

T=T-273.1
A=VAL(INDEX,21)
B=VAL(INDEX,22)
C=VAL(INDEX,36)
IF (A.EQ.0) GO TO 13
CP=A+B*T+C*T*T
T=T+273.1
GO TO 20
13 CALL ERRUR (9)
RETURN

```

C  
 C CALCULO DEL CP DEL COMPUESTO GASEOSO  
 C

```

100 A=VAL(INDEX,15)
B=VAL(INDEX,16)
C=VAL(INDEX,17)
D=VAL(INDEX,18)
CPO= ((D*T+C)*T+B)*T+A

```

C  
 C CORRECCION POR PRESION  
 C

```

TR=T/TC
PR= P/PC
FAC= -PH*((0.660-0.92*W)*TR**(-2)+(0.831+3.0*W)*TR**(-3.)+(0.145+
11.16*W)*TR**(-4.)+(0.526*W*TR**(-9.)))
CP= CPO-((1.987/M)*FAC)
20 RETURN
END

```

N O M E N C L A T U R A .

Descripción		Calculada	Almacenada en el
T	Temperatura de cálculo		
P	Presión de cálculo.		
EDO	Estado físico.	X	
INDEX	Clave del compuesto.		X
CP	Capacidad calorífica.	X	
<u>Gas</u>			
M	Peso molecular.		X
W	Factor acéntrico.		X
TC	Temperatura Crítica.		X
PC	Presión crítica.		X
TR	Temperatura reducida	X	
PR	Presión reducida.	X	
FAC	Factor de corrección por el efecto de presión en el Cp.	X	
CPO	Cp a presiones bajas	X	
A, B, C, D	Ctes de la Ec. polinomial.		X
<u>Liq.</u>			
A, B, C	Ctes. de la Ec. Polinomial.		X

3.6.c.- S U B R U T I N A M C A P C.

Nombre	Descripción	Ctes. Físicas requeridas.	Información Sumi- nistrada pro el- usuario.	Unidades de Salida.
MCAPC	Cálculo del Cp me- diante la Ec. del- polinomio para mez- clas de compuestos puros.	Ninguna.	X(1)	Cp. -Cal/gmol-°K

C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA CAPACIDAD CALORIFICA DE UNA MEZCLA  
C DE GASES O LIQUIDOS.

```
SUBROUTINE MCAPC(CPM)
COMMON/CONS/VAL(55,38)
COMMON/EST/T,P,EDO,TRL,INDEX
COMMON/MIX/NCOMP,X(10),ANDH(40),COND,INDICE(10)
DIMENSION CP1(10)
SUM=0.0
DO 10 I=1,NCOMP
INDEX=INDICE(I)
CALL CAPC (CP)
CP1(I)=CP
INDICE(I)=INDEX
10 SUM=SUM+X(I)*CP1(I)
CPH=SUM
RETURN
END
```

N O M E N C L A T U R A .

Descripción.		Calculada	Almacenada en el banco de - datos.
X (I)	Fracción mol de cada componente.		
NCOMP	Número de componentes de la mezcla		
INDEX	Clave de cada compuesto.		X
INDICE	Clave de cada compuesto.		X
CPI(I)	Cp. de Cada compuesto.	X	
SUM	Suma	X	
CPM	Cp de la mezcla.	X	

3.6.d.- SUBROUTINA CONT.

NOMBRE	DESCRIPCION	CONSTANTES FISICAS Y PROPIEDADES REQUERIDAS	INFORMACION SUMINISTRADA POR EL USUARIO	UNIDADES DE SALIDA
CONT (CT)	<p>Cálculo de la conductividad térmica del compuesto puro líquido por el método de Robbins---Kingrea (orgánicos)</p> <p>Cálculo de la conductividad térmica del compuesto puro líquido por el método corregido de Palmer (inorgánicos).</p> <p>Cálculo de la conductividad térmica del compuesto puro gaseoso por el método corregido de Eucken.</p> <p>Corrección por presión de la conductividad térmico del gas por el método de Stiel y Thodos.</p>	<p>TPW, PC, TC, Cp DE20, D, H, LPE M, TCR</p> <p>CP, DR, M, TPE, TR, LPE</p> <p>V, CP, M</p> <p>D, DENC, ZC, M PC, TC, CT</p>	<p>T, P.</p>	<p>BTU/hr-ft<sup>2</sup> - °F/ft</p>

C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA CONDUCTIVIDAD TERMICA EN BTU/HR-PIE-F

```
SUBROUTINE CONT(CT)
COMMON/CONS/VAL(55,38)
COMMON/EST/T,P,EDO,TRC,INDEX
DP=VAL(INDEX,10)
M=VAL(INDEX,8)
TPE=VAL(INDEX,9)
TC=VAL(INDEX,11)
TP=T/TC
PC=VAL(INDEX,12)
IF(EDO.EQ.1) GO TO 700
```

C

C CALCULO DE LA CONDUCTIVIDAD TERMICA DEL LIQUIDO

C

```
LPE=2.034*TPE*ALOG(PC)*(1.-1./PC)/(1.-TPE/TC)
CALL CAPC(CP)
IF (VAL(INDEX,3).NE.0) GO TO 98
IF (VAL(INDEX,30).EQ.0) GO TO 98
```

C

C CALCULO DE LA CONDUCTIVIDAD TERMICA  
C DE LIQUIDOS ORGANICOS

C POR EL METODO DE RUBBINS-KINGREA

C

```
TCR=TC*1.8
TBR=TPE*1.8
DE20= VAL(INDEX,30)
CALL DEN(D)
CP=CP/M
HV=LPE*M
DS=(HV/TBR)+1.987*ALOG10(492./TBR)
H=VAL(INDEX,38)
IF (DE20-0.99406) 88, 38, 89
```

89 N=0

GO TO 99

88 N=1

```
99 CT=((86.0-4.83*H)/(1000.*DS))*((0.55/(T*1.8/TCR))**N)*(CP*(D**1.33  
1)/(M**0.33333))
RETURN
```

C

C CALCULO DE LA CONDUCTIVIDAD TERMICA

C DE LIQUIDOS INORGANICOS POR EL

C METODO CORREGIDO DE PALMER

C

```
98 CT=41.2*CP*((DR/M)**1.333)*(TPE/LPE)*(0.55/TR)
RETURN
```

C

C CALCULO DE LA CONDUCTIVIDAD TERMICA DEL GAS

C POR EL METODO CORREGIDO DE EUCKEN

C

```
700 CALL CAPC(CP)
CP=CP/M
CALL VIS(V)
CT=2.42*V*(CP+(2.48/M))
IF (P.GT.10.0) GO TO 11
RETURN
```

C

C CORRECCION POR PRESION DEL GAS POR EL METODO DE STEEL Y THODOS

C

```
11 CALL DEN(D)
```



```

D=D/62.37
DENC=VAL(INDEX,13)
DENR=D/DENC
ZC=VAL(INDEX,14)
IF (DENR.LE.0.1) GO TO 12
10 GAM=(TC**0.166666)*(M**0.5)/(PC**0.666666)
IF (DENR.GE.0.5) GO TO 20
CT= (14.0*(10.**(-8))*(EXP(-0.535*DENR)-1.)))/((ZC**5)*GAM)+(CT)
RETURN
20 IF (DENR.GT.2.0) GO TO 30
CT= (13.1*(10.**(-8))*(EXP(0.67*DENR)-1.069)))/((ZC**5)*GAM)+(CT)
RETURN
30 IF (DENR.GT.2.8) GO TO 40
CT= (2.976*(10.**(-8))*(EXP(1.155*DENR)+2.016)))/((ZC**5)*GAM)+CT
RETURN
40 CT=1.0
WRITE (6,50)
50 FORMAT(15X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA: NO SE CALCULO DEBIDO",/,15X,"A
LAS ALTAS CONDICIONES DE PRESION.",/)
GO TO 113
12 WRITE (6,13)
13 FORMAT (15X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA: NO SE CORRIDIO",/,15X,"POR PRE
SION PUES NO SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES",/)
113 RETURN
END

```

N O M E N C L A T U R A .

Descripción.		Calculada	Almacenada en el Banco de Datos.
<u>Líquidos.</u>			
LPE	Calor Lat. de Vap. al Pto. Normal de Ebullición.	X	
TPE	Temperatura en el Pto. Normal de Ebullición.		X
CP	Calor específico.	X	
M	Peso molecular.		X
CT	Conductividad. Térmica.	X	
<u>Orgánicos.</u>			
PC,	Presión Crítica		X
TC	Temperatura Crítica.		X
DE20	Densidad a 20 °C		X
D	Densidad, lb/ft <sup>3</sup>	X	
H	Cte. Estructural		X
<u>Inorgánicos.</u>			
DR	Densidad Reducida.	X	
TR	Temperatura Reducida.	X	
<u>Gasea.</u>			
CP	Calor específico	X	
V	Viscosidad.	X	
M	Peso molecular.		X
D	Densidad.	X	
DENC.	Densidad Crítica		X
ZC	Factor de Compresibilidad Crítico.		X
CT	Conductividad Térmica.	X	
DENR	Densidad Reducida.	X	

3.6.e. - SUBROUTINA MCONT.

NOMBRE	DESCRIPCION	CONSTANTES FISICAS Y PROPIEDADES REQUERIDAS	INFORMACION SUMINISTRADA POR EL USUARIO	UNIDADES DE SALIDA
MCONT (CTM)	<p>Cálculo de la conductividad térmica de la mezcla gaseosa por el método de Lindsay y Bromley.</p> <p>Corrección por presión de la conductividad térmica de la mezcla gaseosa por el método de Stiel y Thodos</p> <p>Cálculo de la conductividad térmica de la mezcla líquida por el método de Jordan y Costes.</p>	<p>CT, V, TPE, M</p> <p>D, M, TC, DC, PC, ZC, CT, DM</p> <p>CT</p>	<p>T, P, X.</p>	<p>BTU/hr-ft - F/ft</p>

C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA CONDUCTIVIDAD TERMICA PARA MEZCLAS  
 C EN BTU/HR-FT-F

```

SUBROUTINE MCDHT (CTM)
COMMON/EST/T,P,FDD,TRE,INDEX
COMMON/CUMS/VAL(55,38)
COMMON/MIX/NCOMP,X(10),ANOH(40),COND,INDICE(10)
DIMENSION V1(10),CT1(10),D1(10),TPE(10),M(10),TC(10),DC(10),ZC(10)
1,VC(10),A11(10,10),PM(10)
IF (EDD.EQ.0) GO TO 801

```

C  
 C CALCULO DE LA CONDUCTIVIDAD TERMICA DE LA MEZCLA GASEOSA  
 C POR EL METODO DE LINDSAY-BROMBLEY  
 C

```

DO 350 I=1, NCOMP
INDEX=INDICE(I)
CALL VIS (V)
V1(I)=V
CALL CONT (CT)
CT1(I)=CT
INDICE(I)=INDEX
TPE(I)= VAL(INDICE(I),9)
M(I)= VAL(INDICE(I),8)
350 CONTINUE
DO 100 I=1, NCOMP
DO 100 J=1, NCOMP
SI=1.5*TPE(I)
SJ=1.5*TPE(J)
SIJ=SQRT(SI*SJ)
100 A11(I,J)=0.250*(1.+(V1(I)/V1(J)) *(M(J)/M(I))**0.75*((1.+SI/T)/(1
1.+SJ/T))**0.50)**2.0*((1.+SIJ/T)/(1.+SI/T))
TC1=0
DO 202 I=1, NCOMP
SUM=0.
DO 222 J=1, NCOMP
IF (J=I) 110, 111, 110
110 SUM=SUM+A11(I,J)*X(J)/X(I)
111 CONTINUE
222 CONTINUE
202 TC1=TC1+CT1(I)/(1.+SUM)
CTM=TC1
IF (P.GT.1.) GO TO 80
RETURN

```

C  
 C COPRECCION POR PRESION MEDIANTE  
 C EL METODO DE STIELL Y THODUS.  
 C

```

80 DO 150 I=1, NCOMP
INDEX=INDICE(I)
CALL DEN (D)
D1(I)=D
INDICE(I)=INDEX
M(I)= VAL(INDICE(I),8)
TC(I)= VAL(INDICE(I),11)
DC(I)= VAL(INDICE(I),13)
ZC(I)= VAL(INDICE(I),14)
VC(I)=(1./DC(I))*(1000./M(I))
VCI(I)=(1./DC(I))
150 CONTINUE
TCM=0.

```

```

VCH=0.
ZCH=0.
WTH=0.
DO 200 I=1, NCOMP
VCH=VCH+X(I)*VC(I)
TCH=TCH+X(I)*TC(I)
ZCH=ZCH+X(I)*ZC(I)
WTH=WTH+X(I)*M(I)
200 CONTINUE
PCM=0.08205*TCH*ZCH/VCH
GAMMA=(TCH**0.166667)*SQRT(WTH)/(PCM**0.66667)
CALL MDEN(DM)
DR=DM*VCH**454.**28.32/WTH
IF (DR=0.50) 210,220,220
210 KDEP=14.0*(EXP(0.535*DR)-1.0)*1.E-8/(GAMMA*ZCH**5)
GO TO 300
220 IF (DR=2.0) 230,240,240
230 KDEP=13.10*(EXP(0.67*DR)-1.069)*1.E-8/(GAMMA*ZCH**5)
GO TO 300
240 IF (DR=2.8) 250,250,260
260 WRITE (6,19)
19 FORMAT(15X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA: NO SE CALCULO DEBIDO",/,15X,"A
QUE LA PRESION ES ALTA PARA ESTE CALCULO.",/)
CTM=1.0
GO TO 500
250 CONTINUE
KDEP=2.972*(EXP(1.155*DR)+2.016)*1.E-8/(GAMMA*ZCH**5)
300 CTM=CTM+KDEP
500 RETURN
C
C CALCULO DE LA CONDUCTIVIDAD TERMICA DE LA MEZCLA LIQUIDA
C POR EL METODO DE JURDAN-CUATES
C
801 IF (NCOMP.GT.2) GO TO 123
GO TO 20
123 CALL ERROR (7)
20 DO 60 J=1,NCOMP
PM(J)=VAL(INDICE(J),8)
INDEX=INDICE(J)
CALL CNT (CT)
CT1(J)=CT
INDICE(J)=INDEX
60 CONTINUE
DO 880 I=1,1
DO 880 J=2,2
FJ=EXP(ABS(CT1(J)-CT1(I)))-0.5*(CT1(I)+CT1(J))
FKM=X(I)*ALOG (CT1(I))+X(J)*ALOG (CT1(J))+X(I)*X(J)*ALOG (FJ)
880 CONTINUE
CTM=2.71828**FKM
RETURN
END

```

N O M E N C L A T U R A

Descripción		Calculada.	Almacenada en el Banco de Datos.
CT	Conductividad Térmica.	X	
CTM	Conductividad Térmica de la Mezcla.	X	
X	Fracción Mol.		
<u>Gases.</u>			
M	Peso molecular		X
D	Densidad	X	
TC	Temperatura Crítica		X
PC	Presión Crítica.		X
ZC	Factor de Compresibilidad Crítico.		X
DC	Densidad Crítica.		X
DM	Densidad de la mezcla.	X	
TPE	Temperatura en el Pto. de Ebullición normal.		X
T	Temperatura de Cálculo.		
V	Viscosidad.	X	
<u>Líquidos.</u>			
CTM	Conductividad de la Mezcla	X	
CT	Conductividad térmica	X	
X	Fracción Peso.		

3.6. f.- DENSIDAD DE COMPUESTOS PUROS

NOMBRE	DESCRIPCION	CONSTANTES FISICAS REQUERIDAS	INFORMACION SU MINISTRADA POR EL USUARIO	UNIDADES DE SALIDA
DEN	<p>Densidad del líquido para compuestos puros usando la correlación de Gold - hammer modificada.</p> <p>Densidad del gas para -- compuestos puros mediante el concepto del factor de compresibilidad.</p>	<p>TC, DI, TPE, M</p> <p>M</p>	<p>T, P</p>	<p>LB/PIE<sup>3</sup></p>

C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA DENSIDAD DE UN COMPUESTO EN LBS/PIE<sup>3</sup>

```
SUBROUTINE DEN(D)
COMMON/CONS/VAL(55,38)
COMMON/EST/T,P,FDD,TRL,INDEX
M=VAL(INDEX,8)
IF (EDD.EQ.1) GO TO 101
```

C  
C CALCULO DE LA DENSIDAD DEL COMPUESTO LIQUIDO POR MEDIO DE  
C LA CORRELACION MODIFICADA DE GOLDHAMMER.

```
C
TC=VAL(INDEX,11)
TPE=VAL(INDEX,9)
D1=VAL(INDEX,35)
TR=T/TC
DVB=H/(82.06*TPE)
A=5.*((T/TPE)-1.)
DV=(10.**A)*DVB
IF (T.GE.TC) GO TO 25
D=DV+D1*((1.-TR)**0.3)
D=D*62.37
GO TO 20
25 WRITE (6,26)
26 FORMAT (15X,"DENSIDAD: LA TEMPARATURA DE CALCULO ES MAYOR",/,15X,"
1QUE LA TEMPERATURA CRITICA DEL COMPUESTO",/)
20 RETURN
```

C  
C CALCULO DE LA DENSIDAD DEL COMPUESTO GASEOSO UTILIZANDO EL CONCEPTO  
C DEL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD

```
C
101 R=1.314
CALL FCUMP (Z)
60 D=(H*P)/(Z*R*T)
RETURN
END
```



N O M E N C L A T U R A .

DESCRIPCION		CALCULADA	ALMACENADA EN EL BANCO DE DATOS
M	Peso molecular.		X
TPE	Temperatura normal de ebullición.		X
TC	Temperatura crítica.		X
DI	Constante.		X
DVB	Densidad del vapor en el --- punto normal de ebullición.	X	
DV	Densidad del vapor.	X	
A	Variable.	X	
TR	Temperatura reducida.	X	
D	Densidad.	X	
R	Constante de los gases.		
M	Peso molecular.		X
Z	Factor de compresibilidad.	X	

3.6.g.- SUBROUTINA MDEN.

NOMBRE	DESCRIPCION	CONSTANTES FISICAS REQUERIDAS	INFORMACION - SUMINISTRADA - POR EL USUARIO	UNIDADES DE SALIDA
MDEN	<p>Densidad de una mezcla de materiales líquidos empleando las ecuaciones de Yen-Woods.</p> <p>Densidad de una mezcla de gases por medio del factor de compresibilidad.</p>	<p>TC(I), PC(I), ZC(I), M(I), DENC(I)</p> <p>M(I)</p>	<p>Estado físico, T, P, X(I) Número de compuestos.</p>	<p>LB/PIE<sup>3</sup></p>

C SUPROUTINA PARA CALCULAR LA DENSIDAD DE UNA MEZCLA

```

SUBROUTINE MDEL (PM)
COMMON/CONS/VAL(55,38)
COMMON/EST/T,P,EDD,TRE,INDEX
COMMON/MIX/NCOMP,X(10),ANOM(40),COND,INDICE(10)
DIMENSION TC(10),PC(10),DENC(10),ZC(10),VC(10),M(10)
IF (EDD.EQ.1) GO TO 100

C
C DENSIDAD DE LA MEZCLA LIQUIDA POR EL
C METODO ANALITICO DE YEN-WUJDS.
C
DO 10 I=1, NCOMP
TC(I)= VAL(INDICE(I),11)
PC(I)= VAL(INDICE(I),12)
ZC(I)= VAL(INDICE(I),14)
DENC(I)= VAL(INDICE(I),13)
M(I)= VAL(INDICE(I),8)
VC(I)=M(I)/(1000.*DENC(I))
10 CONTINUE
TCM=0.0
VCM=0.0
ZCM=0.0
PM=0.0
DO 20 I=1,NCOMP
TCM=TCM+X(I)*TC(I)
VCM=VCM+X(I)*VC(I)
PM=PM+X(I)*M(I)
20 ZCM=ZCM+X(I)*ZC(I)
PCM=ZCM*TCM*0.08205/VCM
TR=T/TCM
PR=P/PCM
AA=17.4425*214.578*ZCM+989.625*ZCM**2-1522.06*ZCM**3
IF (ZCM=0.26) 111, 111,110
110 BB=60.2091*402.063*ZCM+501.0*ZCM**2+641.0*ZCM**3
GO TO 30
111 BB=-3.28257+13.6377*ZCM+107.4844*ZCM**2-384.21*ZCM**3
30 D=0.93-BB
IF (TR=1.0) 121, 122, 122
122 WRITE (6,17)
17 FORMAT(15X,"DENSIDAD: LA TEMPARATURA REDUCIDA ES MAYOR QUE 1.0",/,
115X,"Y NO SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",/)
GO TO 250
121 RRS=1.0+AA*(1.0-TR)**0.33333+BB*(1.0-TR)**0.66667+D*(1.-TR)**1.333
RHO=RRS/VCM
AAB=245.2568*ZCM-871.2178*ZCM**3+(0.1059735/ZCM**3)-53.36101
DELPR=PR-EXP(2.303*AAB*(1.0-1.0/TR))
DM=RHO*PH/1000.*62.44
IF (DELPR) 250, 250, 50
50 IF (ZCM=0.27) 60, 65, 70
65 DELTA=0.0
GO TO 211
60 IF (ZCM=0.25) 61, 62, 62
61 W1=0.089
W2=-0.4344
A3=0.7915
A4=-0.7654
A5=0.3367
B1=0.0674
B2=-0.06109

```

```

R3=0.06261
R4=-0.2378
R5=0.1665
C1=-0.01393
C2=-0.003459
C3=-0.1611
C4=0.0
D1=-6.550
D2=7.8027
D3=15.344
D4=-37.04
D5=20.169
GO TO 73
62 W1=0.093
W2=-0.3445
A3=0.4042
A4=-0.2083
A5=0.05473
B1=0.0220
B2=-0.003363
B3=-0.07960
B4=0.08546
B5=-0.02170
C1=0.01937
C2=-0.03055
C3=0.06310
C4=0.0
D1=-16.0
D2=30.699
D3=19.645
D4=-81.305
D5=47.031
GO TO 73
70 W1=-0.0817
W2=0.3274
A3=-0.5014
A4=0.3870
A5=-0.1342
B1=-0.0230
B2=-0.0124
B3=0.1625
B4=-0.2135
B5=0.08643
C1=0.05626
C2=-0.3518
C3=0.6194
C4=-0.3809
D1=-21.0
D2=55.174
D3=-33.637
D4=-28.109
D5=26.277
73 EF=W1+W2*(1.0-TR)**0.33333+A3*(1.0-TR)**0.66667+A4*(1.0-TR)+A5*(1.
10-TR)**1.3333
XJ=P1+B2*(1.0-TR)**0.3333+P3*(1.0-TR)**0.66667+R4*(1.0-TR)+B5*(1.0
1-TR)**1.3333
XK=C1+C2*TR+C3*TR*TR+C4*TR**3
XL=D1+D2*(1.0-TR)**0.33333+D3*(1.0-TR)**0.66667 +D4*(1.0-TR)+D5*(1
1.0-TR)**1.3333
IF (DELPR=0.20) 310, 137, 137

```

```

137 DELTA=EE+XJ*ALOG (DELPR)+XK*EXP(XL*DELPR)
    GO TO 211
310 DELTA1=EE+XJ*(-1.60944)+XK*EXP(XL*0.20)
    DELTA=DELTA1*DELPR/0.20
211 EF=0.714-1.626*(1.0-TR)**0.33333-0.646*(1.0-TR)**0.66667+3.699*(1.
10-TR)-2.198*(1.0-TR)**1.3333
    FF=0.268*TR**2.0967/(1.+0.8*(-ALOG (TR))**0.441)
    GG=0.05+4.221*(1.01-TR)**0.75*EXP(-7.848*(1.01-TR))
    HH=-10.6+45.22*(1.0-TR)**0.33333-103.78*(1.0-TR)**0.66667+114.44*(
11.0-TR)-47.38*(1.0-TR)**1.3333
    IF (DELPR=0.20) 212, 213, 213
212 DELR=(EF+FF*(-1.60944)+GG*EXP(HH*0.20))*DELPR/0.20
    GO TO 215
213 DELR=EF+FF*ALOG(DELPR)+GG*EXP(HH*DELPR)
215 RR=RRS+DELR*DELTA
    DM=RR/PM*0.06244
    RETURN
C
C DENSIDAD DE LA MEZCLA DE GASES EMPLEANDO EL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD
C
100 R=1.314
    SUMA=0.0
    DO 112 I=1,NCOMP
    M(I)=VAL(INDICE(I),8)
112 SUMA=SUMA+X(I)*M(I)
    CALL FCOMP(Z)
    VMOL=Z*R*T/P*1./SUMA
    DM=1./VMOL
250 RETURN
    END

```

N O M E N C L A T U R A .

DESCRIPCION		CALCULADA	ALMACENADA EN EL BANCO DE DATOS
<u>LIQUIDO</u>			
TC(I)	Temperatura crítica (componente)		X
PC(I)	Presión crítica (componente).		X
ZC(I)	Factor de compresibilidad crítico (componente).		X
DENC(I)	Densidad crítica (componente).		X
VC(I)	Volumen crítico (componente).	X	
M(I)	Peso molecular (componente).		X
TCM	Temperatura crítica de la mezcla.		
PCM	Presión crítica de la mezcla.	X	
ZCM	Factor de compresibilidad crítico de la mezcla.	X	
VCM	Volumen Crítico de la mezcla.	X	
PM	Peso molecular de la mezcla.	X	
AA, BB, D, RRS, RHO, AAB, EE, DELPR, DELTA, XJ, XL, XK, EF, DELTA1, FE, GG, HH, DELR, RR	Variables de la ecuación de Yen-Woods.	X	
W1, W2, A3, A4, A5, B1, B2, B3, B4, B5, C1, C2, C3, C4, D1, D2, D3, D4, D5	Constantes de la ecuación de Yen-Woods.		
X(I)	Fracción mol del componente.		
DM	Densidad de la mezcla.	X	
<u>GAS.</u>			
R	Constante de los gases.		
M(I)	Peso molecular (componente).		X
SUMA	Peso molecular de la mezcla.	X	
X(I)	Fracción mol del componente.		
Z	Factor de compresibilidad de la mezcla.	X	
VMOL	Volumen específico.	X	
DM	Densidad de la mezcla.	X	

3.6.h.- SUBROUTINA DIFUS.

NOMBRE	DESCRIPCION	CONSTANTES FISICAS Y PROPIEDADES RE-- QUERIDAS	INFORMACION SUMINISTRADA POR EL USUARIO	UNIDADES DE SALIDA
DIFUS (DIM)	<p>Cálculo de la difusión de una mezcla líquida binaria por el método de Scheibel.</p> <p>Cálculo de la difusión de una mezcla gaseosa binaria por el método de Hirschfelder, Bird y Spatz.</p> <p>Corrección por presión de la difusión binaria gaseosa.</p>	M, DC, TC, VC, D, V, M, Z, DIM	T, P	cm./seg

C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA DIFUSION DE UNA MEZCLA BINARIA

```
SUBROUTINE DIFUS (DIM)
COMMON/EST/T,P,EDD,TRE,INDEX
COMMON/COMP/VAL(55,38)
COMMON/MIX/NCOMP,X(10),ANO"(40),COND,INDICE(10)
DIMENSION TC(10), DC(10), VC(10), SIGMA(10), EPS(10),D1(10),V1(10)
1, VM(10), R(10,10), M(10),PC(10)
IF(EDD.EQ.0) GO TO 100
```

C  
C CALCULO DEL COEFICIENTE DE DIFUSION EN SISTEMAS GASEOSOS  
C POR EL METODO DE HIRSCHFELDER-BIRD-SPUTZ.  
C

```
DO 30 I=1,NCOMP
M(I)= VAL(INDICE(I),8)
DC(I)= VAL(INDICE(I),13)
TC(I)= VAL(INDICE(I),11)
VC(I)= M(I)/DC(I)
SIGMA(I)=(5.+VC(I)**0.33333)/6.
EPS(I)=0.75*TC(I)
30 CONTINUE
DO 40 J=1,1
DO 40 I=2,2
IF(J=I) 150, 40, 40
150 SIGMA1=(SIGMA(I)+SIGMA(J))/2.
EPS1=SQRT(EPS(I)*EPS(J))
TEPS=T/EPS1
IF (TEPS<2.3) 80, 80, 85
80 AA=0.1802953
BB=0.7179364
CC=-0.2360089
EE=0.0322566
GO TO 90
85 AA=0.7097108
BB=0.1420688
CC=-0.0107357
EE=0.0002811
90 C1=AA+BB*TEPS+CC*TEPS**2+EE*TEPS**3
COFF=1./C1
R(I,J)=0.002626*SQRT(T**3*((M(I)+M(J))/(M(I)*M(J))**0.5)/(P*(SIGM
1A1**2)*COFF)
DIM=P(I,J)
40 CONTINUE
IF (P.GE.20.) GO TO 31
RETURN
```

C  
C CORRECCION POR PRESION  
C

```
31 CALL FCOMP (Z)
Y1=0.00735*P*SIGMA1**J/Z*T
X1=1.0+1.31*Y1+1.26*Y1**2+1.06*Y1**3
P1=P
P=P1
CALL MDEN(DM)
D''=D''
P=P1
CALL MDEN(DM)
DIM=DIM*D''/(X1*D'')
RETURN
```

C



C CALCULO DEL COEFICIENTE DE DIFUSION EN LIQUIDOS  
 C MEDIANTE EL METODO DE SCHEIBEL.

C

```

100 DO 50 I=1,NCOMP
    INDEX=INDICE(I)
    CALL VIS (V)
    VI(I)=V
    INDICE(I)=INDEX
    DC(I)=VAL(INDICE(I),13)
    M(I)= VAL(INDICE(I),8)
    PC(I)=VAL(INDICE(I),12)
    D1(I)=DC(I)*(0.422*ALOG10(PC(I))+1.981)
    VM(I)=M(I)/D1(I)
50 CONTINUE
    I=1
    J=2
    R(I,J)=8.2*(10.**(-8))*(T/VI(J))*(1.+((3.0*VM(J)/VM(I))**.66667))
    1/(VM(I)**.33333)
    DIM=R(I,J)
    RETURN
    END
  
```

N O M E N C L A T U R A

DESCRIPCION		CALCULADA POR EL SISTEMA	ALMACENADA EN EL BANCO DE DATOS
D	densidad, lb/ft <sup>3</sup>	X	
V	viscosidad, cp	X	
M	peso molecular		X
VM	volumen molar, cm <sup>3</sup> /gmol	X	
T	temperatura de trabajo, °K		
DIM	coeficiente de difusión, cm <sup>2</sup> /seg	X	
M	peso molecular		X
DC	densidad crítica, lb/ft <sup>3</sup>		X
TC	temperatura crítica, °K		X
VC	volumen crítico, cc/gmol	X	
SIGMA	5/6 VC <sup>1/3</sup>	X	
EPS	0.75 TC	X	
T	temperatura de trabajo, °K		
DIM	coeficiente de difusión corregido por presión, cm <sup>2</sup> /seg	X	
Z	factor de compresibilidad	X	
SIGMA	5/6 VC <sup>1/3</sup>	X	
VC	volumen crítico, cc/gmol	X	
DIM	coeficiente de difusión corregido por presión.	X	

3.6.i.- S U B R U T I N A MDIFUS.

NOMBRE	DESCRIPCION	CONSTANTES FISICAS Y PROPIEDADES RE-- QUERIDAS	INFORMACION SUMINISTRADA POR EL USUARIO	UNIDADES DE SALIDA
MDIFUS (MDIM)	<p>Cálculo del coeficiente de difusión de multicomponentes en el estado gaseoso - por el método de Wilke</p> <p>No hay correlación para multi componentes en estado líquido</p>	DIM	T,P,X(I)	cm <sup>2</sup> /seg

C SUBROUTINA PARA CALCULAR DIFUSION DE MULTICOMPONENTES  
C MEDIANTE EL METODO DE WILKE.

```
      SUBROUTINE MDIFUS(MDIM)
      COMMON/EST/T,P,EDO,TRL,INDEX
      COMMON/MIX/NCOMP,X(10),ANDH(40),COND,INDICE(10)
      DIMENSION DIM1(10)
      IF (EDO.EQ.1) GO TO 50
311  CALL ERROR (7)
      50  SUM=0.0
         DO 10 I=1,1
         DO 20 J=2,NCOMP
         IF (I=J) 40, 30, 30
      40  CALL DIFUS (DIM)
         DIM1(J)=DIM
      20  SUM=SUM+X(J)/DIM1(J)
      10  MDIM=(1.0-X(I))/SUM
      30  CONTINUE
         RETURN
      END
```

N O M E N C L A T U R A

DESCRIPCION		CALCULADA POR EL SISTEMA	ALMACENADA EN EL BANCO DE DATOS
DIM	Coefficiente de difusión de la mezcla binaria	X	
X(I)	fracción mol		
MDIM	coeficiente de difusión de multicomponentes gaseosos	X	

3.6.j.- SUBRUTINA ENTALP.

Nombre	Descripción	Ctes. Físicas requeridas.	Información Suministrada por el usuario.	Unidades de salida.
ENTALP	Cálculo de la Entalpia a partir del Cp y corregida con la Ec. de Yen-Alexander. Para los estados físicos líquido y gaseoso.	ZC, TC, PC, Ctes. A,B,C y A,B,C,D,	T, P, TRE	Cal/g-mol

C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA ENTALPIA DE UN COMPUESTO EN CAL/G-MOL  
 C MEDIANTE LA INTEGRACION DEL POLINOMIO

```

SUBROUTINE ENTALP(H)
COMMON/CUNS/VAL(55,38)
COMMON/EST/T,P,EDD,TR,INDEX
ZC=VAL(INDEX,14)
TC=VAL(INDEX,11)
PC=VAL(INDEX,12)
TR=T/TC
PR=P/PC
IF (ZC-0.24) 9, 9, 19
  9 NZ=1
  GO TO 69
19 IF (ZC-0.26) 29, 29, 39
29 NZ=2
  GO TO 69
39 IF (ZC-0.28) 49, 49, 59
49 NZ=3
  GO TO 69
59 NZ=4
69 IF (PR-0.01) 5, 15, 15
  5 WRITE (6,6)
  6 FORMAT (15X,"ENTALPIA: LA PRESION REDUCIDA ES MENOR QUE 0.01 Y NO"
  1,/,25X,"SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",/)
  GO TO 25
15 IF (PR-30.0) 35, 35, 45
45 WRITE (6,16)
16 FORMAT (15X,"ENTALPIA: LA PRESION REDUCIDA ES MAYOR QUE 30.0 Y NO"
  1,/,25X,"SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",/)
  GO TO 25
35 IF (EDD.EQ.1) GO TO 100
C
C CALCULO DE LA ENTALPIA DEL COMPUESTO LIQUIDO
C
  T=T-273.1
  TRE=TRE-273.1
  H=(VAL(INDEX,21)*(T-TRE))+(VAL(INDEX,22)*(T**2/2-TRE**2/2))+(VAL(
  1INDEX,36)*(T**3/3-TRE**3/3))
  TRE=TRE+273.1
  T=T+273.1
C
C CORRECCION POR PRESION
C
  IF (TR-0.5) 55, 65, 65
  55 WRITE (6,137)
137 FORMAT (15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MENOR QUE 0.5 Y"
  1,/,25X,"NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICIONE
  25",/)
  GO TO 25
65 IF (TR-1.0) 75, 14, 14
14 WRITE (6,54)
54 FORMAT(15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MAYOR O IGUAL A 1
  1,0",/,25X,"Y NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ",/,25X,"ES
  2TAS CONDICIONES",/)
  GO TO 25
75 GO TO (85,95,105,115),NZ
85 A=-0.08644293*(PR-4.2)-12.93889*(TR-0.77)+10.81311*(TR-0.77)**2)-

```

```

10.1568094*(PR=4.2)*(TR=0.77)+0.7466842*ALOG (PR)+3.17422*ALOG (PP)
2*ALOG (TR)+2.93056*ALOG (PP)*((ALOG (TR))**2)+12.72429
GO TO 201
95 A=-0.1074635*(PR=4.2)-15.80132*(TR=0.77)-15.18611*((TR=0.77)**2)-
10.1476876*(PR=4.2)*(TR=0.77)+0.7800774*ALOG (PR)+3.154058*ALOG (PR)
2*ALOG (TR)+2.988533*ALOG (PP)*((ALOG (TR))**2)+12.28618
GO TO 201
105 A=-0.1388774*(PR=4.664)-14.56975*(TR=0.79749)-7.812724*((TR=0.7974
19)**2)-0.1642482*(TR=0.79749)*(PR=4.664)+1.036851*ALOG (PR)+4.4634
272*ALOG (PR)*ALOG (TR)+4.525831*ALOG (PR)* (ALOG (TR))**2 +10.86085
GO TO 201
115 A=-0.09572107*(PR=4.2)-9.501235*(TR=0.77)-17.30389*((TR=0.77)**2)-
10.3195707*(PR=4.2)*(TR=0.77)+1.368092*ALOG (PR)+4.227096*ALOG (PR)
2*ALOG (TR)+3.181639*ALOG (PR)*((ALOG (TR))**2)+9.707447
201 H=H-A*TC
25 RETURN

```

C  
C CALCULO DE LA ENTALPIA DEL COMPUESTO GASEOSO

```

100 A=VAL(INDEX,15)
B=VAL(INDEX,16)
C=VAL(INDEX,17)
D=VAL(INDEX,18)
H=(A*(T-TREF))+ (B*(T**2/2-TREF**2/2))+ (C*(T**3/3-TREF**3/3))+
1(D*(T**4/4-TREF**4/4))

```

C  
C CORRECCION DE LA ENTALPIA POR PRESION

```

GO TO (119,129,139),NZ
119 IF (TR=0.8) 159, 169, 169
159 WRITE (6,26)
26 FORMAT (15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MENOR QUE 0.8 Y"
1,/,25X,"NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICIONE
2S",/)
GO TO 509
169 IF (TP=1.7) 179, 179, 189
189 WRITE (6,36)
36 FORMAT(15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MAYOR A 1.7 Y NO"
1,/,25X,"SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",/)
GO TO 509
179 C1=TR/(0.003147*EXP(6.0759*TR)-61.12*(TR=1.0)+EXP(-19.933*(TR=1.))
1+1.9936*EXP((-0.911*(10.*(TR=0.88))**10)))
C2=EXP(17.671-17.63*TR)+0.17-1.1738*EXP(-17.193*(ABS(TR=1.05)))
C3=EXP(52.268-49.188*TR)+24.249*(EXP(-920.5*((TR=1.1)**2)))
C4=0.0032456*(EXP(3.2917*TR))-(EXP(17.3*TR=30.6))
C5=1.9772*EXP(-2.1839*TP)
C6=0.000336*EXP(1.61*TR)-0.0000054*(TR**11.5)
H=1./(-0.023+1.0743*((TR=0.4146)**1.8103))
X=515.-250.*TP
GO TO 201
129 IF (TR=0.75) 199, 209, 209
199 WRITE (6,46)
46 FORMAT (15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MENOR QUE 0.75 Y"
1,/,25X,"NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICION
2S",/)
GO TO 509
209 IF (TP=2.0) 219, 219, 229
229 WRITE (6,56)
56 FORMAT(15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MAYOR A 2.0 Y NO"
1,/,25X,"SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",/)

```



```

GO TO 509
219 C1=0.87*EXP(9.845*(1.-TR))+0.023955*EXP(1.2405*TR)
C2=0.47148*EXP(39.35*(1.-TR))+0.142
C3=3918.*EXP(122.*(1.-TR))+2.0
C4=1.1938*TR-0.20726*(TR**2)-0.90649
C5=3.*EXP(-2.52*TR)
C6=0.004277*(TR-0.895)*EXP((-0.946*((TR-0.895)**2)))
M=1./(0.0853+1.5078*((TR-0.5952)**1.7336))
X=-60.*TR+170.
GO TO 20
139 IF (TR-0.9) 239, 249, 249
239 WRITE (6,76)
76 FORMAT (15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MENOR QUE 0.9 Y"
1,/,25X,"NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICIONE
2S",/)
GO TO 509
249 IF (TR-4.0) 259, 259, 269
269 WRITE (6,86)
86 FORMAT(15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MAYOR A 4.0 Y NO"
1,/,25X,"SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",/)
GO TO 509
259 C1=(40.*EXP(-5.7*TR))/(TR-0.81)+0.01
C2=(0.35*EXP(-26.2*(TR-1.)))/(TR)+0.31
C3=17.25*EXP(-16.7*(TR-1.))+2.75
C4=0.444*(TR-2.)-0.0216*((TR-2.)**2)+0.0610*((TR-2.)**3)-0.0404*((
1TR-2.)**4)+0.6564
IF (TR.GT.2.25) GO TO 88
C5=-0.0697*(TR-2.)+0.0734*((TR-2.)**2)-0.0533*((TR-2.)**5)+0.0125
GO TO 71
88 C5=0
71 C6=0.00301*(TR-0.8)*EXP(-0.87*((TR-0.8)**2))
M=1./(0.1052+1.2044*((TR-0.4429)**2.135))
X=8.5+10.5*((TR-4.)**2)
GO TO 20
149 IF (TR-0.8) 279, 50, 50
279 WRITE (6,96)
96 FORMAT (15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MENOR QUE 0.8 Y"
1,/,25X,"NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICIONE
2S",/)
GO TO 509
50 IF (TR-8.0) 299, 299, 309
309 IF (TP-25.0) 60, 60, 319
319 WRITE (6,106)
106 FORMAT(15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MAYOR A 25.0 Y NO
1,/,25X,"SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",/)
GO TO 509
299 C1=166.*EXP(-5.16*TR)+0.017
C2=0.62*EXP(-18.4*(TR-1.))+0.05
C3=EXP((38.8)/(TR)-34.2)
C4=0.989*((TR-0.75)**1.63)*EXP(-0.3175*(TR-0.75))
C5=0.215*EXP(-0.1045*((TR)**4.935))
C6=0.0564*((TR-0.5)**4.67)*EXP(-2.869*(TR-0.5))
M=(1.-0.0001499*(TR**9.17)*EXP(-1.297*TR))/(0.1879+1.0826*((TR-0.6
15)**1.1726))
X=1.15-0.314*(TR-8.0)**3
GO TO 20
60 A=0.053*TP-0.00341*(TR**2)+0.13*PR-0.00176*(PR**2)-0.02725*TR*PR+
10.000128*TR*(PR**2.)+0.000508*(TR**2)*PR+0.0000634*(TR**3)+0.00002
258*(PR**3)-0.2078
H=H*A*(TC)

```

```

GO TO 25
20 A=1.-C2-C4-C5*PR+C2*(((1./3.1416)*ATAN(C3-(C3*PR))+0.50)**2)
   B=(M*PR*(1.-(PR)/X))/(EXP(-C1*(PR**2))*A*A+C4+C5*PR+C6*(TR**2))
   H=H-B*TC
509 RETURN
   END

```

N O M E N C L A T U R A .

Descripción		Calculada	Almacenada en el banco de datos.
T	Temperatura de cálculo.		
P	Presión de cálculo.		
TC	Temperatura crítica.		X
PC	Presión crítica.		X
ZC	Factor de Compresibilidad crítico.		X
TR	Temperatura reducida	X	
PR	Presión reducida.	X	
NZ	Centinela para escoger la Ec. adecuada en función de Zc.	X	
TRE	Temperatura de referencia.		
INDEX	Clave del compuesto.		X
<u>Gas</u>			
H	Entalpia a presiones bajas	X	
A, B	Factor para corrección por presión.	X	
A, B, C, D	Ctes. de la Ec. del Cp		X
C1, C2, C3 C4, C5, C6 M, X	VARIABLES para la ecuación de corrección por presión sobre la entalpia.	X	
<u>Liq.</u>			
A	Factor de corrección para la entalpia.	X	
A, B, C,	Ctes. de la Ec. del Cp.		X

3.6.k.- SUBRUTINA MENTAL.

Nombre	Descripción	Ctes. Físicas requeridas.	Información Suministrada por el usuario.	Unidades de salida.
MENTAL	Cálculo de la Entalpia para mezclas de compuestos y corregida por presión por la Ec. de Yen-Alexander.	TC, PC, ZC.	T, P	Cal/g-mol

C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA ENTALPIA DE UNA MEZCLA  
C MEDIANTE EL METODO DE YEN-ALEXANDER.

```

SUBROUTINE MENTAL (HM)
COMMON/CONS/VAL(55,38)
COMMON/MIX/NCOMP,X(10),ANOM(40),COND,INDICE(10)
COMMON/EST/T,P,EDG,TRE,INDEX
DIMENSION TC(10), PC(10), VC(10), ZC(10), H1(10),DC(10),M1(10)
DO 13 I=1,NCOMP
TC(I)=VAL(INDICE(I),11)
PC(I)=VAL(INDICE(I),12)
ZC(I)=VAL(INDICE(I),14)
INDEX=INDICE(I)
CALL ENTALP (H)
H1(I)=H
INDICE(I)=INDEX
13 CONTINUE
TCM1=0.0
ZCM=0.0
PCM=0.0
HMO=0.0
DO 190 I=1,NCOMP
TCM1=TCM1+X(I)*TC(I)
ZCM=ZCM+X(I)*ZC(I)
PCM=PCM+X(I)*PC(I)
HMO=HMO+X(I)*H1(I)
190 CONTINUE
PR=P/PCM
TR=T/TCM1
TCM=TCM1
IF (ZCM-0.24) 200, 200, 205
200 NZ=1
GO TO 240
205 IF (ZCM-0.26) 210, 210, 215
210 NZ=2
GO TO 240
215 IF (ZCM-0.28) 220, 220, 230
220 NZ=3
GO TO 240
230 NZ=4
240 IF (PR-0.01) 385, 390, 390
385 WRITE (6,11)
11 FORMAT (15X,"ENTALPIA: LA PRESION REDUCIDA ES MENOR QUE 0.01 Y NO"
1,/,25X,"SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",/)
GO TO 545
390 IF (PR-30.0) 565, 565, 395
395 WRITE (6,18)
18 FORMAT (15X,"ENTALPIA: LA PRESION REDUCIDA ES MAYOR QUE 30.0 Y NO"
1,/,25X,"SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",/)
GO TO 545
565 IF (EDG.EQ.0) GO TO 100
C
C CALCULO DE LA ENTALPIA DE LA MEZCLA GASFOSA
C
GO TO (405,430,455,495), NZ
405 IF (TP-0.8) 410, 415, 415
410 WRITE (6,19)
19 FORMAT (15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MENOR QUE 0.8 Y"

```

```

1,/,25X,"NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICIONE
2S",/)
GO TO 545
415 IF (TR=1.7) 425, 425, 420
420 WRITE (6,20)
20 FORMAT (15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MAYOR QUE 1.7 Y"
1,/,25X,"NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICIONE
2S",/)
GO TO 545
425 C1=TR/(0.003147*EXP(6.07059*TR)-61.12*(TR-1.)*EXP(-19.933*(TR-1.0)
1))+1.9930*EXP(-0.911*(10.0*(TR-0.88))**10)
C2=EXP(17.671-17.63*TR)+0.17-1.1738*EXP(-17.193*ABS(TR-1.05))
C3=EXP(52.268-49.188*TR)+24.249*EXP(-920.5*(TR-1.1)**2)
C4=0.0032456*EXP(3.2917*TR)-EXP(17.3*TR-30.6)
C5=1.9772*EXP(-2.1839*TR)
C6=0.000336*EXP(1.61*TR)-0.0000054*TR**11.5
H=1.0/(-0.023+1.0743*(TR-0.4146)**1.8103)
XD=515.0-250.0*TR
GO TO 520
430 IF (TP=0.75) 435, 440, 440
435 WRITE (6,21)
21 FORMAT (15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MENOR QUE 0.75 Y
1,/,25X,"NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICION
2ES",/)
GO TO 545
440 IF (TR=2.0) 450, 450, 445
445 WRITE (6,22)
22 FORMAT (15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MAYOR A 2.0 Y NO"
1,/,25X,"SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",/)
GO TO 545
450 C1=0.87*EXP(9.845*(1.0-TR))+0.023955*EXP(1.2405*TR)
C2=0.47148*EXP(39.35*(1.0-TR))+0.142
C3=3918.0*EXP(122.0*(1.0-TR))+2.0
C4=1.1938*TR-0.20726*TR*TR-0.90649
C5=3.0*EXP(-2.52*TR)
C6=0.004277*(TR-0.895)*EXP(-0.946*(TR-0.895)**2)
XD=-60.0*TP+170.0
H=1.0/(0.0853+1.5078*(TR-0.5952)**1.7336)
GO TO 520
455 IF (TR=0.9) 460, 465, 465
460 WRITE (6,23)
23 FORMAT (15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MENOR QUE 0.9 Y"
1,/,25X,"NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICIONE
2S",/)
GO TO 545
465 IF (TR=4.0) 475, 475, 470
470 WRITE (6,24)
24 FORMAT (15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MAYOR A 4.0 Y NO"
1,/,25X,"SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",/)
GO TO 545
475 C1=40.0*EXP(-5.7*TR)/(TR-0.81)+0.01
C2=0.35*EXP(-26.2*(TR-1.0))/TR+0.31
C3=17.25*EXP(-16.7*(TR-1.0))+2.75
C4=0.444*(TP-2.0)-0.0215*(TR-2.0)**2+0.0610*(TR-2.0)**3-0.040*(TR
1-2.0)**4+0.0564
IF (TP=2.25) 480,480, 485
480 C5=-0.0697*(TR-2.0)+0.0734*(TR-2.0)**2-0.0533*(TR-2.0)**5+0.0125
GO TO 490
485 C5=0.0
490 C6=0.00301*(TR-0.0)*EXP(-0.87*(TR-0.8)**2)

```

```

X0=8.5+10.5*(TR=4.0)**2
M=1.0/(0.1052+1.2044*(TR=0.4429)**2.135)
GO TO 520
495 IF (TR=0.8) 500, 505, 505
500 WRITE (6,25)
25 FORMAT (15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MENOR QUE 0.8 Y"
1,/,25X,"NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICIONE
25",/)
GO TO 545
505 IF (TR=8.0) 510, 510, 515
515 IF (TR=25.0) 540, 540, 535
535 WRITE (6,26)
26 FORMAT(15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MAYOR A 25.0 Y NO
1,/,25X,"SE INCLUYO UNA CORRELACION PARA ESTAS CONDICIONES.",/)
GO TO 545
510 C1=166.0*EXP(-5.16*TR )+0.017
C2=0.62*EXP(-18.4*(TR=1.0))+0.05
C3=EXP(38.8/TR=34.2)
C4=0.989*(TR=0.75)**1.63*EXP(-0.3175*(TR=0.75))
C5=0.215*EXP(-0.1045*TR**4.935)
C6=0.0564*(TR=0.5)**4.67*EXP(-2.869*(TR=0.5))
X0=1.15-0.314*(TR=8.0)**3
M=(1.-0.0001499*TR**9.17*EXP(-1.297*TR))/(0.1879+1.0826*(TR=0.65)*
1*1.1726)
520 DELP=(M*PR*(1.0-PR/X0))/(EXP(-C1*PR*PR)*(1.0-C2=C4=C5*PR+C2*((1.0/
23.1416)*ATAN(C3=C3*PR)+0.50)**2)+C4+C5*PR+C6*PR*PR)
DELH=(-TCM*DELP)
GO TO 5450
540 DELH=-TCM*(0.053*TR-0.00341*TR*TR+0.13*PR-0.00176*PR*PR-0.02725*TR
2*PR+0.000128*PR*PR*TR+0.000508*TR*TR*PR+0.0000634*TR*TR*TR+0.00002
358*PR*PR* PR=0.2078)
5450 HM=HMO+DELH
545 RETURN
C
C CALCULO DE LA ENTALPIA DE LA MEZCLA DE LIQUIDOS
C
100 IF (TR=0.5) 585, 590, 590
585 WRITE (6,27)
27 FORMAT (15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MENOR QUE 0.5 Y"
1,/,25X,"NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICIONE
25",/)
GO TO 630
590 IF (TR=1.0) 600, 595, 595
595 WRITE (6,28)
28 FORMAT(15X,"ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MAYOR O IGUAL A 1
1.0",/,25X,"Y NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ",/,25X,"ES
28AS CONDICIONES.",/)
GO TO 630
600 GO TO (605,610,615,620),NZ
605 DELH=-TCM*(-0.08644293*(PR=4.2)-12.93889*(TR=0.77)+10.81311*(TR=0.
177)**2-0.1568094*(PR=4.2)*(TR=0.77)+0.7466842*ALOG (PR)+3.17422*AL
20G (PR)*ALOG (TR)+2.930566*ALOG (PR)*(ALOG (TR))**2+12.72429)
GO TO 625
610 DELH=-TCM*(-0.1074635*(PR=4.2)-15.80132*(TR=0.77)-15.18611*(TR=0.7
17)**2-0.1476876*(PR=4.2)*(TR=0.77)+0.7800774*ALOG (PR)+3.154058*AL
20G (PR)*ALOG (TR)+2.968533*ALOG (PR)*ALOG (TR)*ALOG (TR)+12.28618)
GO TO 625
615 DELH=-TCM*(-0.1368774*(PR=4.664)-14.56975*(TR=0.79749)-7.812724*(T
1R=0.79749)**2-0.1642402*(TR=0.79749)*(PR=4.664)+1.036851*ALOG (PR)
2+4.463472*ALOG (PR)*ALOG (TR)+4.525831*ALOG (PR)*(ALOG (TR))**2+10

```

3.86085)

GO TO 625

620 DELH=-TCH\*(-0.09572107\*(PR-4.2)-9.501235\*(TR-0.77)-17.30389\*(TR-0.17)\*\*2-0.3195707\*(PR-4.2)\*(TR-0.77)+1.368092\*ALOG (PR)+4.227096\*ALOG (PR)\*ALOG (TR)+3.181639\*ALOG (PR)\*ALOG (TR)\*ALOG (TR)+9.707447)

625 HM=HHO+DELH

630 RETURN

END



N O M E N C L A T U R A.

Descripción		Calculada	Almacenada en el banco de datos.
X(I)	Fracción mol del componente.		
TC	Temperatura crítica.		X
PC.	Presión crítica.		X
ZC	Factor de compresibilidad crítico		X
TR	Temperatura reducida.	X	
PR	Presión reducida.	X	
TCM	Temperatura Crítica de la mezcla.	X	
PCM	Presión crítica de la mezcla.	X	
ZCM	Factor de compresibilidad crítico de la mezcla.	X	
NCOMP	Número de componentes de la mezcla		
INDEX INDICE	Clave de cada componente de la mezcla.		X
<u>Gas</u>			
H1(I)	Entalpia de cada componente	X	
HMO	Entalpia de la mezcla a baja presión	X	
DEL P	Factor de corrección por presión	X	
DEL H	Desviación de la Entalpia debida a la presión.	X	
HM	Entalpia de la mezcla.	X	
<u>Liq.</u>			
H1(I)	Entalpia de cada componente.	X	
HMO	Entalpia de la mezcla a baja presión	X	
DEL H	Desviación de la entalpia debida a la presión	X	
HM	Entalpia de la mezcla	X	
C1, C2, C3, C4, C5, C6, M, X0	Variables para la ecuación de corrección por presión en la entalpia	X	

3.6.1.- SUBROUTINA FCOMP.

NOMBRE	DESCRIPCION	CONSTANTES FISICAS REQUERIDAS	INFORMACION SUMINISTRADA POR EL USUARIO	UNIDADES DE SALIDA
FCOMP	Factor de compresibilidad de compuestos puros y mezclas a través de la ecuación de estado de -- Redlich-Kwong, modificaciones de Ackerman-Redlich y Gvay-Rent-Zudke - vitch.	PC(1), TC(1), W1(1)	NINGUNA, es un concepto que -- es evaluado -- automáticamente en las estimaciones de densidad.	NINGUNA

C SUBROUTINA PARA CALCULAR EL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD MEDIANTE EL EMPLEO  
 C DE LA ECUACION DE ESTADO DE REDLICH-KWONG MODIFICADA

```

SUBROUTINE FCOMP (Z)
COMMON/CUNS/VAL(55,38)
COMMON/EST/T,P,EDO,TRE,INDEX
COMMON/MIX/NCOMP,X(10),ANOH(40),COND,INDICE(10)
DIMENSION TC1(10),PC1(10),TR1(10),PR1(10),A1(10),B1(10),W1(10)
Y1=0.035
A2=14137.6
A3=1397.124
A4=1.030
A5=13.440
Y2=0.00260913
B2=3.19325
B3=1.77486
B4=0.434418
B5=0.144392
B6=0.00704658
B7=616.830
B8=1.00122
B9=0.0112141
B10=0.0495574
B11=0.000442593
B12=0.0602768
C1=0.825714
C2=0.00736587
C3=0.00255204
C4=0.00115729
C5=0.101212
C6=2.46596
C7=0.220411
C8=0.0161963
D1=-0.04666626
D2=-0.11386032
D3=-41.764551266
D4=40.47298767
D5=12.55135462
D6=-12.55831122
  
```

C  
 C COMPUESTOS PURDS  
 C

```

IF(NCOMP.GT.1) GO TO 70
TC=VAL(INDFX,11)
PC=VAL(INDFX,12)
W=VAL(INDFX,37)
PP=P/PC
TR=T/TC
B=0.086640350*PR/TR
A=0.4274802327*PR/(TR**2.5)
H=A-B*B=B
G=A*B
Z1=0.2
I=0
10 I=I+1
Z1=0.01+Z1
R=Z1**3-Z1**2+H*Z1
IF (I.GE.150) GO TO 20
IF (R.LE.G) GO TO 10
ZPK=Z1
  
```

IF (PR.GT.2) GO TO 25

C

C CALCULO DE LA FUNCION DE DESVIACION

C

```
80 ROL=7000.*(1.-TR)**2+770.*(1.02-PR)**2
   IF (ROL.LE.60.) GO TO 30
   SOL=0.
   GO TO 35
30 SOL=D1*TR*TR*PR*PR*EXP(-ROL)
35 DZ=SOL+W*(0.464419+0.424568*TR*TR)*(PR/(TR**4+PR**4))+W*(D3+D4*TR
  1)*(PR*PR/((1.+TR)**4+PR**4))+(D2+W*(D5+D6*TR))*(PR**3/((1.+TR)**4+
  2PR**4))
   Z=ZRK+DZ
20 RETURN
25 Z2=-Y1*PR**3/(1.0+A2*(TR-1.0)**2+A3*(PR-A4-A5*(TR-1.))**4)+Y2*PR*(
  1TR-B2-B3*PR+B4*PR*TR*TR)*(1.-B5*PR+B6*TR*PR)/(1.+B7*(TR-B8-B9*PR-B
  210*PR*TR)**4)+B11*TR**3*PR**3/(TR**4+B12*PR**4)
   Z3=TR*PR*(TR-1.-0.049*PR)*(C1+C2*PR-C3*TR*PR+C4*TR)/(TR**4+C5*(TR-
  1C6-C7*PR+C8*TR*PR)**4)
   DZ=Z2+W*Z3
   Z=ZRK+DZ
   RETURN
```

C

C SISTEMAS DE MEZCLAS

C

```
70 DO 40 I=1,NCOMP
   W1(I)=VAL(INDICE(I),37)
   TC1(I)=VAL(INDICE(I),11)
   PC1(I)=VAL(INDICE(I),12)
   TR1(I)=T/TC1(I)
   PR1(I)=P/PC1(I)
   A1(I)=0.4274802327*PR1(I)/TR1(I)**2.5
   B1(I)=0.086640350*PR1(I)/TR1(I)
40 CONTINUE
   AM1=0.
   BM=0.
   DO 60 I=1,NCOMP
   AM1=AM1+X(I)*SQRT(A1(I))
60 BM=BM+X(I)*B1(I)
   AM=AM1**2
   HM=AM-BM*B11=BM
   GM=AM*BM
   I=0
   Z1=0.2
15 I=I+1
   Z1=0.01+Z1
   R4=71**3-Z1**2+HM*Z1
   IF (I.GT.150) GO TO 20
   IF (RM.LE.GM) GO TO 15
   ZPK=Z1
   PC2=0.0
   DO 33 I=1,NCOMP
33 PC2=PC2+X(I)*PC1(I)
   PR3=P/PC2
   IF (PR3.GE.?.) GO TO 65
   PCM1=0.
   TCM1=0.
   TCM2=0.
   WM=0.
   DO 88 I=1,NCOMP
```

```

WM=WM+X(I)*W1(I)
PCM1=PCM1+X(I)*TC1(I)/PC1(I)
TCH1=TCH1+X(I)*(TC1(I)**2.5/PC1(I))**0.5
88 TCM2=TCM2+X(I)*TC1(I)/PC1(I)
W=WM
TCM=(TCM1**2/TCM2)**0.66667
PCM=TCM/PCM1
PR=P/PCM
TR=T/TCM
GO TO 80
65 F=0.
C=0.
D=0.
E=0.
DO 100 I=1,NCOMP
F=F+X(I)*TC1(I)/PC1(I)
E=E+X(I)*TC1(I)**1.25/SQRT(PC1(I))
100 C=C+X(I)*W1(I)*TC1(I)/PC1(I)
SUH=0.
DO 45 J=1,NCOMP
45 D=1.+0.5*(C/F-(SUH+X(J)*W1(J)))
PCM=(E*D**1.25/F**1.25)**1.3333
PR=P/PCM
W=C/F
TCM=(E+E*D/F)**0.66667
TR=T/TCM
GO TO 25
END

```

N O M E N C L A T J R A .

DESCRIPCION		CALCULADA	ALMACENADA EN EL BANCO DE DATOS
Y1, Y2, A2, A3, A4, A5, B(I), I=2, 12 C(I), I=1, 8 D(I), I=1, 6	Coefficientes de la función de desviación de Ackerman. Constantes de la modificación de Gray-Rent-Zudkevitch.		
Z1	Factor de compresibilidad --- usado en la iteración.	X	
ZRK	Factor de compresibilidad obtenido por la ecuación original R-K	X	
ROL SOL	Variables de la función de -- desviación de Gray et al.	X	
Z2, Z3	Variables de la modificación de Ackerman.	X	
DZ	Función de desviación.	X	
Z	Factor de compresibilidad.	X	
TC <u>PUROS</u>	Temperatura crítica.		X
PC	Presión crítica.		X
W	Factor acéntrico.		X
A, B, H, G,	Variables de la ecuación original R-K.	X	
R	Coefficiente de la ecuación -- original R-K	X	
X(I) <u>MEZCLAS</u>	Fracción mol del componente.		
WI(I)	Factor acéntrico(componente).		X
TCI(I)	Temperatura crítica(componente).		X
PCI(I)	Presión crítica(componente).		X
TRI(I)	Temperatura reducida para la ecuación original R-K.	X	
PRI(I)	Presión reducida para la ecuación original R-K.	X	
AI(I), BI(I), AMI, AM, BM, HM, GM	Variables de la ecuación original R-K	X	
PC2 PR3	Presión crítica de mezcla por la regla de Kay.		
		X	

PCMI	Variable de la presión crítica de mezcla (Gray et al.).	X	
TCMI, TCM2	Variabes de la temperatura crítica de mezcla (Gray et al.).		
WM	Factor acéntrico de la mezcla (Gray et al.).	X	
TCM	Temperatura crítica de la mezcla.	X	
PCM	Presión crítica de la mezcla.	X	
PR	" reducida de la mezcla.	X	
TR	Temperatura reducida de la mezcla.	X	
F, C, D, F, SUMA	Variabes para obtener las propiedades críticas de mezclas en la función de desviación de Ackerman-Redlich.	X	

3.6.m.- S U B R U T I N A P V A P.

NOMBRE	DESCRIPCION	CONSTANTES FISICAS REQUERIDAS	INFORMACION - SUMINISTRADA - POR EL USUARIO	UNIDADES DE SALIDA
PVAP	<p>Presión de vapor para el intervalo de 10 a 1500 - mmHg por medio de la ecuación semirreducida de Miller.</p> <p>Presión de vapor a temperaturas mayores del punto normal de ebullición usando la ecuación reducida - de Riedel-Plank-Miller.</p>	<p>THV, CLV, TC, M  PC, TC, TPE</p>	<p>T   T</p>	<p>   MMHG</p>



C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA PRESION DE VAPOR

```
SUBROUTINE PVAP(PV)
COMMON/CUNS/VAL(55,38)
COMMON/EST/T,P,EDO,TRE,INDEX
PC=VAL(INDEX,12)
TPE=VAL(INDEX,9)
TC=VAL(INDEX,11)
TPER=TPE/TC
M=VAL(INDEX,8)
TR=T/TC
```

C  
C CALCULO DE LA PRESION DE VAPOR EN EL INTERVALO DE 10 A 1500 MMHG POR L A  
C ECUACION SEMI-REDUCIDA DE MILLER.  
C

```
THV=VAL(INDEX,32)
CLV=VAL(INDEX,31)
HV=CLV*M
C=HV/(2.303*1.987*TC*((1.-THV/TC)**0.38))
D=-1.44779*(TPER**2.-1.)/TPER+(0.60706*(TPER**3.-4.))/TPER
E=C*((TR**2.)*(0.60706*TR-1.44779)-(0*TR)-0.98045)/TR
PV=10**E
PV=PV*760.
IF (PV.GT.1500.) GO TO 59
RETURN
```

C  
C CALCULO DE LA PRESION DE VAPOR SUPERIOR A LOS 1500 MMHG POR MEDIO DE L A  
C CORRELACION DE RIEDEL-PLANK-MILLER  
C

```
59 H=TPER*((ALOG10(PC))/(1.-TPER))
G=0.2271+0.4525*H
GE=(H/G-(1.+TPER))/((1.-TPER)**2.)
A=-(G/TR)*(1.-(TR**2.))+GE*(1.0-TR)**3)
PVR=10.0**A
PV=PVR*PC
PV=PV*760.
RETURN
END
```

N O M E N C L A T U R A .

DESCRIPCION		CALCULADA	ALMACENADA EN EL BANCO DE DATOS
<u>Líquido.</u>			
PC	Presión crítica.		X
TC	Temperatura crítica.		X
TPE	Temperatura normal de ebullición.		X
M	Peso molecular.		X
TPER	Temperatura normal de ebullición reducida.	X	
a) $10 < P^R < 1500$			
CLV	mmHg Calor latente de vaporización-- a una temperatura arbitra-- ria.		X
THV	Temperatura a la que está dado- CLV.		X
HV	Calor latente molar.	X	
C, D, E	Variables de la ecuación de Mi- ller.	X	
PV	Presión de vapor.	X	
b) $P^R < 10$			
H, G, GE, A	Variables de la correlación de- Riedel-Plank-Miller.	X	
PVR	Presión de vapor reducida.	X	
PV	Presión de vapor.	X	

3.6.n.- SUBROUTINA TENS.

NOMBRE	DESCRIPCION	CONSTANTES FISICAS REQUERIDAS	INFORMACION-- SUMINISTRADA-- POR EL USUARIO	UNIDADES DE SALIDA
TENS	Tensión superficial por el método de Mitra-San -- yal.	A, B	T	DINAS/CM

C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA TENSION SUPERFICIAL MEDIANTE LA EXPRESION  
C DE MITRA-SANYAL.

```
      SUBROUTINE TENS (TS)
      COMMON/CONS/VAL(55,38)
      COMMON/EST/T,P,EDD,TRE,INDEX
      A=VAL(INDEX,33)
      B=VAL(INDEX,34)
      IF(A.EQ.0.0) GO TO 13
      U=B*T
      IF(U.GE.A) GO TO 15
      TS=(A-(B*T))**1.2
      GO TO 20
13 CALL ERROR (11)
15 WRITE (6,16)
16 FORMAT (15X,"TENSION SUPERFICIAL: NO SE CALCULO DEBIDO",/,15X,"A L
   1AS ALTAS CONDICIONES DE TEMPERATURA",/)
20 RETURN
   END
```

N O M E N C L A T U R A.

DESCRIPCION		CALCULADA	ALMACENADA EN EL BANCO DE DATOS
A, B	Constantes de la ecuación de Mitra-Sanyal.		X
TS	Tensión superficial.	X	

3.6.o.- V I S C O S I D A D.

NOMBRE	DESCRIPCION	CONSTANTES FISICAS Y PROPIEDADES RE-- QUERIDAS.	INFORMACION SUMINISTRADA POR EL USUARIO	UNIDADES DE SALIDA
VIS(V)	<p>Cálculo de la viscosidad del compuesto puro líqui- do por el método de An-- drade.</p> <p>Cálculo de la viscosidad del compuesto puro gaseo- so para condiciones in-- feriores a las crfíticas.</p> <p>Cálculo de la viscosidad del compuesto puro gaseo- so por el método de Su-- therland (superior a las crfíticas).</p> <p>Corrección por presión - de la viscosidad del com- puesto puro no-polar en- estado gaseoso.</p> <p>Corrección por presión-- de la viscosidad del com- ponente puro polar en es- tado gaseoso.</p>	<p>R</p> <p>constantes A y B</p> <p>viscosidad a 0°C constante C</p> <p>D, DENC, TC, M, VC, V</p>	<p>T. P</p>	<p>Centipoi- ses</p>

C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA VISCOSIDAD DE UN COMPUESTO EN CENTIPOISES

```
SUBROUTINE VIS(V)
COMMON/CUNS/VAL(55,38)
COMMON/EST/T,P,EDO,TRE,INDEX
IF (EDO.EQ.1) GO TO 300
```

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

```
R=1.987
A= VAL (INDEX,25)
B= VAL (INDEX,26)
IF (A.EQ.0) GO TO 11
V = A*EXP(R/(R*T))
IF (P.GT.1.) GO TO 50
GO TO 1
11 CALL ERROR (10)
1 RETURN
```

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

```
300 VO = VAL(INDEX,27)
IF (T.GE.TC) GO TO 10
E = VAL(INDEX,28)
V = VO*(T/273.1)**E
IF (P.GT.1.) GO TO 50
RETURN
```

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

```
10 C=VAL(INDEX,29)
M=VAL(INDEX,8)
TC=VAL(INDEX,11)
PC=VAL(INDEX,12)
IF (C.EQ.0.0) GO TO 21
V=((273.1+C)/(T+C))*((T/273.1)**1.5)*VO
IF (P.GT.1.) GO TO 50
GO TO 20
21 CALL ERROR (11)
RETURN
```

C  
C CORRECCION POR PRESION POR EL METODO BASADO EN LA  
C VISCOSIDAD RESIDUAL.  
C

```
50 CALL DEN(D)
DENC=VAL(INDEX,13)*62.37
DENR=D/DENC
IF (DENR.GT.0.05) GO TO 15
WRITE (6,111)
111 FORMAT (15X,"VISCOSIDAD: LA DENSIDAD REDUCIDA ES MENOR A 0.05",/,1
15X,"SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICIONES.",/)
GO TO 20
15 XI=((TC)**0.166666)/((M)**0.5*(PC)**0.66666)
POL=VAL(INDEX,2)
IF (POL.EQ.0) GO TO 40
```

C

C COMPUESTOS NO POLARES

C

```
VCP=0.10230+0.023364*DENR+0.058533*(DENR**2.)-0.040758*(DENR**3.)+
10.0093324*(DENR**4.)
R=ALOG10(VCP)/0.25
V=((10.**R)+V*XI-10.**(-4))/XI
GO TO 20
```

C

C COMPUESTOS POLARES

C

```
DIMENSION LVP(6)
DATA LVP/0.1,0.9,2.2,2.6,2.8,3.0/
40 DO 8000 I=1,6
   IF (DENR.LE.LVP(I)) GO TO 30
   GO TO 13
8000 CONTINUE
   GO TO 20
30 GO TO (2,3,4,5,6,7),I
   2 V=((16.56*(10.**(-5))*(DENR**1.111))+V*XI)/XI
   GO TO 20
   3 V=(V*XI+0.607*(10.**(-5))*((9.045*DENR+0.63)**1.739))/XI
   GO TO 20
   4 S=0.6439-0.1005*DENR
   U=10.**S
   V=(V*XI+(10.**(-U)))/XI
   GO TO 20
   5 S=0.6439-0.1005*DENR-(4.75*(10.**(-4))*((DENR**3.-10.65)**2.))
   V=(V*XI+(10.**(-U)))/XI
   GO TO 20
   6 V=(0.00900+V*XI)/XI
   GO TO 20
   7 V=(0.0250+V*XI)/XI
   GO TO 20
13 V=1.0
   WRITE (6,88)
88 FORMAT(15X,"VISCOSIDAD: NO SE CORRIGIO POR PRESION DEBIDO",/,15X,"
1A QUE ES MUY ALTA, PRODUCIENDOSE GRANDES DESVIACIONES.",/)
20 RETURN
   END
```



N O M E N C L A T U R A.

DESCRIPCION		CALCULADA POR EL SISTEMA	ALMACENADA EN EL BANCO DE DATOS
R	CONSTANTE del gas = 1.987		X
A	constante experimental		X
B	constante experimental		X
T	temperatura de trabajo, °K		
V	viscosidad, cp	X	
VO	viscosidad a 0 °C		X
E	constante experimental		X
T	temperatura de trabajo		
V	viscosidad, cp	X	
C	constante experimental		X
M	peso molecular		X
TC	temperatura crítica, °K		X
PC	presión crítica, atm.		X
VO	viscosidad a 0°C		X
T	temperatura de trabajo, °K		
V	viscosidad, cp	X	
D	densidad, lb/ft <sup>3</sup>	X	
DENC	densidad crítica, lb/ft <sup>3</sup>		X
DENR	densidad reducida	X	
XI	$TC^{1/6}/M^{1/2} PC^{2/3}$	X	
TC	temperatura crítica, °K		X
M	peso molecular		X
PC	presión crítica, atm		X
POL	polaridad del compuesto		X
V	viscosidad, corregida, cp	X	
DENR	densidad reducida	X	
V	viscosidad corregida, cp	X	
XI	$TC^{1/6}/M^{1/2} PC^{2/3}$	X	
TC	temperatura crítica, °K		X
M	peso molecular		X
PC	presión crítica, atm		X

3.6.p.- S U B R U T I N A M V I S.

NOMBRE	DESCRIPCION	CONSTANTES FISICAS Y PROPIEDADES RE-- QUERIDAS	INFORMACION SUMINISTRADA POR EL USUARIO	UNIDADES DE SALIDA
MVIS (VM)	<p>Cálculo de la viscosi- dad de mezclas gaseo- sas por el método de- Wilke.</p> <p>Cálculo de la viscosi- dad de mezclas líqui- das y corrección por- presión del gas, por- el método de Lee y -- otros.</p>	V, M, D	T, P, X(1)	Centipois

C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA VISCOSIDAD PARA MEZCLAS

```
SUBROUTINE MVIS (VM)
COMMON/CONS/VAL(55,38)
COMMON/EST/T,P,EDO,TRL,INDEX
COMMON/MIX/NCOMP,X(10),ANUM(40),COND,INDICE(10)
DIMENSION M(10),V1(10),PHI(10,10),RHO(10),D1(10)
IF (P.GT.1.0R.EDO.EQ.0) GO TO 130
```

C

C CALCULO DE LA VISCOSIDAD DE LA MEZCLA GASEOSA  
C POR EL METODO DE WILKE

C

```
DO 200 I=1,NCOMP
INDEX=INDICE(I)
CALL VIS (V)
V1(I)=V
INDICE(I)=INDEX
M(I)=VAL(INDICE(I),8)
200 CONTINUE
BP=0.
CC=0.0
DO 100 I=1,NCOMP
DO 100 J=1,NCOMP
BB=1.0+SQRT(V1(I)/V1(J))*(M(J)/M(I))*+.025
CC=2.8284+SQRT(1.0+M(I)/M(J))
100 PHI(I,J)=BB*BB/CC
VM=0.
DO 300 I=1,NCOMP
SUM=0.
DO 145 J=1,NCOMP
IF (J-I) 201,145,201
201 SUM=SUM+PHI(I,J)*(X(J)/X(I))
145 CONTINUE
300 VM=VM+V1(I)/(1.+SUM)
RETURN
```

C

C CALCULO DE LA VISCOSIDAD DE LA MEZCLA DE LIQUIDOS  
C Y CORRECCION POR PRESION DE LA MEZCLA GASEOSA POR EL  
C METODO DE LEL-DOLAN-STARLING-ELLINGTON.

C

```
130 DO 155 I=1,NCOMP
INDEX=INDICE(I)
CALL DEN(D)
D1(I)=D
INDICE(I)=INDEX
M(I)=VAL(INDICE(I),8)
RHO(I)=D1(I)/(0.06237*M(I))
155 CONTINUE
W1=7.77
W2=0.0063
A3=122.4
A4=12.9
A5=2.57
A6=1914.5
A7=0.0095
A8=1.11
A9=0.04
W=0.0
DO 101 I=1,NCOMP
101 W=W+X(I)*M(I)
```

```
TP=T*1.8
D2=(W1+W2*H)*(TP**1.5)/(A3+A4*H+T)
E=A5+A6/TR+A7*B
F=A8+A9*L
R=PHO(I)*W*0.001
VH=D2*EXP(F*R**F)
RETURN
END
```

N O M E N C L A T U R A .

DESCRIPCION		CALCULADA POR EL SISTEMA	ALMACENADA EN EL BANCO DE DATOS
V	viscosidad del componente puro, cp	X	
M	peso molecular		X
X	fracción mol		
VM	viscosidad de la mezcla, cp	X	
D	densidad, lb/ft <sup>3</sup>	X	
M	peso molecular		X
X	fracción mol		
TR	temperatura de trabajo, °R	X	
VM	viscosidad de la mezcla, cp	X	

### 3.7.- SUBROUTINAS AUXILIARES.

#### 3.7.a.- SELECCION DE LA CLAVE DEL COMPUESTO.

Para la manipulación interna de los parámetros archivados en el -- banco de datos se ha asignado a los materiales puros un índice o identificación al cual le hemos denominado clave. Esta modalidad proporciona un -- trato más expedito y efectivo de la información que se ha de localizar dentro del almacén de datos.

Trabaja de la siguiente manera:

Compara los primeros 6 caracteres de la sección de la tarjeta que -- corresponde al compuesto con cada uno de los colocados en la columna cuatro de la matriz de datos hasta localizarlos; una vez que lo encontró continúa comparando los siguientes 6 caracteres con los contenidos por la columna cinco del arreglo matricial y se sigue así por otras 2 veces hasta -- completar los 24 caracteres que podrían contener el nombre completo del material, tal es el caso del tetracloruro de carbono. En el momento que concuerdan los últimos 6 términos se suspenden las comparaciones y se le señala la clave que es el número del renglón de la matriz en donde está contenido el nombre de la sustancia requerida.

Para los compuestos cuyo nombre es corto se considera que el resto de los términos son "blancos" (sin perforar) no debiéndose, por tanto, hacer ninguna otra indicación en la tarjeta hasta después de la columna 24.

De no encontrarse el compuesto o existir alguna falla en la perforación del nombre termina la ejecución del programa imprimiéndose el motivo de la discontinuación del proceso.

#### 3.7.b.- SUBROUTINA PARA EFECTUAR EL CAMBIO DE UNIDADES.

SUBROUTINE SIDEU(OU).- La palabra SIDEU significa "Sistema de Unidades" y la palabra OU es la clave que toma de la segunda tarjeta de datos que suministra el usuario conteniendo la combinación posible de unidades -- de T ó TF y P ó PF, su nomenclatura es la siguiente:

KMMHG	CATM	FATM
KMMHG	CMMHG	FMMHG
KPIEAG	CPIEAG	FPIEAG
KKG/CM	CKG/CM	FKG/CM
KPSIA	CPSIA	FPSIA
KLB/PI	CLB/PI	FLB/PI
KPULHG	CPULHG	FPULHG

Donde:

La primera letra de la clave: K, C o F significa la opción de unidades de:

- a).- T = Temperatura de trabajo ( °K, °C, °F )
- b).- TRE = Temperatura de Referencia ( °K, °C, °F )
- c).- TF = Temperatura Final en el caso de generación de tablas o gráficas ( °K, °C, °F )

El resto de la clave pertenece a la opción de unidades de la Presión, Presión Final; así:

- a).- ATM = Atmósferas
- b).- MMHG = milímetros de Mercurio
- c).- PIEAG = pies de agua
- d).- KG/CM = kilogramo por centímetro cuadrado
- e).- PSIA = libras por pulgada cuadrada absoluta
- f).- LB/PI = libras por pie cuadrado
- g).- PULHG = pulgadas de mercurio

NOTA: La opción KATM no está pues es el sistema de unidades con que opera el programa.

PROCEDIMIENTO.- La máquina al leer el cuarto dato de la segunda -- tarjeta de datos suministrada por el usuario lo asocia a una clave llamada OU y le determina un número que contiene ciertas declaraciones de cambio de variable. Es decir, cambia el valor que trae con la equivalencia necesaria a las unidades de trabajo del sistema que son: T = °K y P = atmósferas.

Una vez efectuado el cambio regresa al programa principal y continúa.

C SUBROUTINA PARA SELECCIONAR LA CLAVE DEL COMPUESTO

```
SUBROUTINE SELEC(ANOM,INDEX)
DIMENSION ANOM(4)
COMMON/CONS/VAL(55,38)
DO 10 I=1,55
IF (ANOM(1).NE.VAL(I,4)) GO TO 10
IF (ANOM(2).NE.VAL(I,5)) GO TO 10
IF (ANOM(3).NE.VAL(I,6)) GO TO 10
IF (ANOM(4).EQ.VAL(I,7)) GO TO 20
10 CONTINUE
CALL ERROR (3)
20 INDEX=I
RETURN
END
```



C SUBROUTINA PARA EFECTUAR EL CAMBIO DE UNIDADES

```

SUBROUTINE SIDFUCDU)
COMMON/EST/T,P,FDD,TRL,INDEX
COMMON/HT/TF,TINC,PF,PINC,AEDU
DIMENSION UNI(20)
DATA UNI/6HKMMHG,6HKPIEAG,6HKKG/CM,6HKPSIA,6HKLB/PI,6HCATM,
16HCMHG,6HCPIAG,6HCKG/CM,6HCPSIA,6HCLB/PI,6HFATM,6HFMMHG,
26HFPIAG,6HFKG/CM,6HFPSIA,6HFLB/PI,6HKPULHG,6HCPULHG,6HFPULHG/
DO 3000 I=1,20
IF (DU.EQ.UNI(I)) GO TO 1200
3000 CONTINUE
CALL ERRBR (4)
1200 GO TO (1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20),I
1 P=P/760.
PF=PF/760.
PINC=PINC/760.
GO TO 4000
2 P=P/33.93
PF=PF/33.93
PINC=PINC/33.93
GO TO 4000
3 P=P/1.033
PF=PF/1.033
PINC=PINC/1.033
GO TO 4000
4 P=P/14.7
PF=PF/14.7
PINC=PINC/14.7
GO TO 4000
5 P=P/14.7*144.
PF=PF/14.7*144.
PINC=PINC/14.7*144.
GO TO 4000
6 T=T+273.
TRF=TRF+273.
TF=TF+273.
GO TO 4000
7 T=T+273.
TRE=TRE+273.
TF=TF+273.
P=P/760.
PF=PF/760.
PINC=PINC/760.
GO TO 4000
8 T=T+273.
TRF=TRE+273.
TF=TF+273.
P=P/33.93
PF=PF/33.93
PINC=PINC/33.93
GO TO 4000
9 T=T+273.
TPE=TPE+273.
TF=TF+273.
P=P/1.033
PF=PF/1.033
PINC=PINC/1.033
GO TO 4000
10 T=T+273.

```

```

TRE=TRE+273.
TF=TF+273.
P=P/14.7
PF=PF/14.7.
PINC=PINC/14.7
GO TO 4000
11 T=T+273.
TRE=TRE+273.
TF=TF+273.
P=P/14.7*144.
PF=PF/14.7*144.
PINC=PINC/14.7*144.
GO TO 4000
12 T=((T-32.)*5./9.)+273.
TRE=((TRE-32.)*5./9.)+273.
TF=((TF-32.)*5./9.)+273.
TINC=TINC / 1.8
GO TO 4000
13 T=((T-32.)*5./9.)+273.
TRE=((TRE-32.)*5./9.)+273.
TF=((TF-32.)*5./9.)+273.
TINC=TINC / 1.8
P=P/760.
PF=PF/760.
PINC=PINC/760.
GO TO 4000
14 T=((T-32.)*5./9.)+273.
TRE=((TRE-32.)*5./9.)+273.
TF=((TF-32.)*5./9.)+273.
TINC=TINC / 1.8
P=P/33.93
PF=PF/33.93
PINC=PINC/33.93
GO TO 4000
15 T=((T-32.)*5./9.)+273.
TRE=((TRE-32.)*5./9.)+273.
TF=((TF-32.)*5./9.)+273.
TINC=TINC / 1.8
P=P/1.033
PF=PF/1.033
PINC=PINC/1.033
GO TO 4000
16 T=((T-32.)*5./9.)+273.
TRE=((TRE-32.)*5./9.)+273.
TF=((TF-32.)*5./9.)+273.
TINC=TINC / 1.8
P=P/14.7
PF=PF/14.7
PINC=PINC/14.7
GO TO 4000
17 T=((T-32.)*5./9.)+273.
TRE=((TRE-32.)*5./9.)+273.
TF=((TF-32.)*5./9.)+273.
TINC=TINC / 1.6
P=P/14.7*144.
PF=PF/14.7*144.
PINC=PINC/14.7*144.
GO TO 4000
18 P=P/29.92
PF=PF/29.92

```

```

PINC=PINC/29.92
GO TO 4000
19 T=T+273.
TRE=TRE+273.
TF=TF+273.
P=P/29.92
PF=PF/29.92
PINC=PINC/29.92
GO TO 4000
20 T=((T-32.)*5./9.)+273.
TRE=((TRE-32.)*5./9.)+273.
TF=((TF-32.)*5./9.)+273.
TINC=TINC / 1.8
P=P/29.92
PF=PF/29.92
PINC=PINC/29.92
4000 RETURN
END

```

### 3.7.c.- SUBROUTINA ERROR.

La existencia de esta subrutina es necesaria debido a que el programa está sujeto a una serie de errores que es necesario indicar mediante un mensaje escrito en la hoja de resultados.

El número de errores posibles de cometer es 11, los cuales señalan fundamentalmente las limitaciones del programa con excepción del error marcado con el número 6.

No es necesario suministrar ningún dato para el funcionamiento de este subprograma, ya que trabaja automáticamente al ser requerida en alguna parte del sistema en el que se detecte una anomalía, es decir, un tipo de error específico, al cual se le ha asignado un número con el objeto de identificarlo para poder mandar el mensaje correspondiente lo cual se logra de la siguiente manera:

Supongamos que se quiere calcular el Cp del agua, como este compuesto no está incluido en el banco de datos, la subrutina SELEC (donde se identifica el compuesto y la clave correspondiente) al no encontrar el nombre del compuesto, se llama a la subrutina ERROR proporcionándole a la vez el número del error encontrado (en este caso el 3) en la cual mediante la proposición GO TO (1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11), I (donde los números entre paréntesis son los índices de los errores posibles e I es el número del error -- que hemos encontrado) manda el mensaje correspondiente, en este caso:

"Error: Compuesto no identificado".

Tipo de Errores.-

Error 1.- Se origina al suministrar una mezcla con un número de --- compuestos mayor de 10, ya que el programa unicamente hace el cálculo de -- propiedades de mezclas que tengan un número no mayor de 10 componentes.

Mensaje: "Error: No fué perforado debidamente el número de compuestos o su número es mayor a 10"

Error 2.- Se presenta cuando se quiere evaluar alguna propiedad que

no se encuentra en el programa.

Mensaje: "Error: Propiedad no encontrada".

Error 3.- Es causado por querer evaluar una propiedad de algún compuesto que no fué incluido en el programa.

Mensaje: "Error: Compuesto no identificado".

Error 4.- Se produce cuando las unidades de presión y temperatura son diferentes a las suministradas al sistema.

Mensaje: "Error: Unidades fuera de opción en el sistema".

Error 5.- Es motivado al pedir al programa un tipo de cálculo diferente a:

PURO, MEZCLA, TABLA (Variando la Temperatura o la Presión) tanto para compuestos puros como para mezclas de ellos.

Mensaje: "Error: Forma de cálculo de propiedades no encontrada".

Error 6.- Se suscita cuando la suma de las fracciones mol de los componentes de una mezcla es diferente de 1.0

Mensaje: "Error: La suma de las fracciones mol es diferente de 1.0"

Error 7.- Se provoca al querer evaluar la difusión de más de dos compuestos en estado líquido.

Mensaje: "Error: El programa solo estima esta propiedad para mezclas binarias".

Error 8.- Nos encontramos con este error al querer generar una tabla de propiedades a diferentes presiones de operación para un compuesto en estado líquido.

Mensaje: "Error: Para el estado líquido no hay opción para la generación de tablas por incremento de presión".

Error 9.- Se comete cuando se quiere evaluar el Cp de un compuesto en estado líquido para el cual no fué posible encontrar sus constantes pa-

ra la ecuación del polinomio.

Mensaje: "Error: No se dispone de las constantes del Cp de líquido en el banco de datos"

Error 10.- Se tiene este error en el momento de evaluar la viscosidad de un compuesto líquido para el cual se carece de las constantes necesarias de la ecuación correspondiente.

Mensaje: "Error: No se dispone de las constantes de viscosidad en el banco de datos"

Error 11.- Ocurre cuando en determinada operación matemática se -- presenta un tipo de cálculo inválido, por ejemplo, dividir entre cero, --- raíz imaginaria, etc.

Mensaje: "Error: No se dispone de las constantes requeridas en el banco de datos".

Esta subrutina es la única que además del programa principal, puede dar por terminada la ejecución del sistema, ya que al encontrar algún error, el cálculo se suspende después de escribir el tipo de error cometido.

Estos errores pueden aparecer también debido a que el usuario no haya perforado los datos correctamente, ya que cada uno de ellos tiene un campo determinado en la tarjeta de datos correspondiente dentro del cual debe perforarse la información teniendo cuidado de no cometer NINGUNA falta de ortografía en la escritura del nombre del compuesto, la propiedad -- deseada, las unidades de los datos, así como anotar toda la información en el espacio de tarjeta asignado.

#### 3.7.d.- SUBROUTINA PARA SELECCIONAR LA PROPIEDAD DEL COMPUESTO COMPUESTO PURO.

SUBROUTINE SELECP (PROP).- La palabra SELECP significa "Selección de la Propiedad" y la palabra PROP es la clave que toma del primer dato de la primera tarjeta de datos suministrada por el usuario la que contiene el

nombre de la propiedad que se desea calcular, así su nomenclatura es la -- siguiente:

- a).- CAPACI = CAPACIdad calorífica
- b).- CALOR\_ = CALORlatente de vaporización
- c).- ENTALP = ENTALPIa
- d).- DENSID = DENSIDad
- e).- VISCOS = VISCOSidad
- f).- CONduc = CONDUCTividad térmica
- g).- PRESIO = PRESIOñ de vapor
- h).- TENSIO = TENSIOñ superficial
- i).- TODAS = TODAS las propiedades juntas

PROCEDIMIENTO.- La computadora lee de la primer tarjeta de datos-- la clave PROP y en la subrutina SELECP la manipula en tal forma que la --- asocia con un número el cual tiene ciertas declaraciones en la siguiente - forma:

- a).- En el caso de una propiedad llama a la subrutina de la misma-- y con declaraciones de escritura pone los letreros de salida-- y los datos calculados.
- b).- Para el caso de todas las propiedades juntas llama a cada una de las subrutinas y mediante a otra declaración de escritura-- pone los letreros de salida y los datos calculados de'cada -- una a una temperatura y presión dados. Una vez logrado lo -- anterior regresa al programa principal y continúa.

NOTA: Las claves descritas arriba deben poseer 6 caracteres alfabé-- ticos para que sean considerados por la computadora, de lo - contrario marcará error. El término\_ significa un espacio va-- cío.

C SUBROUTINA PARA ESCRIBIR EL TIPO DE ERROR COMETIDO

```
SUBROUTINE ERROR (I)
  GO TO (1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11),I
  1 WRITE (6,101)
    GO TO 20
  2 WRITE (6,102)
    GO TO 20
  3 WRITE (6,103)
    GO TO 20
  4 WRITE(6,104)
    GO TO 20
  5 WRITE (6,105)
    GO TO 20
  6 WRITE (6,106)
    GO TO 20
  7 WRITE (6,107)
    GO TO 20
  8 WRITE (6,108)
    GO TO 20
  9 WRITE(6,109)
    GO TO 20
  10 WRITE (6,110)
    GO TO 20
  11 WRITE (6,111)
  101 FORMAT (10X,"ERROR: NO FUE PERFORADO DEBIDAMENTE EL NUMERO DE COMP
    1UESTOS O SU NUMERO ES MAYOR A 10")
  102 FORMAT (10X,"ERROR: PROPIEDAD NO ENCONTRADA")
  103 FORMAT (10X,"ERROR: CUMPUUESTO NO IDENTIFICADO")
  104 FORMAT (10X,"ERROR: UNIDADES FUERA DE OPCION EN EL SISTEMA")
  105 FORMAT (10X,"ERPOR: FLRMA DE CALCULO DE PROPIEADAES NO ENCONTRADA"
    1)
  106 FORMAT (10X,"ERROR: LA SUMA DE LAS FRACCIONES MDL ES DIFERENTE DE
    11.0")
  107 FOPMAT (10X,"ERROR: EL PROGRAMA SULD ESTIMA ESTA PROPIEDAD PARA ME
    1ZCLAS BINARIAS")
  108 FORMAT (10X,"ERPOR: PARA EL ESTADO LIQUIDO NO HAY OPCION PARA LA G
    1ENERACION DE TABLAS PGR INCREMENTO DE PRESION")
  109 FORMAT (10X,"ERROR: NO SE DISPONE DE LA S CONSTANTES DEL CP DE LIQ
    1UIDO EN EL BANCO DE DATOS")
  110 FORMAT (10X,"ERRODP: NO SE DISPONE DE LAS CONSTANTES DE LA VISCOSID
    1AD FN EL BANCO DE DATOS")
  111 FORMAT (10X,"ERROR: NO SE DISPONE DE LOS PARAMETROS CONSTANTES
    1REQUERIDOS EN EL BANCO DE DATOS")
  20 CALL EXIT
    RETURN
  END
```



C SUBROUTINA PARA SELECCIONAR LA PROPIEDAD DE LOS COMPUESTOS Puros

```

SUBROUTINE SELCP (PRUP)
DIMENSION AUX(9)
DATA AUX/6HCAPACI,6HCALOR,6HENTALP,6HDENSID,6HVISCOS,6HCONDUCT,6HP
1RESIQ,6HTENSIO,6HTUDAS /
DO 1000 I=1,9
IF (PROP.EQ.AUX(I)) GO TO 1100
1000 CONTINUE
CALL ERROR (2)
1100 GO TO (1,2,3,4,5,6,7,8,9),I
1 CALL CAPC(CP)
WRITE (6,11) CP
11 FORMAT(10X,"CAPACIDAD CALORIFICA A P=CTE CAL/G-MOL-K",10X,F10.6,/)
GO TO 2000
2 CALL CALV(HV)
WRITE (6,22) HV
22 FORMAT(10X,"CALOR LATENTE DE VAPORIZACION BTU/LB",14X,1PE13.6,/)
GO TO 2000
3 CALL ENTALP(H)
WRITE (6,33) H
33 FORMAT(10X,"ENTALPIA CAL/G-MOL",32X,1PE13.6,/)
GO TO 2000
4 CALL DENC(D)
WRITE (6,44) D
44 FORMAT(10X,"DENSIDAD LB/PIE3",34X,F8.5,/)
GO TO 2000
5 CALL VIS(V)
WRITE (6,55) V
55 FORMAT(10X,"VISCOSIDAD CENTIPOISES",28X,F8.5,/)
GO TO 2000
6 CALL CNT(CT)
WRITE (6,66) CT
66 FORMAT(10X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA BTU/HR-PIE2-F/PIE",11X,F8.5,/)
GO TO 2000
7 CALL PVAP(PV)
WRITE (6,77) PV
77 FORMAT(10X,"PRESION DE VAPOR MMHG",29X,E13.6,/)
GO TO 2000
8 CALL TENS(TS)
WRITE(6,88) TS
88 FORMAT (10X,"TENSION SUPERFICIAL DINAS/CM",22X,E13.6,/)
GO TO 2000
9 CALL CAPC(CP)
CALL CALV(HV)
CALL ENTALP(H)
CALL DENC(D)
CALL VIS(V)
CALL CNT(CT)
CALL PVAP(PV)
CALL TENS(TS)
WRITE (6,99) CP,HV,H,D,V,CT,PV,TS
99 FORMAT(10X,"CAPACIDAD CALORIFICA A P=CTE CAL/G-MOL-K",10X,E13.6,/,
110X,"CALOR LATENTE DE VAPORIZACION BTU/LB",14X, E13.6,/,10X,"ENTA
2LPIA CAL/G-MOL",32X, E13.6,/,10X,"DENSIDAD LB/PIE3",34X,
3E13.6,/,10X,"VISCOSIDAD CENTIPOISES",28X,E13.6,/,10X,"CONDUCTIVIDA
4D TERMICA BTU/HR-PIE2-F/PIE",11X,E13.6,/,10X,"PRESION DE VAPOR MMH G
5G",29X,E13.6,/,10X,"TENSION SUPERFICIAL DINAS/CM",22X,E13.6,/)
2000 RETURN
END

```

### 3.7.e.- SUBROUTINA PARA SELECCIONAR LA PROPIEDAD DE LA MEZCLA.

SUBROUTINE SELECM (PROP).- La palabra SELECM significa "SELECCIÓN de la propiedad de Mezclas" y la palabra PROP es la clave que toma del primer dato de la primera tarjeta de datos suministrada por el usuario la -- cual contiene el nombre de la propiedad de la mezcla que se desea calcular, siendo su nomenclatura la siguiente:

- a).- CAPACI = CAPACIdad calorífica
- b).- DENSID = DENSIDad
- c).- ENTALP = ENTALPia
- d).- VISCOS = VISCOSidad
- e).- DIFUSI = DIFUSIvidad
- f).- CONduc = CONDUCTIvidad térmica
- g).- TODAS\_ = TODAS\_ las mezclas juntas

PROCEDIMIENTO.- La máquina lee de la primera tarjeta de datos la-- clave PROP y en la subrutina SELECM le asocia un número que contiene ciertas declaraciones como: llamar a la subrutina de mezcla de esa propiedad, -- regresar a SELECM y escribir los letreros de salida del programa y los datos calculados regresando finalmente al programa principal y continuando.

Para el caso de TODAS llama a cada una de las subrutinas y sigue -- el camino descrito arriba.

NOTA: Las claves escritas arriba contienen 6 caracteres alfabéti-- cos que son compilados por la computadora de lo contrario -- marcaría un error. \* El término\_ significa dejar un espacio en blanco.

### GENERACION DE TABLAS.

A menudo sucede que lo que una persona quiere de una computadora-- en las primeras etapas de un estudio, es una idea general de cómo se com-- porta un sistema propuesto.

C SUBROUTINA PARA SELECCIONAR LA PROPIEDAD DE MEZCLAS

```

SUBROUTINE SELECM (PROP)
COMMON/CONS/VAL(55,38)
COMMON/MT/TF,TINC,PF,PINC,AEDO
COMMON/MIX/NCOMP,X(10),ANUM(40),COND,INDICE(10)
DIMENSION MAX(7)
DATA MAX/6HCAPACI,6HDENSID,6MENTALP,6HVISCOS,6HDIFUSI,6HCONDOC,6HT
10DAS /
WRITE (6,10)
10 FORMAT (40X,"CALCULO DE PROPIEDADES DE UNA MEZCLA",///,35X,"COMPUE
1STOS",13X,"FRACCION MUL",//)
DO 250 I=1,NCOMP
WRITE (6,11) (VAL(INDICE(I),JK),JK=4,7), X(I)
11 FORMAT (29X,4A6,5X,F6.4,/)
250 CONTINUE
WRITE (6,191) AEDO
191 FORMAT (///,32X,"ESTADU FISICO: ",A3,/)
DO 500 I=1,7
IF (PROP.EQ.MAX(I)) GO TO 560
500 CONTINUE
CALL ERROR (2)
560 GO TO (1,2,3,4,5,6,7),I
1 CALL MCAPC (CPM)
WRITE (6,12) CPM
12 FORMAT (///,29X,"CAPACIDAD CALORIFICA A P=CTE CAL/G-MOL-K",10X,E13.
16,/)
GO TO 3000
2 CALL MDEN (DM)
WRITE (6,13) DM
13 FORMAT (///,29X,"DENSIDAD LB/PIE3",34X,E13.6,/)
GO TO 3000
3 CALL MENTAL (HM)
WRITE (6,14) HM
GO TO 3000
14 FORMAT (///,29X,"ENTALPIA CAL/G-MOL",32X,E13.6,/)
4 CALL HVIS (VM)
WRITE (6,15) VM
15 FORMAT (///,29X,"VISCOSIDAD CENTIPOISES",28X,E13.6,/)
GO TO 3000
5 IF (NCOMP.GT.2) GO TO 101
CALL MDIFUS (DIM)
GO TO 67
101 CALL MDIFUS (MDIM)
DIM=MDIM
67 WRITE (6,16) DIM
GO TO 3000
16 FORMAT (///,29X,"DIFUSION CM2/SEG",30X,E13.6,/)
6 CALL MCONT (CTH)
WRITE (6,17) CTH
17 FORMAT (///,29X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA BTU/HR-PIE2-F/PIE",11X,E13.6
1,/)
GO TO 3000
7 CALL MCAPC (CPM)
CALL MDEN (DM)
CALL MENTAL (HM)
CALL HVIS (VM)
CALL MCONT (CTH)
IF (NCOMP.GT.2) GO TO 102

```

```

CALL DIFUS (DIM)
GO TO 69
102 CALL MDIFUS (MDIM)
DIM=MDIM
69 WRITE (6,18) CPH, DM, HM, VM, CTM, DIM
18 FORMAT (29X,"CAPACIDAD CALORIFICA A P=CTE CAL/G MOL-K",10X,E13.6,/,
1,29X,"DENSIDAD LB/PIE3",34X,E13.6,/,29X,"ENTALPIA CAL/G-MOL",32X,E
213.6,/,29X,"VICOSIDAD CENTIPOISES",28X,E13.6,/,29X,"CONDUCTIVIDAD
3TERMICA BTU/HR-PIE2-F/PIE",11X,E13.6,/,29X,"DIFUSION CM2/SEG",30X,
4E13.6,/)
3000 RETURN
END

```

En otros, la naturaleza del problema puede ser tal que una presentación tabulada proporcione el mejor conocimiento intuitivo del sistema.

Esta subrutina tiene por objeto generar tablas de valores de una o todas las propiedades calculables. Dicha tabulación se hace variando - ya sea, la presión o temperatura de cálculo para un compuesto puro o una mezcla de ellos (a excepción de tablas de propiedades de líquidos variando la presión de operación) mediante 2 subprogramas diferentes.

### 3.7.f.- S U B R U T I N A T A B L A.

Nombre	Descripción	Ctes. Físicas Requeridas.	Información suministrada por el usuario.	Unidades de salida.
TABLA.	Generación de tablas de propiedades de compuestos puros, variando T ó P de operación.	- - - - -	T, TINC, TF P, PINC, PF COND.	Depende de la(s) propiedad(es) calculada(s).

C SUBROUTINA PARA ELABORAR LA TABLA DE PROPIEDADES DE COMPUESTOS PUROS

```

SUBROUTINE TABLA (PROP)
COMMON/EST/T,P,EDO,TRE,INDEX
COMMON/HIX/NCOMP, X(10), ANDH(40), COND, INDICE(10)
COMMON/HT/TF,TINC,PF,PIHC, AEDU
DIMENSION OPT(9)
DATA OPT/6HCAPACI,6HENTALP,6HCALDR,6HDENSID,6HVISCOS,6HCONDUC,6HP
1RESIO,6HTENSIO,6HTODAS /
DATA OPTP/6HCAPACI,6HENTALP,6HDENSID,6HVISCOS,6HCONDUC,6HTODAS /
IF (COND.EQ.6HTPPURO) GO TO 100
C
C GENERACION DE TABLA POR VARIACION DE TEMPERATURA
C
WRITE (6,110) T,TF,TINC,P
110 FORMAT(46X,"GENERACION DE TABLA",/,46X,"*****",5X,"**
1",5X,"*****",//,43X,"TEMPERATURA INICIAL-K = ",4X,F7.2/,43X,"T
2EMPERATURA FINAL-K = ",6X,F7.2/,43X,"INCREMENTO DE TEMPERATURA=
3K = ",F5.2/,43X,"PRESION DE CALCULO=ATM =",5X,F7.2//)
T=T+TINC
DO 3000 I=1,9
IF (PROP.EQ.OPT(I)) GO TO 3300
3000 CONTINUE
CALL ERROR (2)
3300 GO TO (1,2,3,4,5,6,7,8,9),I
1 WRITE (6,120)
120 FORMAT(35X,"TEMPERATURA-K",10X,"CAPACIDAD CALORIFICA CAL/G-MOL-K",
1//)
31 T=T+TINC
CALL CAPC(CP)
WRITE (6,71) T, CP
71 FORMAT (38X,F7.2,15X,L13.6)
IF (T.LE.TF)GO TO 31
RETURN
2 WRITE (6,52)
52 FORMAT (35X,"TEMPERATURA-K",9X,"ENTALPIA-CAL/G-MOL",//)
32 T=T+TINC
CALL ENTALP(H)
WRITE (6,71) T, H
IF (T.LE.TF) GO TO 32
RETURN
3 WRITE (6,53)
53 FORMAT (35X,"TEMPERATURA-K",4X,"CALOR LATENTE DE VAP.=BTU/LB",//)
33 T=T+TINC
CALL CALV(HV)
WRITE (6,71) T, HV
IF (T.LE.TF) GO TO 33
RETURN
4 WRITE (6,54)
54 FOPMAT (35X,"TEMPERATURA-K",8X,"DENSIDAD-LB/PIE-3",//)
34 T=T+TINC
CALL DENC(D)
WRITE (6,71) T, D
IF (T.LE.TF) GO TO 34
RETURN

```

```

5 WRITE (6,55)
55 FORMAT (35X,"TEMPERATURA-K",6X,"VISCOSIDAD-CENTIPOISES",//)
35 T=T+TINC
   CALL VIS(V)
   WRITE (6,71) T, V
   IF (T.LE.TF) GO TO 35
   RETURN
6 WRITE (6,56)
56 FORMAT (35X,"TEMPERATURA-K",2X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA-BTU/HR-PIE-F
1",//)
36 T=T+TINC
   CALL CONT(CT)
   WRITE (6,71) T, CT
   IF (T.LE.TF) GO TO 36
   RETURN
7 WRITE (6,57)
57 FORMAT (35X,"TEMPERATURA-K",7X,"PFESION DE VAPOR-MMHG",//)
37 T=T+TINC
   CALL PVAP(PV)
   WRITE (6,71) T, PV
   IF (T.LE.TF) GO TO 37
   RETURN
8 WRITE (6,58)
58 FORMAT (35X,"TEMPERATURA-K",2X,"TENSION SUPERFICIAL-DINAS/CM",//)
38 T=T+TINC
   CALL TENS(TS)
   WRITE (6,71) T, TS
   IF (T.LE.TF) GO TO 38
   RETURN
9 WRITE (6,59)
59 FORMAT (3X,"TEMP-K",3X,"CAPACIDAD",4X,"ENTALPIA",4X,"CALOR LATEN="
1,3X,"DENSIDAD",5X,"VISCOSIDAD",3X,"CONDUCTIVI-",4X,"PRESION DE",5X
2,"TENSION SU-",//,12X,"CALORIFICA",3X,"CAL/G-MOL",3X,"TE DE VAPO-",
34X,"LR/PIE-3",5X,"CENTIPOISES",2X,"DAD-TERMICA",4X,"VAPOR MMHG",5X
4,"PERFICIAL",//,12X,"CAL-GMOL-K",17X,"RIZACION",31X,"BTU/HR-PIE-F",
518X,"DINAS/CM",//,40X,"BTU/LB",//)
39 T=T+TINC
   CALL CAPC(CP)
   CALL ENTALP(H)
   CALL CALV(HV)
   CALL DEN(D)
   CALL VIS(V)
   CALL CONT(CT)
   CALL PVAP(PV)
   CALL TENS(TS)
   WRITE (6,72) T, CP, H, HV, D, V, CT, PV, TS
72 FORMAT (2X,F8.3,1X,E12.6,1X,E12.6,1X,E12.6,1X,E12.6,1X,E12.6,2X,E1
12.6,2X,E12.6,2X,E12.6)
   IF (T.LE.TF) GO TO 39
   RETURN

```

C  
C  
C

GENERACION DE TABLA POR VARIACION DE PRESION

```

100 IF(EDO.EQ.1) GO TO 200
   CALL ERROR(8)
200 WRITE (6,70) P, PF, PINC, T
70 FORMAT (35X,"GENERACION DE TABLA POR VARIACION DE PRESION",//,43X
1,"PRESION INICIAL-ATM =",2X,F7.2,/,43X,"PRESION FINAL-ATM =",2X,
3F7.2,/,43X,"INCREMENTO DE PRESION-ATM =",2X,F7.2,/,43X,"TEMPERATU
4RA DE CALCULO-K =",2X,F7.2,//)

```

```

P=P+PINC
DO 4000 I=1,6
IF (PROP.EQ.0PTP(I)) GO TO 4400
4000 CONTINUE
CALL ERROR (2)
4400 GO TO (11,12,13,14,15,16),I
11 WRITE (6,51)
51 FORMAT (36X,"PRESION-ATM",13X,"CP-BTU/G-MOL-K",//)
3131 P=P+PINC
CALL CAPC(CP)
WRITE (6,71) P,CP
IF (P.LE.PF) GO TO 3131
RETURN
12 WRITE (6,152)
152 FORMAT (36X,"PRESION-ATM",11X,"ENTALPIA-CAL/G-MOL",//)
3232 P=P+PINC
CALL ENTALP(H)
WRITE (6,71) P, H
IF (P.LE.PF) GO TO 3232
RETURN
13 WRITE (6,153)
153 FORMAT (36X,"PRESION-ATM",10X,"DENSIDAD-LB/PIE-3",//)
333 P=P+PINC
CALL DEN(D)
WRITE (6,71) P, D
IF (P.LE.PF) GO TO 333
RETURN
14 WRITE (6,154)
154 FORMAT (36X,"PRESION-ATM",9X,"VISCOSIDAD-CENTIPOISES",//)
3434 P=P+PINC
CALL VIS(V)
WRITE (6,71) P, V
IF (P.LE.PF) GO TO 3434
RETURN
15 WRITE (6,155)
155 FORMAT (36X,"PRESION-ATM",5X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA-BTU/HR-PIE-F",
1//)
3535 P=P+PINC
CALL CONT(CT)
WRITE (6,71) P, CT
IF (P.LE.PF) GO TO 3535
RETURN
16 WRITE (6,156)
156 FORMAT (10X,"PRESION",4X,"CAPACIDAD",7X,"ENTALPIA",8X,"DENSIDAD",8
1X,"VISCOSIDAD",6X,"CONDUCTIVI-",//,12X,"ATM",6X,"CALORIFICA",6X,"CA
3L/G-MOL",7X,"LB/PIE-3",8X,"CENTIPOISES",4X,"DAD TERMICA",//,21X,"CA
4L/GMOL-K",54X,"BTU/HR-PIE-F",//)
3636 P=P+PINC
CALL CAPC (CP)
CALL ENTALP(H)
CALL DEN(D)
CALL VIS (V)
CALL CONT(CT)
WRITE (6,172) P, CP, H, D, V, CT
172 FORMAT (10X,F7.3,3X,E12.6,4X,E12.6,3X,E12.6,6X,F12.6,3X,E12.6)
IF (P.LE.PF) GO TO 3636
RETURN
END

```



N O M E N C L A T U R A .

Descripción.	
T	Temperatura inicial.
P	Presión inicial.
TF	Temperatura final.
PF	Presión final.
EDO	Estado físico del compuesto.
TINC	Incremento de temperatura.
PINC	Incremento de presión.
PROP	Propiedad(es) deseada(s).
COND	Tipo de cálculo.

3.7.g.- SUBROUTINA TABLAM.

Nombre	Descripción	Ctes.Físicas requeridas	Información Suministrada por el usuario.	Unidades de salida.
TABLAM	Generación de tablas de propiedades para mezclas de compuestos puros variando T ó P de cálculo.	- - - - -	NCOMP, Cond, X <sub>i</sub> , T, TF, TINC, P, PF, PINC.	Depende de la(s) Propiedad(es) calculada(s).

C SUBROUTINA PARA OBTENER TABLA DE PROPIEDADES PARA MEZCLAS

```

SUBROUTINE TABLAM (PROP)
COMMON/MIX/HCONHP,X(10),ANOM(40),COND,INDICE(10)
COMMON/CONS/VAL(55,38)
COMMON/EST/T,P,AEDD,TRC,INDEX
COMMON/MT/TF,TINC,PF,PINC,AEDO
DIMENSION OPT(6)
DATA OPT/6HCAPACI,6HENTALP,6HDENSID,6HVISCOS,6HCONDC,6HDIFUSI/
WRITE (6,110)
110 FORMAT(46X,"GENERACION DE TABLA",///,42X,"COMPUESTOS",13X,"F
IRACCION MOL",//)
DO 105 I=1,HCONHP
WRITE (6,13) (VAL(INDICE(I),JK),JK=4,7),X(I)
13 FORMAT(36X,4A6,5X,F6.4//)
105 CONTINUE
IF (COND.EQ.6HTPMEZC) GO TO 100
C
C GENERACION DE TABLA POR VARIACION DE LA TEMPERATURA
C
WRITE (6,14) T,TF,TINC,P,AEDD
14 FORMAT (/,43X,"TEMPERATURA INICIAL-K =",2X,F7.2/,43X,"TEMPERATUR
1A FINAL-K =",4X,F7.2/,43X,"INCREMENTO DE TEMP.,K =",4X,F5.2/
2,43X,"PRESION DE CALCULO=ATM =",1X,F7.2/,50X,"ESTADO FISICO! ",A
33,///)
T=T+TINC
DO 500 I=1,6
IF (PROP.EQ.OPT(I)) GO TO 510
500 CONTINUE
CALL ERRUR (2)
510 GO TO (1,2,3,4,5,6),I
1 WRITE (6,15)
15 FORMAT (35X,"TEMPERATURA-K",10X,"CAPACIDAD CALDRIFICA-CAL/G-MOL-K"
1,///)
60 T=T+TINC
CALL MCAPC (CPH)
WRITE (6,16) T,CPH
16 FORMAT (38X,F7.2,20X,E13.6)
IF (T.LT.TF) GO TO 60
RETURN
2 WRITE (6,113) TRE
113 FORMAT (18X,"TEMPERATURA DE REFERENCIA-K =",2X,F7.2//)
WRITE (6,17)
17 FORMAT (35X,"TEMPERATURA-K",10X,"ENTALPIA-CAL/G-MOL",//)
61 T=T+TINC
CALL MENTAL (HM)
WRITE (6,18) T,HM
18 FORMAT (38X,F7.2,15X,E13.6)
IF (T.LT.TF) GO TO 61
RETURN
3 WRITE (6,19)
19 FORMAT (35X,"TEMPERATURA-K",10X,"DENSIDAD-LB/PIE-3",//)
62 T=T+TINC
CALL MDEN (DM)
WRITE (6,20) T,DM
20 FORMAT (38X,F7.2,15X,E13.6)
IF (T.LT.TF) GO TO 62
RETURN

```

```

4 WRITE (6,21)
21 FORMAT (35X,"TEMPERATURA-K",10X,"VISCOSIDAD-CENTIPOISES",//)
63 T=T+TINC
CALL MVIS (VM)
WRITE (6,22) T, V
22 FORMAT (38X,F7.2,18X,E13.6)
IF (T.LT.TF) GO TO 63
RETURN
5 WRITE (6,23)
23 FORMAT (35X,"TEMPERATURA-K",10X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA",/,60X,"BTU
1/HR-PIF-F",//)
64 T=T+TINC
CALL MCON (CTH)
WRITE (6,24) T, CTH
24 FORMAT (38X,F7.2,17X,E13.6)
IF (T.LT.TF) GO TO 64
RETURN
6 WRITE (6,25)
25 FORMAT (35X,"TEMPERATURA-K",10X,"DIFUSION-CM2/SEG",//)
65 T=T+TINC
IF (NCOMP.GT.2) GO TO 88
CALL DIFUS (DIH)
GO TO 82
88 CALL MDIFUS (MDIM)
DIH=MDIM
82 WRITE (6,26) T, DIM
26 FORMAT (38X,F7.2,15X,E13.6)
IF (T.LT.TF) GO TO 65
RETURN

```

C  
C GENERACION DE TABLA POR VARIACION DE LA PRESION  
C

```

100 WRITE (6,27) P, PF, PINC, T, AEDO
27 FORMAT (43X,"PRESION INICIAL-ATM =",6X,F7.2,/,43X,"PRESION FINAL-
1AT" =",8X,F7.2,/,43X,"INCREMENTO DE PRESION-AT" =",2X,F5.2,/,43X
2,"TEMPERATURA DE CALCULO-K" =",1X,F7.2,/,45X,"ESTADO FISICO: ",A3,
3//)
P=P-PINC
DO 550 I=1,6
IF (PROP.EQ.UPT(I)) GO TO 560
550 CONTINUE
560 GO TO (7,8,9,10,11,12),I
7 WRITE (6,28)
28 FORMAT (35X,"PRESION-ATM",10X,"CAPACIDAD CALORIFICA-CAL/G-MOL-K",/
1/)
66 P=P+PINC
CALL MCAPC (CPH)
WRITE (6,29) P, CPH
29 FORMAT (37X,F7.3,20X,E13.6)
IF (P.LT.PF) GO TO 66
RETURN
8 WRITE (6,114)
114 FORMAT (18X,"TEMPERATURA DE REFERENCIA-K" =",2X,F7.2,/)
WRITE (6,30)
30 FORMAT (35X,"PRESION-ATM",10X,"ENTALPIA-CAL/G-MOL",//)
67 P=P+PINC
CALL MENTAL (CH)
WRITE (6,31) P, H
31 FORMAT (37X,F7.3,15X,E13.6)
IF (P.LT.PF) GO TO 67

```

```

RETURN
9 WRITE (6,32)
32 FORMAT (35X,"PRESION-ATM",10X,"DENSIDAD-LB/PIE-3",/)
68 P=P+PINC
CALL MDEN (DH)
WRITE (6,33) P, D!
33 FORMAT (37X,F7.3,15X,E13.6)
IF (P.LT.PF) GO TO 68
RETURN
10 WRITE (6,34)
34 FORMAT (35X,"PRESION-ATM",10X,"VISCOSIDAD-CENTIPOISES",/)
69 P=P+PINC
CALL MVIS (VM)
WRITE (6,35) P, VM
35 FORMAT (37X,F7.3,18X,E13.6)
IF (P.LT.PF) GO TO 69
RETURN
11 WRITE (6,36)
36 FORMAT (35X,"PRESION-ATM",10X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA",/,60X,"BTU/H
1R-PIE-F",/)
70 P=P+PINC
CALL MCONT (CTI)
WRITE (6,37) P, CTM
37 FORMAT (37X,F7.3,17X,E13.6)
IF (P.LT.PF) GO TO 70
RETURN
12 WRITE (6,38)
38 FORMAT (35X,"PRESION-ATM",10X,"DIFUSION CM2/SEG",/)
71 P=P+PINC
IF (NCOMP.GT.2) GO TO 58
CALL DIFUS (DIM)
GO TO 950
58 CALL MDIFUS (MDIM)
DIM=MDIM
950 WRITE (6,39) P, DIM
39 FORMAT (37X,F7.3,15X,E13.6)
IF (P.EQ.PF) GO TO 71
RETURN
END

```

N O M E N C L A T U R A .

Descripción.	
T	Temperatura inicial.
P	Presión inicial.
TF	Temperatura final.
PF	Presión final.
TINC	Incremento de temperatura.
PINC	Incremento de presión.
PROP	Propiedad deseada.
COND	Tipo de cálculo.
NCOMP	Número de componentes de la mezcla.
INDICE	Clave de cada componente en el banco de datos.

## Gráficas.

En las primeras etapas de un estudio frecuentemente se requiere de una idea general de cómo varía el comportamiento de un material bajo ciertas condiciones de operación, en muchos casos una presentación gráfica puede ser la mejor solución.

### 3.7.h - Subrutina Grafic.

Esta subrutina tiene por objeto generar gráficas de una propiedad de algún compuesto puro contra temperatura o presión según se requiera, este subprograma no efectúa gráficas de todas las propiedades incluidas en el programa a la vez.

Nombre	Descripción	Datos Proporcionados por el usuario.	Unidades de Salida.
GRAFIC	Generación de gráficas de una propiedad de compuestos puros variando T. o P. de operación.	T, TINC, TF, P, PINC, PF, COND.	Depende de la propiedad calculada.
Subrutinas Auxiliares CARTE, MIMAX	Descripción		
	Graficador constituido mediante programación en sí		

C SUBROUTINA PARA ELABORAR LA GRAFICA DE UNA PROPIEDAD DE  
 C UN COMPUESTO PURO

```

SUBROUTINE GRAFIC (PRJP)
COMMON/CONS/VAL(55,38)
COMMON/EST/TAP,F00,TR,INDEX
COMMON/HIX/HCOMP,X(10),AHON(40),COND,INDICE(10)
COMMON/MT/TF,TINC,PT,PINC,AEQU
DIMENSION OPT(8)
DIMENSION OPTP(5)
DIMENSION TEN(999), PRO(1,999), XPL(999), XPLO(999), IG(1,999)
DATA OPT/6HCAPACI,6HENTALP,6HCALOR,6HDENSID,6HVISCOS,6HCONDUC,6HP
1RESID,6HTENSIL/
DATA OPTP/6HCAPACI,6HENTALP,6HDENSID,6HVISCOS,6HCONDUC/
IF (COND.EQ.GPPURO) GO TO 100

```

C GENERACION DE GRAFICA POR VARIACION DE TEMPERATURA

```

C
WRITE (6,110) T, TF, TINC, P
110 FORMAT (46X,"GENERACION DE GRAFICA",/,46X,"*****
1 ** *****",//,43X,"TEMPERATURA INICIAL-K = ",4X,F7.2,/,4
23X,"TEMPERATURA FINAL-K = ",6X,F7.2,/,43X,"INCREMENTO DE TEMPERA
3TURA-K = ",F5.2,/,43X,"PRESION DE CALCULO-ATM = ",5X,F7.2,/)
T=T+TINC
DO 3000 I=1,8
IF (PRJP.EQ.OPT(I)) GO TO 3300
3000 CONTINUE
CALL ERROR (2)
3300 GO TO (1,2,3,4,5,6,7,8),I
1 J=0
31 T=T+TINC
CALL CAPC(CP)
J=J+1
TEN(J)=T
PRO(1,J)=CP
IF (T.LE.TF) GO TO 31
CALL CARTE(J,PRO,TEN,1,XPL,XPLO,IG)
WRITE (6,120)
120 FORMAT (35X,"CAPACIDAD CALORIFICA CAL/G-MOL-K VS TEMPERATURA
1-K",/)
RETURN
2 J=0
32 T=T+TINC
CALL ENTALP(H)
J=J+1
TEN(J)=T
PRO(1,J)=H
IF (T.LE.TF) GO TO 32
CALL CARTE(J,PRO,TEN,1,XPL,XPLO,IG)
WRITE (6,52)
52 FORMAT (35X,"ENTALPIA CAL/G-MOL VS TEMPERATURA-K",/)
RETURN
3 J=0
33 T=T+TINC
CALL CALV(HV)
J=J+1
TEN(J)=T
PRO(1,J)=HV
IF (T.LE.TF) GO TO 33

```



```

CALL CARTE(J,PRO,TEM,1,XPL,XPLU,IG)
WRITE(6,53)
53 FORMAT (35X,"CALOR LATENTE DE VAP. BTU/LB VS TEMPERATURA-K",
1/)
RETURN
4 J=0
34 T=T+TI,0
CALL FLUC(F)
J=J+1
TEH(J)=T
PRU(1,J)=0
IF (T.LE.TF) GO TO 34
CALL CARTE(J,PRO,TEM,1,XPL,XPLU,IG)
WRITE(6,54)
54 FORMAT (35X,"DENSIDAD LB/PIE-3 VS TEMPERATURA-K",/)
RETURN
5 J=0
35 T=T+TI,0
CALL VISC(V)
J=J+1
TEH(J)=T
PRU(1,J)=V
IF (T.LE.TF) GO TO 35
CALL CARTE(J,PRO,TEM,1,XPL,XPLU,IG)
WRITE(6,55)
55 FORMAT (35X,"VISCOSIDAD CENTIPOISES VS TEMPERATURA-K",/)
RETURN
6 J=0
36 T=T+TI,0
CALL QUNT(CT)
J=J+1
TEH(J)=T
PRU(1,J)=CT
IF (T.LE.TF) GO TO 36
CALL CARTE(J,PRO,TEM,1,XPL,XPLU,IG)
WRITE(6,56)
56 FORMAT (35X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA-BTU/HR-PIE-F VS TEMPERATU
1RA-K",/)
RETURN
7 J=0
37 T=T+TI,0
CALL EVAP(PV)
J=J+1
TEH(J)=T
PRU(1,J)=PV
IF (T.LE.TF) GO TO 37
CALL CARTE(J,PRO,TEM,1,XPL,XPLU,IG)
WRITE(6,57)
57 FORMAT (35X,"PRESION DE VAPOR, MMHG VS TEMPERATURA-K",/)
RETURN
8 J=0
38 T=T+TI,0
CALL TENS(TS)
J=J+1
TEH(J)=T
PRU(1,J)=TS
IF (T.LE.TF) GO TO 38
CALL CARTE(J,PRO,TEM,1,XPL,XPLU,IG)
WRITE(6,58)
58 FORMAT (35X,"TENSION SUPERFICIAL DINAS/CM VS TEMPERATURA-K",

```

1/)

RETURN

C

C GENERACION DE GRAFICA POR VARIACION DE PRESION

C

100 IF (END.EQ.1) GO TO 200

CALL ERRO(CD)

200 WRITE (6,70) P, PF, PINC, T

70 FORMAT (46X,"GENERACION DE GRAFICA",//,46X,"\*\*\*\*\*")

1 \*\* \*\*\*\*\*"///,43X,"PRESION INICIAL=ATM = "F7.2//,43X,

2"PRESION FINAL=ATM = "F7.2//,43X,"INCREMENTO DE PRESION=ATM = "F7.2//,43X,

3F7.2//,43X,"TEMPERATURA DE CALCULO-K = "F7.2///)

P=P-PINC

DO 4000 I=1,5

IF (PRG.PEQ.OPTP(I)) GO TO 4400

4000 CONTINUE

CALL ERRO(2)

4400 GO TO (11,12,13,14,15),I

11 J=0

41 P=P+PII,C

CALL CAPC(CP)

J=J+1

TEM(J)=P

PRC(1,J)=CP

IF (P.LE.PF) GO TO 41

CALL CARTE(J,PRC,TEM,1,XPL,XPLU,IG)

WRITE (6,151)

151 FORMAT (35X,"CAPACIDAD CALORIFICA CAL/G-MUL-K VS PRESION=ATM

1"//)

RETURN

12 J=0

42 P=P+PINC

CALL ENTALP(H)

J=J+1

TEM(J)=P

PRC(1,J)=H

IF (P.LE.PF) GO TO 42

CALL CARTE(J,PRC,TEM,1,XPL,XPLU,IG)

WRITE (6,152)

152 FORMAT (35X,"ENTALPIA CAL/G-HOL VS PRESION=ATM"//)

RETURN

13 J=0

43 P=P+PINC

CALL DENC(D)

J=J+1

TEM(J)=P

PRC(1,J)=D

IF (P.LE.PF) GO TO 43

CALL CARTE(J,PRC,TEM,1,XPL,XPLU,IG)

WRITE (6,153)

153 FORMAT (35X,"DENSIDAD LB/PIE-3 VS PRESION=ATM"//)

RETURN

14 J=0

44 P=P+PII,C

CALL VIS(V)

J=J+1

TEM(J)=P

PRC(1,J)=V

IF (P.LE.PF) GO TO 44

CALL CARTE(J,PRC,TEM,1,XPL,XPLU,IG)

```

WRITE (6,155)
155 FORMAT (35X,"VISCOSIDAD CENTIPOISES VS PRESION=ATM",/)
RETURN
15 J=0
45 P=P+PIHC
CALL CONT(CT)
J=J+1
TEH(J)=P
PRU(1,J)=CT
IF (P.LE.PF) GO TO 45
CALL CARTH(J,PRO,TEH,1,XPL,XPLU,IG)
WRITE (6,156)
156 FORMAT (35X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA BTU/HR*PIE*F VS PRESION=ATM",/)
RETURN
END

```

C SUBROUTINA AUXILIAR PARA LA ELABORACION DE UNA GRAFICA: GRAFICADOR.

```

SUBROUTINE CARTA(I,X,T,H,XPL,XPLD,IG)
DIMENSION X(1,I), T(I), IS(12), XPL(I), XPLD(I), IG(1,I), L(101),
1A(6)
DATA IS/' ',' ',' ',' ',' ',' ',' ',' ',' ',' ',' ',' '/
20 FORMAT(1H+,F14.5)
21 FORMAT(2X)
22 FORMAT(1H1)
23 FORMAT(15X,5("I", "I"))
24 FORMAT(6(10X,F10.3))
25 FORMAT(1H+,14X,101(", "))
26 FORMAT (//)
30 FORMAT(1H+,14X,101A1)
WRITE(6,22)
CALL MINMAX(T,T0,TF,I)
DO 1 K=1,I
DO 2 J=1,I
2 XPL(J)=X(K,J)
CALL MINMAX(XPL,XMIN,XMAX,I)
XPLD(K)=XMIN
KK=K+I
1 XPLD(KK)=XMAX
KK=2*N
CALL MINMAX(XPLD,XMIN,XMAX,KK)
DO 3 K=1,I
DO 3 J=1,I
3 IG(K,J)=50.*(1.-(X(K,J)-XMIN)/(XMAX-XMIN))+1.5
DO 4 K=1,51
L(1)=IS(1)
DO 5 J=2,101
5 L(J)=IS(2)
DO 6 II=1,I
DO 7 III=1,I
IF(IG(II,III)=K)7,8,7
8 SJ=100.*(III-1)/(I-1)+1.5
JJ=SJ
L(J)=IS(II+2)
7 CONTINUE
WRITE(6,30)(L(KK),KK=1,101)
DO 6 KK=1,101
L(KK)=IS(2)
6 CONTINUE
IF(K=51)17,18,17
17 SJ=(K+4)/5.
JK=5J
IF(JK=5J)9,10,9
10 SJ=XMAX-(K-1)*(XMAX-XMIN)/50.
WRITE(6,20)SJ
9 WRITE(6,21)
IF(K=50)4,14,4
14 DO 11 J=1,101
11 L(J)=IS(1)
WRITE(6,25)
4 CONTINUE
18 WRITE(6,20)XMIN
WRITE(6,23)
DO 12 J=1,6
12 A(J)=TJ+(J-1)*(TF-TC)/5.
WRITE(6,24)(A(J),J=1,5)

```

```
WRITE (6,26)
```

```
RETURN
```

```
END
```

```
C SUBROUTINA AUXILIAR PARA ENCONTRAR LOS PUNTOS MAXIMO Y MINIMO  
C DE LA GRAFICA
```

```
SUBROUTINE HMAX(V,VMIN,VHAX,N)
```

```
DIMENSION V(50)
```

```
VHAX=V(1)
```

```
VMIN=V(1)
```

```
DO 1 I=2,N
```

```
IF(V(I)-VHAX)2,2,3
```

```
3 VHAX=V(I)
```

```
GO TO 1
```

```
2 IF(VMIN-V(I))1,1,4
```

```
4 VMIN=V(I)
```

```
1 CONTINUE
```

```
RETURN
```

```
END
```

## N O M E N C L A T U R A.

Descripción.	
T	Temperatura inicial.
P	Presión inicial.
TF	Temperatura Final.
PF	Presión Final.
EDO	Estado físico del compuesto.
TINC	Incremento de temperatura.
PINC	Incremento de presión.
COND	Tipo de cálculo.
TEM	Temperatura de cálculo en un punto de la gráfica
PRO	Propiedad que va a graficarse.

### 3.7.i.- Subrutina Grafim.

Esta subrutina tiene por objeto generar gráficas de alguna de las propiedades incluídas en el sistema contra temperatura o presión según lo requiera el usuario. No es posible hacer una gráfica de todas las propiedades a la vez.

Nombre	Descripción	Datos proporcionados por el usuario.	Unidades de salida.
GRAFIM	Generación de gráficas de una propiedad de alguna mezcla de compuestos puros variando T. o P. de operación.	T, TF, TINC, P, PF, PINC, COND.	Depende de la propiedad calculada.

C. SUBROUTINA PARA ELABORAR LA GRAFICA DE UNA PROPIEDAD  
C DE UNA MEZCLA DE COMPUESTOS.

```

SUBROUTINE GRAFIM (PRDP)
COMMON/CONS/VAL(55,38)
COMMON/EST/T,P,FDD,TRE,INDEX
COMMON/MIX/HCOMP,X(10),ANOH(40),COND,INDICE(10)
COMMON/MT/TF,TINC,PF,PI,INC,AEDU
DIMENSION OPT(6)
DIMENSION TEN(999), PRO(1,999), XPL(999), XPLD(999), IG(1,999)
DATA OPT/6,HCAPACI,6,HENTALP,6,HDENSID,6,HVISCOS,6,HCONDUC,6,HUFUSI/
WRITE (6,110)
110 FORMAT (43X,"GENERACION DE GRAFICA",/,43X,"*****" **
1 *****",//,42X,"COMPUESTOS",13X,"FRACCION MOL",//)
DO 105 I=1,HCOMP
WRITE (6,13) (VAL(INDICE(I),JK),JK=4,7), X(I)
13 FORMAT (36X,4A6,5X,16,4,/)
105 CONTINUE
IF (COND.EQ.6HGPHEZC) GO TO 100

```

C  
C GENERACION DE GRAFICA POR VARIACION DE TEMPERATURA  
C

```

WRITE (6,14) T, TE, TINC, P, AEDU
14 FORMAT (/,43X,"TEMPERATURA INICIAL-K =",2X,F7.2,/,43X,"TEMPERATUR
1A FINAL-K =",4X,F7.2,/,43X,"INCREMENTO DE TEMP.-K =",4X,F5.2,/,
2,43X,"PRESION DE CALCULO-ATM =",1X,F7.2,/,50X,"ESTADO FISICO: ",A
33,/)
T=T+TINC
DO 500 I=1,6
IF (PRDP.EQ.OPT(I)) GO TO 510
500 CONTINUE
CALL ERROR(2)
510 GO TO (1,2,3,4,5,6),I
1 J=0
60 T=T+TINC
CALL HCAPC(CPH)
J=J+1
TEN(J)=T
PRO(1,J)=CPH
CALL CARTE(J,PRO,TE",1,XPL,XPLD,IG)
WRITE (6,15)
15 FORMAT (35X,"CAPACIDAD CALORIFICA CAL/G-MOL-K VS TEMPERATURA
1=K",/)
RETURN
2 J=0
61 T=T+TINC
CALL HENTAL(ENH)
J=J+1
TEN(J)=T
PRO(1,J)=ENH
IF (T.LE.TF) GO TO 61
CALL CARTE(J,PRO,TE",1,XPL,XPLD,IG)
WRITE (6,48) ITC
48 FORMAT (16X,"TEMPERATURA DE REFERENCIA-K = ",F7.2,/)
WRITE (6,52)
52 FORMAT (35X,"ENTALPIA CAL/G-MOL VS TEMPERATURA-K",/)
RETURN
3 J=0

```



```

62 T=T+TILC
CALL MDEN(LM)
J=J+1
TEH(J)=T
PRU(1,J)=DH
IF (T.LE.TF) GO TO 62
CALL CARTE(J,PRU,TEH,1,XPL,XPLU,IG)
WRITE(6,54)
54 FORMAT (35X,"DENSIDAD LB/PIE=3 VS TEMPERATURA="K"/)
RETURN
4 J=0
63 T=T+TIIC
CALL HVISCVH)
J=J+1
TEH(J)=T
PRU(1,J)=VH
IF (T.LE.TF) GO TO 63
CALL CARTE(J,PRU,TEH,1,XPL,XPLU,IG)
WRITE(6,55)
55 FORMAT (35X,"VISCOSIDAD CENTIPOISES VS TEMPERATURA="K"/)
RETURN
5 J=0
64 T=T+TIIC
CALL HCONT(CTH)
J=J+1
TEH(J)=T
PRU(1,J)=CTH
IF (T.LE.TF) GO TO 64
CALL CARTE(J,PRU,TEH,1,XPL,XPLU,IG)
WRITE(6,56)
56 FORMAT (35X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA BTU/HR=PIE-F VS TEMPERATURA="K"/)
RETURN
6 J=0
65 T=T+TIIC
IF (NCLMP.GT.2) GO TO 80
CALL DIFUS(DIH)
GO TO 82
80 CALL HDIFUS(DIH)
DIH=HDIH
82 J=J+1
TEH(J)=T
PRU(1,J)=DIH
IF (T.LE.TF) GO TO 65
CALL CARTE(J,PRU,TEH,1,XPL,XPLU,IG)
WRITE(6,57)
57 FORMAT (35X,"DIFUSION CM2/SEG VS TEMPERATURA="K"/)
RETURN

```

C

C GENERACION DE GRAFICA POR VARIACION DE PRESION

C

```

100 WRITE (6,27) P, PF, PINC, T, AEDD
27 FORMAT (43X,"PRESION INICIAL=ATM",7X,"=",2X,F7.2,/43X,"PRESION FI
INAL="AT",9X,"=",2X,F7.2,/43X,"INCREMENTO DE PRESION=ATM=",2X,F5.
22,/43X,"TEMPERATURA DE CALCULO="K",1X,F7.2,/50X,"ESTADO FISICO
3: ",A3,///)
P=PF/PINC
DO 550 I=1,6
IF (PRU.FG.DPT(1)) GO TO 560
550 CONTINUE

```

```

560 GO TO (7,8,9,10,11,12),1
7 J=0
66 P=P+PING
CALL HCAPCC(CPI)
J=J+1
TEM(J)=P
PRO(1,J)=CPI
IF (P.LT.PF) GO TO 66
CALL CARTE(J,PRO,TEM,1,XPL,XPLD,IG)
WRITE (6,151)
151 FORMAT (35X,"CAPACIDAD CALORIFICA CAL/G*MOL VS PRESION=ATM",
1/)
RETURN
8 J=0
67 P=P+PING
CALL HENTAL(HM)
J=J+1
TEM(J)=P
PRO(1,J)=HM
IF (P.LT.PF) GO TO 67
CALL CARTE(J,PRO,TEM,1,XPL,XPLD,IG)
WRITE (6,48) TEM
WRITE (6,152)
152 FORMAT (35X,"ENTALPIA CAL/G*MOL VS PRESION=ATM",/)
RETURN
9 J=0
68 P=P+PING
CALL HDEN(DH)
J=J+1
TEM(J)=P
PRO(1,J)=DH
IF (P.LT.PF) GO TO 68
CALL CARTE(J,PRO,TEM,1,XPL,XPLD,IG)
WRITE (6,153)
153 FORMAT (35X,"DENSIDAD LB/PIE=3 VS PRESION=ATM",/)
RETURN
10 J=0
69 P=P+PING
CALL HVIS(VH)
J=J+1
TEM(J)=P
PRO(1,J)=VH
IF (P.LT.PF) GO TO 69
CALL CARTE(J,PRO,TEM,1,XPL,XPLD,IG)
WRITE (6,155)
155 FORMAT (35X,"VISCOSIDAD CENTIPOISES VS PRESION=ATM",/)
RETURN
11 J=0
70 P=P+PING
CALL HCOUNT(CTH)
J=J+1
TEM(J)=P
PRO(1,J)=CTH
IF (P.LT.PF) GO TO 70
CALL CARTE(J,PRO,TEM,1,XPL,XPLD,IG)
WRITE (6,156)
156 FORMAT (35X,"CONDUCTIVIDAD TERMICA BTU/HR*PIE*F VS PRESION=AT
1M",/)
RETURN
12 J=0

```

```

71 P=P+PIHC
   IF (NCURP.GT.2) GO TO 58
   CALL DIFUS(DIH)
   GO TO 850
58 CALL DIFUS(HDIH)
   DIH=HDIH
850 J=J+1
   TEN(J)=P
   PRG(1,J)=DIH
   IF (P.LE.PF) GO TO 71
   CALL CARTE(J,PRG,TE,1,XPL,XPLU,IG)
   WRITE (6,157)
157 FORMAT (35X,"DIFUSION CM2/SEC VS PRESION-ATM",/)
   RETURN
   END

```

N O M E N C L A T U R A .

Descripción.	
T	Temperatura inicial.
P	Presión inicial.
TF	Temperatura Final.
PF	Presión final.
EDO	Estado ffsico de la mezcla.
TINC	Incremento de temperatura.
PINC	Incremento de presión.
COND	Tipo de cálculo.
TEM	Temperatura de cálculo en un punto de la gráfica.
PRO	Propiedad que va a graficarse.

### 3.8.- B L O C K     D A T A

Un servicio útil a los usuarios del sistema es el proporcionado -- por un banco de datos que contiene las constantes físicas de los compues-- tos puros, las que deben ser empleadas en los diferentes métodos de cálculo de las propiedades incluidas en el programa.

Este conjunto de datos evita que el usuario se vea obligado a recurrir a la literatura para obtener una o más constantes físicas de cada uno de los compuestos, lo que se traduce, además de enfrentarse a una tarea tediosa, en una pérdida de tiempo que muchas veces es necesario eludir.

Así, el conjunto de datos se fué estructurando poco a poco, a medida que se requerían las constantes en las correlaciones implementadas en el sistema. El primer grupo de datos consistió de 17 constantes para cada compuesto, a saber:

VAL(INDEX(I))	CONSTANTE
1	Clave del compuesto en el banco de datos.
2	Polaridad de la molécula.
3	La presencia o no de enlace de Hidrógeno.
4-7	Nombre del compuesto.
8	Peso molecular.
9	Temperatura de ebullición a condiciones normales ( $^{\circ}\text{K}$ ).
10	Densidad relativa a temperatura ambiente (g/ml)
11	Temperatura crítica ( $^{\circ}\text{K}$ )
12	Presión crítica (atm.).
13	Densidad crítica (g/ml.)
14	Factor de compresibilidad crítico.
15	Constante A para la ecuación del Cp de gas.
16	" B " " " " " " " "
17	" C " " " " " " " "
18	" D " " " " " " " "
19	Límite inferior de temperatura para la validez de las constantes del Cp. ( $^{\circ}\text{K}$ )
20	Límite superior de temperatura para la validez de las constantes del Cp. ( $^{\circ}\text{K}$ )

VAL(INDEX(I)) denota el lugar que ocupa cada constante en el banco de datos.

A pesar de ser un banco de datos pequeño, la computadora requería de un almacén de memoria muy grande para poder contener todas las constantes, la memoria requerida frecuentemente llegó a:

28,200	palabras de memoria
21,275	" " "
19,890	" " "
17,120	" " "

Este problema se originó porque el conjunto de constantes se almacenó en una matriz cuya dimensión era 55x25 y los datos de cada compuesto estaban contenidos en una proposición DATA, debido a esto la computadora-- asignaba un campo de memoria para cada DATA igual a 55x25, y como el número de Data era 55 (1 para cada compuesto), la memoria requerida consecuentemente fué demasiada, esta dificultad se solucionó al asignar únicamente un DATA para toda la matriz de constantes.

En el segundo y último aumento en la capacidad del banco de datos-- se le añadieron 18 constantes:

VAL(INDEX(I))	CONSTANTE
21	Cte A para calcular el Cp de líquidos.
22	Cte B para calcular el Cp de líquidos.
23	Límite inferior de temperatura para validez de las constantes del Cp.
24	Límite superior de temperatura para validez de las constantes del Cp.
25	Cte A para la ecuación de Guzmán-Andrade.
26	Cte B para la ecuación de Guzmán-Andrade.
27	Valor de $i_c$ para la Ec de Sutherland.
28	Valor del exponente N para la Ec de Sutherland.
29	Constante C para la Ecuación de Sutherland.

30	Densidad del Líquido a 20 °C (g/ml.)
31	Valor de Calor Latente de Vaporización (cal/g)
32	Temperatura a la cual se tiene el calor latente anterior, en °C.
33	Cte. A para la Ec. de Mitra-Sanyal.
34	Cte. B para la Ec. de Mitra-Sanyal.
35	Cte. para calcular la densidad de líquidos.
36	Cte. C para calcular el Cp. de líquidos.
37	Factor acéntrico.
38	Factor de Hidrancia para la Ec. de Robbins-Kingra en el cálculo de Cond. Térmica de líquidos orgánicos.
3	Naturaleza del compuesto: Orgánico ó inorgánico.

Esta última constante se sustituyó por el enlace de hidrógeno posible en la molécula ya que al reemplazar correlaciones no era necesaria su presencia en el banco de datos.

Durante la recopilación de estas constantes se presentaron las siguientes dificultades:

a).- En ciertos casos hubo la necesidad de calcular algunas constantes a partir de datos experimentales mediante un sistema de ecuaciones-simultáneas con la ayuda de programas auxiliares como fué el caso de:

- 1.- Ctes. A,B,C para calcular el Cp de líquidos.
- 2.- Ctes. A, B para la Ec. de Mitra-Sanyal.
- 3.- Ctes. DI para calcular la densidad de líquidos.
- 4.- Ctes. A, B para la Ec. de Guzmán-Andrade.
- 5.- Ctes. N, C para la Ec. de Sutherland.

b).- No se pudieron calcular las Ctes. A,B,C para los siguientes 5 compuestos debido a que no se encontraron valores experimentales del Cp de líquidos.

Aire, Dióxido de nitrógeno, Nitrógeno, Sulfuro de hidrógeno y Trióxido de azufre.

c).- No se encontró la densidad a 20 °C para los siguientes compuestos orgánicos en estado líquido:

Acetileno	Metano
Bióxido de carbono	Monóxido de carbono
Etano	Oxido de etileno
Etileno	Propano
Formaldehido	Propileno

Todos se encuentran en estado gaseoso a esta temperatura. No fué necesario buscar esta propiedad para líquidos inorgánicos ya que la ecuación de Robbins-Kingrea solamente calcula la conductividad térmica de líquidos orgánicos.

d).- Las Ctes. A y B de la Ec. de Mitra-Sanyal no pudieron calcularse para los siguientes compuestos por la carencia de valores experimentales de tensión superficial:

Aire, Dióxido de azufre, Oxido nitroso y Sulfuro de hidrógeno.

e).- La Cte. C de la ecuación de Sutherland para calcular la viscosidad de gases a temperaturas mayores que la crítica, no fué determinada para:

Dióxido de nitrógeno, n-Dodecano y Trióxido de azufre.

Cuando se requiere una constante del banco de datos, se identifica mediante la proposición VAL(INDEX(I)) donde:

INDEX corresponde a la clave del compuesto y el subíndice (I) pertenece al número que se le ha asignado al valor de la constante en la matriz de datos.

LITERATURA.- (1, 3, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 43, 44)



BLUCK DATA

COMPOH/AUX/ARR(38\*55)

DATA ARR/ 1,0,0,0,6HACETAL,6HDFHIDU,6H 6H

144.05,293.36,0.783,461.16,54.7,0.263,0.257,4.19,3.164E-2,  
 2=5.15E-6,-3.8E-9,273.1000,14.2389,0.0151044,-80,110.,  
 30.023191,1324.654,0.0079,91654,0.330562,0.780,136.2,21.0,33.8892  
 4,0.0727487,1.05392,-0.111565E-4,0.314,0,  
 1 2,1,0,0,6HACETIL,6HEND 6H 6H  
 126.04,189.6,0.,309.16,62.0,0.231,0.274,5.37496,2.15257E-2,  
 2=15.223E-6,4.26684E-9,298.,1500.,19.5157,0.0774169,-150.,-10.,  
 3 0.0242755,768.66,0.00925,1.06632,0.273579,0.98.5,0,30.3712,0.09  
 474945,0.019675,0.2604E-3,0.181,0,  
 1 3,0,0,0,6HACETON,6HA 6H 6H  
 158.08,329.06,0.792,503.16,47.0,0.268,0.237,1.625,6.661E-2,  
 2=37.37E-6,8.307E-9,273.,1500.,29.2372,0.033396,-80.,80.,0.0150467,  
 31793.255,0.00711,96013,0.209391,0.7920,128.1,40.0,32.9115,0.06434  
 455,1.0243,0.20570E-3,0.315,0,  
 1 4,0,0,0,6HACIDD,6HACETIC,6HD 6H 6H  
 160.05,391.26,1.049,594.80,57.2,0.351,0.200,2.097664,0.05367507,-3.  
 2002875E-5,6.527628E-9,0,0,28.2704,0.041472,-10.0,140.,  
 30.0121315,2690.822,0.0078,1.03661,0.505824,1.0492,94.4,140.0,30.36  
 415,0.0492731,1.28604,0.609883E-4,0.442,0,  
 1 5,1,1,6HAIRE 6H 6H  
 129.0,78.9,0,0,132.46,37.2,0.35,0,6.713,0.04697E-2,1.147E-6,  
 2=0.4696E-9,273.,1800.,0,0,0,0,0,0,  
 3,0,0,0,0,1709,0.768,0.1140,0,204.9,-194.2,0,0,  
 41.12260,0,0.093,0,  
 1 6,0,1,6HAMONIA,6HCO 6H 6H  
 117.03,239.76,0.817,405.56,111.5,0.235,0.242,6.5846,0.61251E-2,  
 22.3663E-6,-1.5981E-9,273.,1500.,18.6956,0.0333794,-60.,0.,  
 3 0.0030155,2113.328,0.0096,0.981,0.3770,0,301.6,0,43.7018,0.1060  
 464,0.993159,0.316119E-3,0.252,0,  
 1 7,0,0,6HANILIN,6HA 6H 6H  
 193.12,457.56,1.022,699.16,52.4,0.341,0.250,-1.117712,0.1070865,-4.  
 2967952E-5,3.240824E-9,0,0,45.8034,4.656E-2,-10.,190.,  
 3 0.0025426,4339.735,0.0063,98524,0.424551,1.02173,103.7,183.0,  
 438.6746,0.0535,0.98,1.20255,0.240075E-3,0.385,1,  
 1 8,1,1,6HARGON 6H 6H  
 139.94,87.46,0,0,151.16,48.0,0.531,0.29,0.497,0,0,0,0,0,90.,  
 29999.,5.02467,-0.534262E-3,-230.,-150.,0.,0,0.021,  
 30.816,0,1.699,0,38.8,-185.8,20.6827,0.142142,  
 41.80926,0.168578E-4,-0.014,0,  
 1 9,1,0,6HBENCEN,6HD 6H 6H  
 178.11,353.26,0.874,561.66,47.7,0.304,0.274,-9.0726,11.7135E-2,  
 2=76.7622E-6,18.9559E-9,298.,1500.,31.264577,4.770893E-2,10.,65.,  
 3 0.0078413,2573.492,0.0071,965742,0.387940,0.87865,97.5,60.0,3  
 44.1101,0.0607411,1.09,0.01,0.9019E-4,0.215,0,  
 1 10,0,1,6HBIDIXID,6HD DE C,6HARBONO  
 16H 44.01,194.66,1.101,304.26,73.0,0.46,0.274,5.10306,  
 21.5354E-2,-9.80477E-6,2.34067E-9,298.,1500.,28.1232,0.431738,-50.,  
 310.,0.001427,2322.078,0.0137,0.935,0.2397,0,55.0,0,34.370  
 43,0.113080,1.67460,0.51345E-2,0.223,0,  
 1 11,1,1,6HBRONO 6H 6H  
 16H 159.83,331.94,3.119,584.16,102.0,0.848,0.306,8.051,  
 20.2462E-2,-2.128E-6,0.6406E-9,273.,1500.,17.1160,0.857543E-2,-50.,  
 360.,0.0387401,1841.992,0.01448,909707,0.594679,0.46.0,63.1,45  
 4.4741,0.0791424,3.84209,-0.198244E-3,0.044,0,  
 1 12,1,0,6H1-3 BU,6HTADIEN,6HD  
 16H 54.1,268.8,0.615,425.16,42.7,0.245,0.271,-1.39375,

28.43542E-2=57.3046E-6,14.9358E-9,298.,1500.,27.961928,5.65181E-2,  
 3-90.,25.,0.0212764,1161.663,0.00698,1.06828,0.360453,0.621,96.  
 43,40.,0.26.9968,0.0629463,0.872051,2.4286E-4,0.196,0,  
 1 13,1,0,6HN-RUTA,6HND 6H  
 16H 58.12,272.56,0.68,426.16,37.5,0.228,0.274,0.585433,  
 29.35864E-2=-48.4829E-6,9.74318E-9,298.,1500.,31.807174,5.848026E-2  
 3,-100.,25.,0.0242627,1184.881,0.00682,1.01765,0.368025,0.579,89.8,  
 410.0,27.1119,0.0646926,0.812213,1.9193E-4,0.197,0,  
 1 14,1,0,6HISOBUT,6HAND 6H  
 16H 58.12,261.46,0.664,408.16,36.0,0.222,0.283,-2.1289,  
 210.0204E-2=-55.8023E-6,12.1915E-9,298.,1500.,31.799869,7.600911E-2  
 3,-90.,25.,0.004838,2010.567,0.007,9.978761,0.340598,0.557,82.4,  
 410.0,24.4175,0.0592209,0.798427,2.0440E-4,0.185,1,  
 1 15,0,0,6HN-BUTA,6HNDL 6H  
 16H 74.12,390.16,0.81,562.96,48.4,0.27,0.259,3.50714,  
 28.60837E-2=-31.7807E-6,0.352967E-9,273.,1000.,36.640,0.106445,-30.  
 3,130.,0.0011399,4565.767,0.0065,1.01596,0.454162,0.8098,  
 4141.3,116.8,27.3226,0.0437778,1.00951,0.607372E-3,0.599,-1.,  
 1 16,0,0,6HISOBUT,6HANDL 6H  
 16H 74.12,381.6,0.808,538.16,48.0,0.24,0.257,-2.002579,1.0126  
 235,-4.982887E-5,8.539813E-9,0 0 37.3872,845002E-1,-3  
 30.,130.,0.0002914,5537.41,0.00667,9.96887,0.412553,0.8020,138.1,10  
 46.9,25.3613,0.0403631,1.01526,0.751896E-3,0.553,1,  
 1 17,1,0,6H1-BUTE,6HNU 6H  
 16H 56.10,266.86,0.675,419.16,39.7,0.233,0.277,-0.569282,  
 28.33131E-2=-45.7361E-6,9.85219E-9,298.,1500.,29.338526,5.301946E-2  
 3,-70.,25.,0.0195160,1199.354,0.00694,1.12112,0.435355,0.5946,86  
 4.8,25.0,28.1040,0.0669605,0.841244,1.6466E-4,0.191,0,  
 1 18,1,0,6HCICLOH,6HEXAND 6H  
 16H 84.16,353.66,0.774,554.16,40.4,0.272,0.271,-15.2605,  
 216.0212E-2=-85.6959E-6,16.6551E-9,298.,1500.,34.9311,0.0723341,-50  
 3,110.,0.0057473,2995.722,0.00632,1.0567,0.4866598,0.779,93.  
 48,25.,31.9347,0.0584416,0.975845,0.217413E-3,0.214,0,  
 1 19,1,0,6HCICLOP,6HENTAND 6H  
 16H 70.13,322.66,0.74,511.76,44.6,0.27,0.276,-12.8082,  
 212.9555E-2=-772.3909E-6,15.49E-9,298.,1500.,28.409198,7.11773E-2,  
 3-90.,30.,0.0178018,1860.741,0.0069,9.991738,0.407918,0.745,97.1,  
 425.0,32.5575,0.0646123,0.960301,2.3504E-4,0.193,0,  
 1 20,1,1,6HCLORD 6H 6H  
 16H 70.91,238.56,0.0,417.16,76.1,0.573,0.276,6.8214,  
 20.57095E-2=-5.107F-6,1.547E-9,273.,1500.,16.5696,-0.026441,-110.,  
 310.,0.0777351,874.655,0.0129,1.0,0.325,0.69,2,-33.7,34.9503,0.  
 40819327,2.00652,-0.319178E-3,0.071,0,  
 1 21,0,0,6HCLORD,6HENCEHO 6H  
 16H 112.56,405.26,1.106,632.4,44.6,0.365,0.265,-4.886605,117  
 25017,-8.200907E-5,2.223991E-8,0 0 35.2496,371639E-1,0.  
 3,190.,0.0234042,2057.376,0.00697,1.00416,0.428977,1.1058,77.6,  
 4130.6,33.6907,0.0523984,1.33274,0.396267E-4,0.249,1.,  
 1 22,0,0,6HCLORD,6HORMO 6H  
 16H 119.39,334.36,1.489,536.16,54.0,0.516,0.294,7.22951,  
 23.60843E-2=-28.3455E-6,7.91962E-9,273.,1000.,26.3852,0.522331E-1,  
 3-100.,80.,0.019996,1871.90,0.00931,9.966874,0.34961,1.4911,60.9,40  
 4.0,34.7525,0.065006,1.8891,0.205202E-3,0.215,3.,  
 1 23,0,1,6HCLORD,6MU DE H,6HIDROGE  
 16HND 36.47,188.16,1.48,324.56,81.6,0.42,0.266,7.244,-0.182E-2,  
 23.170E-6,-1.03E-9,273.,1500.,017.3747,0.025273,-130.,-70.,  
 30.130743,468.55,0.0137,1.03,0.3570,0.105.9,-85.0,52.6756,0.0598544  
 4,1.53662,0.18235E-4,0.128,0,  
 1 24,0,1,6HINDIXIO,6MU DE A,6HZUFRE  
 16H 64.07,263.16,0.0,430.96,77.0,0.52,0.269,6.1570,1.384E-2,

2-9.103E-0, 2.057E-9, 273., 1800., 20.3796447, 17.40113E-3, 10., 140., .026  
 31396, 1462, 1001222, 0.0117, 1.03526, 0.416, 0, 91.3, 0, 0. 0.  
 4 1.93201, 0 0.251, 0  
 1 25, 0, 1, 6HDIOXID, 6HU DE H, 6HITROGE  
 16HND 46.01, 294.36, 1.491, 431.16, 100.0, 0.562, 0.271, 5.48  
 21.365E-2, -8.41E-6, 1.80E-9, 273., 1500., 0 0 0 0  
 3 0.0196449, 1793.15, 0.019644, 0 0 0, 39.0, 18.0, 39.  
 45348, 0.0, 09638, 2.0376, 0. 0.856, 0  
 1 26, 0, 0, 6HDISULF, 6HURD DE, 6H CARBO  
 16HND 76.13, 319.46, 1.261, 546.16, 76.0, 0.368, 0.293, 7.39, 1.489E-2  
 2-10.96E-6, 2.760E-9, 273., 1800., 18.1570, 0.00135946, -70., 40., 0.  
 30240329, 1606.58, 0.00955, .988689, 0.423705, 1.2632, 75.5, 100.0, 39.7321  
 4, 0.0728512, 1.58970, -0.116526E-4, 0.133, 0  
 1 27, 1, 0, 6HN-DEDE, 6HCAND, 6H  
 16H 170.33, 487.66, 0.751, 659.16, 17.9, 0.255, 0.238, -2.22751,  
 227.4378E-2, -151.569E-6, 32.4628E-9, 298., 1500., 87.419673, 7.774455E-2  
 3, -5., 45. 0.0103307, 0.2912.843, 0 0 0, 0.74871  
 4, 109.0, 214.5, 28.1806, 0.0448197, 0.893129, 7.5763E-4, 0.576, 0  
 1 28, 0, 0, 6HESTIRE, 6HND, 6H  
 16H 104.14, 418.66, 0.903, 647.56, 39.4, 0.28, 0.275, -6.7462,  
 214.7119E-2, -96.0684E-6, 23.7274E-9, 298., 1500., 41.887574, 6.63811E-2,  
 3-30., 30. 0.0127221, 2389.934, 0.005919, .963568, 0.390612, 0.9060, 6  
 4, 9.8, 240.0, 23.9395, 0.0223241, 1.08542, 2.0862E-4, 0.315, 0  
 1 29, 1, 0, 6HETAND, 6H, 6H  
 16H 30.07, 184.56, 0.597, 305.26, 48.8, 0.21, 0.285, 1.29285,  
 24.25354E-2, -16.5699E-6, 2.08148E-9, 298., 1500., 24.9297, 0.13169, -140.  
 3, -50. 0.0226486, 735.362, 0.00852, .917022, 0.260466, 0.97.5, -40  
 4, 0.24.7293, 0.080126, 0.719497, 0.505082E-3, 0.090, 0  
 1 30, 0, 0, 6HETANOL, 6H, 6H  
 16H 46.07, 351.56, 0.789, 516.26, 63.1, 0.2755, 0.248, 2.4887,  
 25.00416E-2, -19.7006E-6, 0.939604E-9, 273., 1000., 25.0913, 0.0852494, -3  
 30., 130., 0.0035775, 3366.630, 0.0078, 1.02512, 0.476576, 0.7920, 20  
 44.3, 78.3, 26.7711, 0.0457302, 1.01829, 0.421668E-3, 0.625, -1.,  
 1 31, 0, 0, 6HETER E, 6HTILICD, 6H  
 16H 74.12, 307.76, 0.708, 467.76, 35.5, 0.2625, 0.255, 7.758179, 6.94  
 20719E-2, -1.618139E-5, -2.837996E-9, 0 0 0, 39.4318, 0.779804E  
 3-1, -50., 90., 0.0102514, 1762.816, 0.0067, 0.833428, 0.445445, 0.71378, 83  
 4, 9.34.6, 29.9586, 0.0651576, 0.956957, 0.74313E-3, 0.273, 2.,  
 1 32, 1, 0, 6HETILEN, 6HO, 6H  
 16H 28.05, 169.26, 0.605, 282.86, 50.5, 0.22, 0.27, 0.985498,  
 23.70262E-2, -19.4768E-6, 4.05454E-9, 298., 1500., 27.6071, 0.175163, -120  
 3., -10. 0.015514, 780.3727925, 0.00929, 0.97374, 0.2259, 0.115.4  
 4-103.7, 26.1212, 0.0917164, 0.744804, 0.748E-3, 0.087, 0  
 1 33, 0, 0, 6HFORMAL, 6HDEHIDU, 6H  
 16H 30.03, 252.16, 0.815, 410.16, 66.9, 0.266, 0.223, 5.447,  
 20.9739E-2, 1.703E-6, -2.078E-9, 273., 1500., 21.0050, 0.417083E-1, -70.,  
 330. 0.0212943, 1215.1, 0.0093, .896061, 0.315050, 0.128.8, 80.0, 27.7  
 4815, 0.0603069, 1.08497, 0.206863E-3, 0.274, 0  
 1 34, 1, 0, 6HN-HEXA, 6HND, 6H  
 16H 86.17, 342.16, 0.655, 507.96, 29.5, 0.234, 0.264, -1.05432,  
 213.899E-2, -74.4861E-6, 15.5057E-9, 298., 1500., 43.89999, 9.499996E-2,  
 3-20., 30. 0.0194372, 1618.257, 0.00639, .886441, 0.298182, 0.65937, 87  
 4.5, 25.0, 26.7195, 0.0524159, 0.852702, 5.0001E-4, 0.302, 0  
 1 35, 1, 0, 6HN-HEPT, 6HAND, 6H  
 16H 100.20, 371.56, 0.680, 539.96, 26.8, 0.238, 0.259, -1.22928,  
 216.1454E-2, -87.2008E-6, 18.2892E-9, 298., 1500., 51.684425, 7.57473E-2,  
 3-80., 100., 0.0107463, 2132.080, 0.00561, .970146, 0.395877, 0.68376, 87.2  
 4, 25.0, 26.9998, 0.0503930, 0.864212, 2.0906E-4, 0.353, 0  
 1 36, 1, 1, 6HHIDRUG, 6HEND, 6H  
 16H 2.016, 21.16, 0.0, 33.26, 12.8, 0.031, 0.304, 6.83349,

20.0243482E-2 0.035252E-6 0.183683E-9 298.1500.65.0684 0.311592  
 3-260.0.230.0009327.174.75.0.0084 0.695 0.0717 0.108.0.  
 4252.8 4.19996 0.121820 0.0932636 0.284585E-3 -0.227.0  
 1 37.1 0.6HMETANU 6H 6H  
 16H 16.04 111.76 0.436 190.66 45.3 0.162 0.294 59765  
 21.24471E-2 2.8597E-6 -2.7031E-9 298.1500.166.452 2.13504 -160.  
 3-120. 0.0106345 0.535 0.42 0.012 0.873 0.1980 0.121.9 -161.6 21  
 4.1685 0.108614 0.533690 0.743855E-2 0.003.0  
 1 38.0 0.6HMETANU 6HL 6H  
 16H 32.04 337.86 0.792 513.16 78.7 0.272 0.222 5.9399  
 21.21514E-2 14.003F-6 -10.7783E-9 273.1000.18.0329 0.0362012 -30.  
 3 120. 0.0076241 2532.722 0.00895 995960 0.444594 0.7914 284  
 4.3 0.0 26.7711 0.0457302 1.01993 0.554025E-3 0.554 -1.  
 1 39.0 1.6HMUNOXI 6HDD DE 6HCARBON  
 16HD 28.01 81.16 0.814 134.16 35.0 0.301 0.294 6.93315  
 2-0.0672711E-2 2.78105E-6 -1.12407E-9 298.1500.7.01551 0.375582E  
 3-3 -170.30. 0 0 0.0166 0.758 0.1180 0.50.4 -19  
 42.0 16.9160 0.127496 1.05405 0.765726E-5 0.047.0  
 1 40.1 1.6HNITROU 6HEND 6H  
 16H 28.02 77.36 1.026 126.06 33.5 0.311 0.291 6.903  
 2-0.03753E-2 1.93E-6 -0.6861E-9 273.1800.0 0 0  
 3 0 0 0 0.1666 0.756 0.1180 0.49.4 -202.0  
 4 16.0905 0.128343 1.06858 0. 0.036.0  
 1 41.1 0.6HNOCTA 6HND 6H  
 16H 114.22 398.86 0.703 569.16 24.6 0.235 0.256 -1.45557  
 218.4159E-2 -100.202E-6 21.15E-9 298.1500.58.491495 8.220848E-2  
 3-25.35. 0.0194590 1921.853 0.0054 970982 0.394791 0.7025 86.8  
 4 25.0 26.6153 0.0465534 0.872597 2.7364E-4 0.398.0  
 1 42.0 0.6HOXIDO 6HDE ETI 6HLEND  
 16H 44.05 286.66 0.887 465.16 71.0 0.315 0.255 -1.12  
 24.925E-2 -23.89E-6 3.149E-9 273.1000.20.5217 0.0280213 -20.110.  
 3 0.0306295 1278.811 0.00862 830598 0.377235 0.138.6 13.0  
 435.0056 0.0709199 1.16763 0.302844E-3 0.204.2  
 1 43.0 1.6HOXIDO 6HNITRUS 6HO  
 16H 30.01 122.16 1.269 179.20 65.0 0.45 0.271 7.008  
 2-0.02244E-2 2.328E-6 -1.00F-9 273.1500.0 0 0  
 3 0 0 0 0.0179 0.78 0.1280 0.110.2 -151.7 0  
 4 0. 1.47313 0. 0.588.0  
 1 44.1 1.6HOXIGEN 6HO 6H  
 16H 32.00 90.16 1.14 154.36 49.7 0.43 0.292 6.21612  
 20.280765E-2 -0.559527E-6 -0.134308E-9 298.1500.10.847 -0.0280545  
 3 -220. -170. 1069941 415.292 0.0187 0.814 0.2600 0.52.0 -1  
 488.0 20.4727 0.131613 1.40242 -0.890709E-4 0.021.0  
 1 45.1 0.6HN=PENT 6HAND 6H  
 16H 72.15 309.46 0.621 470.36 33.0 0.244 0.269 -0.866195  
 211.6434E-2 -61.6297E-6 12.6705E-9 298.1500.38.123427 6.657065E-2  
 3 -100.25. 0.0164433 1509.566 0.00658 933137 0.400956 0.6262 87  
 4.5 25.0 26.3507 0.0555302 0.837116 2.3666E-4 0.254.0  
 1 46.1 0.6HPROPAN 6HO 6H  
 16H 44.09 230.96 0.656 369.96 42.0 0.22 0.277 -1.008568  
 27.31499E-2 -37.8885E-6 7.67782E-9 298.1500.29.0687 0.0869675 -90  
 3.60. 0.025411 967.019 0.0074 972358 0.329879 0.89.6 25.3695  
 4.0 0.680326 0.777976 0.551125E-3 0.147.0  
 1 47.0 0.6HPROPAN 6HDL 6H  
 16H 60.09 370.96 0.804 536.86 49.95 0.275 0.252 3.4948  
 26.4656E-2 -20.853E-6 -1.41786E-9 273.1000.30.9243 8.980635E-1  
 3-30.130. 0.0012013 4381.505 0.0095 1.04201 0.414630 0.7796 10  
 44.4 97.2 26.2180 0.0418077 0.987741 0.625103E-3 0.625 -1.  
 1 48.1 0.6HPRUPI 6HEND 6H  
 16H 42.08 225.16 0.682 365.46 45.0 0.233 0.27 0.89466

25.58925E-2, 27.4978E-0, 5.19139E-9, 298., 1500., 26.9049, 0.0875615, -90  
 3., 50., 0.0170940, 1057.569, 0.00781, 1.05843, 0.303275, 0, 104.6,  
 4-47.7, 26.8175, 0.0726748, 0.810066, 0.526E-3, 0.140, 0,  
 1 49, 0, 1, 6HSULFUR, 6HD DE H, 6HIDROGE,  
 16HND 34.08, 213.56, 1.1895, 373.56, 88.9, 0.286, 0.268, 7.07,  
 20.3128E-2, 1.364F-6, -0.7867E-9, 273., 1800., 0, 0, 0,  
 3, 0, 0.0704751, 760.1313116, 0.01166, 0.98819, 331, 0, 131.9, -61.4, 0  
 4, 0, 1.23429, 0., 0.092, 0,  
 1 50, 1, 0, 6HTETRAC, 6HLURURD, 6H DE CA,  
 16HRBOND 153.84, 349.96, 1.595, 556.26, 45.0, 0.5516, 0.272, 11.9687,  
 23.5273E-2, -31.5153E-6, 9.38767E-9, 273., 1000., 31.0757, 0.0663435, -100  
 3., 90., 0.0128122, 2495.660, 0.00902, 1.03729, 0.459008, 1.5969, 52.  
 41, 0, 0, 37.5200, 0.0724912, 1.99789, -0.276431E-3, 0.195, 3.,  
 1 51, 0, 0, 6HTOLUEN, 6HO, 6H,  
 16H 92.13, 383.96, 0.862, 593.76, 41.6, 0.2913, 0.271, -8.40576,  
 213.4513E-2, -83.5474E-0, 19.7259E-9, 298., 1500., 35.971059, 5.671464E-2  
 3, -85., 90., 0.0145693, 2160.751, 0.00639, 1.00759, 4.20767, 0.8669, 98.  
 46, 25.0, 32.4999, 0.0554103, 1.06300, 1.7767E-4, 0.262, 1.,  
 1 52, 0, 1, 6HTRIOXI, 6HDO DE 6HAZUFRE,  
 16H 80.06, 317.76, 1.923, 491.46, 83.6, 0.63, 0.262, 3.918, 3.483E-2,  
 2-26.75E-6, 7.744E-9, 273., 1300., 0, 0, 0, 0, 0,  
 3, 0, 0, 0, 0, 0, 0.118.5, 53.0, 44.6968  
 4, 0.0902733, 2.52293, 0., 0.424, 0.,  
 1 53, 0, 0, 6HO-XILE, 6HND, 6H,  
 16H 106.16, 417.16, 0.881, 632.16, 35.7, 0.2822, 0.254, -3.61137,  
 214.1598E-2, -81.5476E-6, 17.9934E-9, 298., 1500., 43.102992, 6.927902E-2  
 3, -20., 30., 0.0142549, 2362.268, 0.006, 990215, 0.422936, 0.8802, 97.8  
 4, 25.0, 31.3787, 0.0486702, 1.06095, 1.0520E-4, 0.301, 2.,  
 1 54, 0, 0, 6HN-XILE, 6HND, 6H,  
 16H 106.16, 412.46, 0.867, 619.16, 34.7, 0.2877, 0.258, -6.64779,  
 214.8843E-2, -87.5272E-6, 19.6529E-9, 298., 1500., 41.828929, 7.020691E-2  
 3, -40., 40., 0.0191253, 2019.553, 0.006, 990215, 0.422936, 0.8642, 96.0  
 4, 25.0, 31.5701, 0.0512629, 1.04739, 2.8782E-4, 0.313, 2.,  
 1 55, 1, 0, 6HP-XILE, 6HND, 6H,  
 16H 106.16, 411.66, 0.861, 618.16, 33.9, 0.2807, 0.252, -6.14622,  
 214.5476E-2, -83.4712E-6, 18.2531E-9, 298., 1500., 41.6731, 0.693357, 0.,  
 3190., 0.0191253, 2019.553, 0.006, 990215, 0.422936, 0.8611, 95.4, 25  
 4.0, 31.0247, 0.0507027, 1.04409, 0.102843E-3, 0.301, 2./  
 END

CONSTANTES DEL COMPONENTE PURO		1	2	3	4	5	6	7	8
M	Peso molecular.	X	X	X	X	X	X	X	X
Tc	Temperatura Crítica	X	X	X	X	X	X	X	X
Pc	Presión Crítica	X	X	X	X	X	X	X	X
Zc	Factor de compresibilidad crítico	X						X	X
W	Factor acéntrico.	X	X	X	X				X
$\rho_l$	Densidad del líquido a alguna condición.	X		X		X	X	X	X
S	Parámetro de solubilidad a 77 °F	X		X	X			X	X
V	Volumen molar del líquido a 25 °C y 1 atm.	X	X	X	X				
$\Delta H_f$	Calor de formación a 25 °C	X	X			X			
$\Delta G_f$	Energía libre de formación a 25 °C	X				X			
$S_f^0$	Entropía absoluta de formación a 25 °C	X				X			
Tb	Punto normal de ebullición a 1 atm.	X	X	X		X	X	X	X
$\Delta H_{vap}$	Calor de vaporización en el punto normal de ebullición.	X		X		X	X	X	
$\mu_{ij}$	Polaridad	X	X						X
$\epsilon_0/K$	Factor de Lenard-Jones dividido entre la Cte. de Boltzman.	X	X						
$\sigma$	Diámetro de Colisión.	X	X						
	Coefficientes para el Cp de gas ideal	X			X	X			X
	Coefficientes para el Cp de líquidos	X							X
K	Cte. de Equilibrio			X					
	Constantes para la Entalpia de gas ideal.			X					
Vc	Volumen crítico.				X				X
	Paracoro.				X	X			
Cp <sub>l</sub>	Cp de líquidos a 25 °C				X	X			
Tm	Temperatura de fusión.				X	X		X	
Td	Temperatura de descomposición.				X	X			
$\Delta H_{fus}$	Calor de Fusión.				X	X			
	Constantes en la correlación de presión de vapor					X			
	Fórmula química.							X	X
sgf.	Densidad relativa a alguna condición							X	X
	Ctes de la ecuación de Andrade.							X	X
	Valores para la Ec. de Sutherland.							X	X
$\Delta H_v$	Calor de vaporización a alguna condición								X
DI	Cte. para densidad de líquidos.								X
H	Factor de hidrancia en la Ec. de Robbins-Kingree.								X

X.- Constante Incluida en el banco de Datos.

Constantes de Componentes puros usadas en Bancos de Datos de diferentes sistemas de estimación de propiedades.

- |                     |                        |
|---------------------|------------------------|
| 1.- Sistema GECEC   | 5.- Sistema HALCON     |
| 2.- Sistema CHEVRON | 6.- Sistema FLOWTRAN   |
| 3.- Sistema NGPAK'H | 7.- SISTEMA JUSE-AESOP |
| 4.- SISTEMA CHESS   | 8.- Sistema JOR-PROP   |

### 3.9.- COMO HACER MODIFICACIONES AL SISTEMA

Formas de efectuar modificaciones, reemplazamiento de métodos de estimación, adición de nuevas subrutinas, compuestos, parámetros en el banco de datos.

#### A) Adiciones en el Banco de Datos.

Antes de definir las instrucciones para efectuar los cambios en la estructura del programa debemos hacer las siguientes declaraciones:

N = Número de parámetros para cada sustancia incluida en el banco de datos = 38

M = Número de compuestos diferentes disponibles en el banco de datos = 55

NPA = Número de parámetros que se van a adicionar.

NCA = Número de compuestos que se van a agregar.

#### a.- C o m p u e s t o s.-

1.a.- Se deben perforar las constantes que se tienen para el compuesto que se trate, en caso de no disponer de algunas perfórese 0 (cero), en el orden riguroso descrito en la sección correspondiente al Banco de Datos; se deben anejar en el sitio apropiado de acuerdo al orden alfabético.

2.a.- Ampliar los arreglos puestos en COMMON por lo que se refiere al número de compuestos. Hacerlo en todas las tarjetas donde aparezcan estas declaraciones:

En COMMON/AUX/ARR(N,M) se cambia a COMMON/AUX/ARR(N,M+NCA)

En COMMON/CONS/VAL(M,N) se cambia por COMMON/CONS/VAL -- (M+NCA,N)

3.a.- En la parte correspondiente a la inversión de la matriz, en el programa principal, alterar la especificación de iteración DO 40 I=1,M por DO 40 I=1,M+NCA.

4.a.- En el subprograma SELEC(ANOM,INDEX) aumentar la proposición DO 10 I=1, M por DO 10 I=1,M+NCA.

b.- C o n s t a n t e s.-

1.b.- Perfórense éstas después de la última "coma" de cada uno de los renglones de la matriz fijándose que el parámetro en cuestión corresponde exactamente al compuesto apropiado. Si para algún material no se encontró póngase en su lugar un 0 (cero).

2.b.- Aumentar el campo de los arreglos localizados en COMMON, referido al número de constantes. Debe efectuarse en todas y cada una de las tarjetas donde se encuentre esta especificación:

Para COMMON/AUX/ARR(N,M) queda finalmente COMMON/AUX/ARR(N+NPA,M). Para COMMON/CONS/VAL(M,N) tenemos ahora COMMON/CONS/VAL(M,N+NPA).

3.b.- En el programa principal se amplía la proposición de interacción para la inversión del arreglo: DO 40 J=1,N por DO 40 J=1,N+NPA.

4.b.- Hacer referencia de esos nuevos parámetros en las subrutinas que los ocupen:

Por ejemplo: XX=VAL(INDEX,39) para el caso de compuestos puros, y XX(1)=VAL(INDICE(1), 39) si se desea incorporar en mezclas.

B) Implementación de nuevas propiedades.-

Todo lo que pueda hacerse para incorporarla al sistema está determinado por la propiedad misma, en cuanto que puede describir cierto comportamiento referente a mezclas o a compuestos puros, así, podemos decir que para incluir la estimación de fugacidades o coeficientes de actividad nece



sariamente deben verse tratadas en los subprogramas que seleccionan las -- opciones de las mezclas, o, si se trata de materiales puros agregarlas en las subrutinas que manipulen las propiedades para estas sustancias, podría ser el caso de la entropía, energía libre, etc.

En resumen, tenemos tres caminos a seguir:

- 1.- Introducir la nueva propiedad en la sección que manipula compuestos puros (SELECP, TABLA, GRAFIC).
- 2.- Introducir la nueva propiedad en la sección que maneja mezclas (SELECM, TABLAM, GRAFIM).
- 3.- En ambos departamentos.

Estos caminos se describen a continuación:

1.- Dentro de los programas secundarios SELECP y TABLA se agranda la dimensión del vector AUX e iteración 1000 para el primero, en el caso - del segundo subprograma se aumenta el rango de los vectores OPT y OPTP así como a las iteraciones 3000 y 4000, todo esto de acuerdo al número de propiedades adicionadas, además a la proposición DATA se le añaden las primeras 6 (seis) letras del nombre más común de la propiedad después de la que hasta ese momento era la última.

Se insertan las tarjetas específicas para la escritura de resultados después de la sección TODAS en la forma siguiente:

- a) El número que se le señala dentro del DATA se perfora como etiqueta de la proposición que ordena la llamada de la subrutina - que efectúa los cálculos necesarios para su estimación, las órdenes de impresión y los formatos apropiados para escribir encabezados y las cantidades evaluadas.
- b) Para incluir la nueva propiedad dentro de la opción TODAS se -- adiciona la llamada respectiva, su inicial en el WRITE y finalmente se indica el encabezado adecuado.

c) Para la TABLA se perforan las tarjetas que efectúen los incrementos, la proposición lógica que compara sucesivamente los valores que se van teniendo de presión o temperatura, encabezados, orden de cálculo de la propiedad y los formatos para su escritura.

2.- Para las mezclas se sigue el mismo procedimiento, excepto que la forma TODAS no existe dentro del programa secundario TABLAM.

3.- En este caso se observan todas las indicaciones formuladas para los casos anteriores.

C) Adición de otras técnicas de cálculo para una propiedad ya existente.-

Estas se harán con el objeto de mejorar los resultados obtenidos para ciertos compuestos o para determinados intervalos de presión y temperatura. Pueden ser incluidas dentro del subprograma ya establecido o en una subrutina adicional. Si se incorpora de la primera forma debe efectuarse una selección de los compuestos a los que es aplicable, de esta manera puede añadirse en el banco de datos una contraseña que identifique a los materiales en cuestión, así como la proposición lógica correspondiente dentro de la subrutina. Ahora bien, si se elabora otro subprograma es necesario clasificar la nueva opción en el lugar apropiado: SELECP, SELECM, TABLA, TABLAM, etc., siguiendo el mismo procedimiento que se describió para implementar la estimación de nuevas propiedades

D) Introducción de nuevas opciones de salida (Formas de presentación).

Se refiere este punto a cambios en las órdenes de escritura, así, pueden implantarse otras formas de generar tablas, juegos para el cálculo de determinados grupos de propiedades, otros encabezados, diferentes maneras de distribución en la escritura de las cantidades, etc. Para llevarse a cabo lo anterior se deben indicar esas nuevas opciones dentro de las secciones del programa adecuadas, como lo son: el programa principal, subrutinas SELECP, SELECM, TABLA y TABLAM. Básicamente las modificaciones deben-

hacerse en los formatos de salida.

- E) Obtención de propiedades de compuestos que no están dentro del banco de datos.-

En esencia, el programa debe ser modificado desde su estructura -- original, para abarcar esta modalidad es necesario llevar a cabo el proceso siguiente:

- 1.- Proporcionar las órdenes de lectura de los parámetros particulares del compuesto, incorporar la nueva opción dentro de las ya existentes, declarar en COMMON todas y cada una de las constantes que van a ser leídas y colocarlas en los subprogramas -- respectivos (propiedades a evaluarse).
- 2.- Insertar las proposiciones lógicas que determinan la ruta a seguir dentro del programa principal y las subrutinas de tal forma que se eviten todas las declaraciones que lleven involucrada alguna referencia del banco de datos. También deben formularse órdenes para la escritura de encabezados de la nueva opción.

Estas son las modificaciones más frecuentes que se le pueden hacer a un programa de esta naturaleza, pero hay infinidad de formas adicionales que sería imposible cubrir en este trabajo. Claro, que las instrucciones que se han dado pueden efectuarse de varias maneras, tal vez mejores, pero la intención que nosotros quisimos comunicar a las personas interesadas en la actualización del sistema es la de que éste es un campo abierto para futuras estructuraciones de métodos de estimación no sólo de las propiedades físicas de los materiales, sino para la simulación de procesos químicos y fisicoquímicos. De esta forma tratamos de motivar a la gente que sienta -- deseos de agilizar los procedimientos de cálculo hacia metas mucho más amplias y positivas y hagan posible el progreso de la Ingeniería Química en todas sus actividades, principalmente.

# C A P I T U L O      I V

---

## Estructura de Datos y Resultados.

- 4.1.- Generalidades.
- 4.2.- Compuestos puros.
  - a.- Nomenclatura.
  - b.- A una presión y temperatura dadas.
  - c.- Generación de tablas por variación de presión y temperatura.
  - d.- Generación de gráficas por variación de presión y temperatura.
- 4.3.- Mezclas.
  - 4.3.a.- A una presión y temperatura dadas
  - 4.3.b.- Generación de tablas por variación de temperatura
  - 4.3.c.- Generación de tablas por variación de presión
  - 4.3.d.- Generación de gráficas por variación de presión y -- temperatura.

## ESTRUCTURA DE DATOS Y RESULTADOS.

### 4.1.- GENERALIDADES

En este capítulo se dará a conocer la entrada y salida de datos del programa. Para lograr tal objetivo se describirá primero al componente puro y sus opciones de generación de tablas y gráficas. Como paso seguido se describirán las mezclas y su generación de tablas y gráficas.

Antes de iniciar con detalle el tipo de perforación, las columnas--empleadas por cada dato y el número de tarjetas necesarias, se desarrollará la nomenclatura existente en el programa.

### 4.2.- ESTRUCTURA DE DATOS DEL COMPONENTE PURO

4.2.a.- EL USUARIO PARA PODER EMPLEAR EL SISTEMA NECESITA DAR LA - SIGUIENTE INFORMACION EN TARJETAS PERFORADAS:

PRIMERA TARJETA.- Debe proporcionar: PROP, COND, NCOMP de la siguiente forma:

I).- PROP = Propiedad a calcular. Se hace la aclaración que el sistema sólo tiene opción para una de ellas o todas juntas. Ellas son:

CAPACIDAD CALORIFICA  
CALOR LATENTE DE VAPORIZACION  
CONDUCTIVIDAD TERMICA  
DENSIDAD  
DIFUSION  
ENTALPIA  
PRESION DE VAPOR  
TENSION SUPERFICIAL  
VISCOSIDAD  
TODAS

II).- COND = Método de cálculo a efectuar. Consta de los siguientes

caracteres:

PURO = componente puro a T y P dadas

MEZCLA = propiedad de la mezcla a T, P y X dadas.

TTPURO = Generación de Tabla a una presión dada y variando la Temperatura del componente puro.

TPPURO = generación de Tabla a una temperatura dada y variando la Presión del componente Puro

GTPURO = generación de Gráfica a una presión dada y variando la Temperatura del componente Puro.

GPPURO = generación de Gráfica a una temperatura dada y variando la Presión del componente Puro.

III).- NCOMP = Número de componentes presentes en el cálculo.

Para puros equivale a = 01

Para mezclas equivale a = de 02 a 10 máximo.

SEGUNDA TARJETA.- Debe proporcionar: T, P, TRE, OU que significa:

IV).- T = Temperatura de trabajo ( °K, °C, °F )

V).- P = Presión de trabajo ( Atmósferas, mm de Hg, pies de agua, pulg. de Hg., libras por pulgada cuadrada, libras por pie cuadrado, y Kilogramo por centímetro cuadrado)

VI).- TRE = Temperatura de referencia ( °K, °C, °F )

VII).- OU = Opción de unidades y consta de los siguientes:

- KMMHG = °K y mm de Hg

KPIEAG = °K y pies de agua

KKG/CM = °K y kilogramo por centímetro cuadrado

KPSIA = °K y libras por pulgada cuadrada absolutas

KLB/PI = °K y libra por pie cuadrado

KPULHG = °K y pulgadas de mercurio

CATM = °C y atmósferas  
 CMMHG = °C y mm de Hg  
 CPIEHG = °C y pies de mercurio  
 CKG/CM = °C y kilogramo por centímetro cuadrado  
 CPSIA = °C y libra por pulgada cuadrada absoluta  
 CLB/PI = °C y libra por pie cuadrado  
 CPULHG = °C y pulgada de mercurio  
 FATM = °F y atmósferas  
 FMMHG = °F y mm de mercurio  
 FPIEAG = °F y pies de agua  
 FKG/CM = °F y kilogramo por centímetro cuadrado  
 FPSIA = °F y libra por pulgada cuadrada absoluta  
 FLB/PI = °F y libra por pie cuadrado  
 FPULHG = °F y pulgadas de mercurio

TERCERA TARJETA.- Debe proporcionar: ANOM donde:

VIII).- ANOM = Nombre del compuesto. La lista de los 55 compues--  
tos que puede manejar es la siguiente:

ACETALDEHIDO	CLOROBENCENO	n-OCATNO
ACETILENO	CLOROFORMO	OXIDO DE ETILENO
ACETONA	CLORURO DE HIDROGENO	OXIDO NITROSO
ACIDO ACETICO	DIOXIDO DE AZUFRE	OXIGENO
AIRE	DIOXIDO DE NITROGENO	n-PENTANO
AMONIACO	DISULFURO DE CARBONO	PROPANO
ANILINA	n-DODECANO	PROPANOL
ARGON	ESTIRENO	PROPILENO
BENCENO	ETANO	SULFURO DE HIDROGENO
BIOXIDO DE CARBONO	ETANOL	TETRACLORURO DE CARBONO
BROMO	ETER ETILICO	TOLUENO

I-3 BUTADIENO	ETILENO	TRIOXIDO DE AZUFRE
n-BUTANO	FORMALDEHIDO	o-XILENO
ISOBUTANO	n-HEXANO	m-XILENO
n-BUTANOL	n-HEPATANO	p-XILENO
ISOBUTANOL	HIDROGENO	
I-BUTENO	METANO	
CICLOHEXANO	METANGL	
CICLOPENTANO	MONOXIDO DE CARBONO	
CLORO	NITROGENO	

CUARTA TARJETA.- Debe proporcionar: TF, TINC ó PF, PINC ambos para generación de tabla o gráfica en función de la -- temperatura o presión respectivamente, así:

IX).- TF = Temperatura final de cálculo ( °K, °C, °F )

X).- TINC = Incremento de temperatura

XI).- PF = Presión final (Atmósferas, mm de Hg, pies de agua, pulgadas de Hg., libras por pulgada cuadrada absoluta, libras por pie cuadrado, kilogramo por centímetro cuadrado).

XII).- PINC = Incremento de presión.

4.2.b.- ESTRUCTURA DE DATOS PARA EL COMPUESTO PURO A UNA PRESION Y TEMPERATURA DADAS.

PRIMERA TARJETA.- Contiene tres datos distribuidos en la siguiente forma:

a).- Propiedad que se desea calcular (PROP) perforada a partir de la columna 1 hasta la 29 (inclusive) según la nomenclatura dada en el inciso-- (1).

NOTA: No es posible calcular 2, 3, 4, etc propiedades a la vez. Sólo una o todas juntas. La máquina considera únicamente las 6 primeras columnas de la propiedad las demás las toma como blancos.



- b).- Se perfora a partir de la columna 30 hasta la 36-  
la palabra: PURO
- c) Es para determinar el tipo de cálculo que va efectuar la máquina (COND).
- c).- Como tercer dato se perfora a partir de la columna 40 hasta la 72 el número de componentes, en este caso sería: 01  
Ya que se trata sólo del componente puro (NCOMP)

SEGUNDA TARJETA.-SE PERFORAN CUATRO DATOS EN EL ORDEN SIGUIENTE:

- 1a).- Temperatura de trabajo-----10 columnas(de la 1 a la 10).
- 2a).- Presión de trabajo-----10 columnas(de la 11 a la 20).
- 3a).- Temperatura de referencia-----10 columnas(de la 21 a la 30).
- 4a).- Opción de unidades----- 6 columnas(de la 31 a la 36).

NOTA: Se perforan como números reales (9 dígitos y el punto decimal)  
Para la opción de unidades se perforan 6 columnas con letras como se indica en el inciso (VII) de la nomenclatura inicial.

TERCERA TARJETA.- Aquí únicamente se perfora el nombre del compuesto a partir de la columna 1 y en la forma como se indica en el inciso (VIII) de la nomenclatura inicial (lista de 55 compuestos).

Ejemplo de datos para calcular todas las propiedades incluidas en el sistema de un compuesto puro a una temperatura y presión dadas:

Tarjeta 1.-

Columna 1: Propiedad.- TODAS

Columna 30: Tipo de cálculo.- PURO

Columna 40: Número de compuestos.- 01

Tarjeta 2.-

Columna 1: Temperatura de cálculo.- 120.0 °C

Columna 11: Presión de cálculo.- 14.7 PSIA

Columna 21: Temperatura de referencia.- 0.0 °C

Columna 31: Unidades de Temperatura y Presión.- CPSIA

Tarjeta 3.-

Columna 1: Nombre del compuesto.- TOLUENO



CONSTANTES FISICAS

COMPUESTO.	TOLUENO
CLAVE	51
ESTADO FISICO	GAS
PESO MOLECULAR	92.13
TEMP. NORMAL DE EBULLICION K	383.96
DENSIDAD RELATIVA A 25 C G/CC	0.8620
TEMPERATURA CRITICA K	593.76
PRESION CRITICA ATM	41.60
DENSIDAD CRITICA G/CC	0.2913
FACTOR COMP. CRITICO	0.271
FACTOR ACENTRICO	0.262

CONSTANTES DEL CP GASEOSO

A	-8.405760
B	.134513E+00
C	-.835474E-04
D	.197259E-07
LIMITE INFERIOR TEMP. K	298.0
LIMITE SUPERIOR TEMP. K	1500.0

CONSTANTES DEL CP LIQUIDO

A	35.971
B	.567146E-01
C	.177670E-03
LIMITE INFERIOR TEMP. K	-85.0
LIMITE SUPERIOR TEMP. K	90.0

TEMPERATURA DE CALCULO K	393.00
PRESION DE CALCULO ATM	1.00
TEMPERATURA DE REFERENCIA K	273.00

ENTALPIA: LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MENOR QUE 0.9 Y  
NO SE INCLUYO LA CORRECCION POR PRESION A ESTAS CONDICIONES

CAPACIDAD CALORIFICA A P=CTE CAL/G-MOL-K	.327589E+02
CALOR LATENTE DE VAPORIZACION BTU/LB	.790850E+04
ENTALPIA CAL/G-MOL	.333292E+04
DENSIDAD LB/PIE3	.183558E+00
VISCOSIDAD CENTIPOISES	.766903E-02
CONDUCTIVIDAD TERMICA BTU/HR-PIE2-F/PIE	.710870E-02
PRESION DE VAPOR MMHG	.923438E+03
TENSION SUPERFICIAL DINAS/CM	.172350E+02

4.2.c.- ESTRUCTURA DE DATOS DEL COMPUESTO PURO PARA LA GENERACION DE TABLA A UNA PRESION DADA Y VARIANDO LA TEMPERATURA.

PRIMERA TARJETA.- Contiene tres datos distribuidos en la siguiente forma:

- a).- Propiedad que se desea calcular (igual forma que en el caso del componente puro a T y P dadas).
- b).- El segundo dato se perfora a partir de la columna 30 hasta la 39 (inclusive) con la palabra --- TTPRUO
- c).- Se perfora el número de componentes (igual que-- el primer caso)

NOTA: La única diferencia con el caso anterior es el segundo dato.

SEGUNDA TARJETA.- Se perforan 4 datos en igual forma que en el primer caso ( a T y P dadas).

TERCERA TARJETA.- Se perforan el nombre del compuesto (igual que - el primer caso)

CUARTA TARJETA.- Se perforan dos datos equivalentes a:

- 1a).- Temperatura final de cálculo-----10 columnas(de la I a la 10 inclusive).
- 2a).- Incremento de temperatura-----10 columnas(de la 11 a la 20 inclusive).

NOTA: Se perforan como números reales ( dígitos y el punto decimal)

OBSERVACION.- Esta opción es diferente de la primera únicamente -- por el segundo dato de la primera tarjeta y en una - cuarta tarjeta.

Ejemplo de datos para generar una tabla debido al incremento de --  
temperatura para evaluar la viscosidad de un compuesto puro:

Tarjeta 1.-

Columna 1.- Propiedad.-	VISCOSIDAD
Columna 30.- Tipo de cálculo.-	TTPURO
Columna 40.- Número de Compuestos.-	01

Tarjeta 2.-

Columna 1.- Temp. inicial de cálculo.-	32.0
Columna 11.- Presión de cálculo.-	760.0
Columna 21.- Temp. de Referencia.-	32.0
Columna 31.- Unidades de Temp. y presión.-	FMMHG

Tarjeta 3.-

Columna 1.- Nombre del compuesto.-	BENCENO
------------------------------------	---------

Tarjeta 4.-

Columna 1.- Temperatura final de cálculo.-	180.0
Columna 11.- Incremento de temperatura.-	2.0

180.0 2.0

BENCENO

32.0 760.0 32.0 FMMHG

VISCOSIDAD

TTPURO 01

1		2		3		4		5		6		7		8		9		0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3
SERVICE BUREAU																			
IBM DE MEXICO, S. A.																			
4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4
5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6
7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7
8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8
9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

CONSTANTES FISICAS

COMPUESTO.	BENCENO
CLAVE	9
ESTADO FISICO	LIQ
PESO MOLECULAR	78.11
TEMP. NORMAL DE EBULLICION K	353.26
DENSIDAD RELATIVA A 25 C G/CC	0.8740
TEMPERATURA CRITICA K	561.66
PRESION CRITICA ATM	47.70
DENSIDAD CRITICA G/CC	0.3040
FACTOR COMP. CRITICO	0.274
FACTOR ACENTRICO	0.215

CONSTANTES DEL CP GASEOSO

A	-9.072600
B	.117135E+00
C	-.767622E-04
D	.189559E-07
LIMITE INFERIOR TEMP. K	298.0
LIMITE SUPERIOR TEMP. K	1500.0

CONSTANTES DEL CP LIQUIDO

A	31.265
B	.477089E-01
C	.901900E-04
LIMITE INFERIOR TEMP. K	10.0
LIMITE SUPERIOR TEMP. K	65.0

TEMPERATURA DE CALCULO K	273.00
PRESION DE CALCULO ATM	1.00
TEMPERATURA DE REFERENCIA K	273.00

GENERACION DE TABLA  
\*\*\*\*\* \*\* \*\*\*\*\*

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

TEMPERATURA-K VISCOSIDAD-CENTIPOISES

273.00	.901083E+00
274.11	.883920E+00
275.22	.867219E+00
276.33	.850964E+00
277.44	.835140E+00
278.56	.819733E+00
279.67	.804729E+00
280.78	.790115E+00
281.89	.775879E+00
283.00	.762009E+00



284.11	.748491E+00
285.22	.735317E+00
286.33	.722473E+00
287.44	.709951E+00
288.56	.697739E+00
289.67	.685829E+00
290.78	.674211E+00
291.89	.662876E+00
293.00	.651815E+00
294.11	.641021E+00
295.22	.630484E+00
296.33	.620198E+00
297.44	.610154E+00
298.56	.600347E+00
299.67	.590767E+00
300.78	.581410E+00
301.89	.572268E+00
303.00	.563335E+00
304.11	.554606E+00
305.22	.546074E+00
306.33	.537733E+00
307.44	.529579E+00
308.56	.521606E+00
309.67	.513809E+00
310.78	.506183E+00
311.89	.498724E+00
313.00	.491426E+00
314.11	.484285E+00
315.22	.477297E+00
316.33	.470459E+00
317.44	.463765E+00
318.56	.457212E+00
319.67	.450796E+00
320.78	.444513E+00
321.89	.438361E+00
323.00	.432336E+00
324.11	.426433E+00
325.22	.420651E+00
326.33	.414986E+00
327.44	.409434E+00
328.56	.403994E+00
329.67	.398662E+00
330.78	.393436E+00
331.89	.388312E+00
333.00	.383288E+00
334.11	.378363E+00
335.22	.373532E+00
336.33	.368795E+00
337.44	.364148E+00
338.56	.359590E+00
339.67	.355118E+00
340.78	.350730E+00
341.89	.346425E+00
343.00	.342200E+00
344.11	.338053E+00
345.22	.333982E+00
346.33	.329987E+00
347.44	.326064E+00
348.56	.322212E+00
349.67	.318430E+00

350.78	.314716E+00
351.89	.311068E+00
353.00	.307485E+00
354.11	.303965E+00
355.22	.300508E+00
356.33	.297110E+00

ESTRUCTURA DE DATOS DEL COMPONENTE PURO PARA LA GENERACION DE TABLA A UNA TEMPERATURA DADA Y VARIANDO LA PRESION.

PRIMERA TARJETA.- Contiene tres datos distribuidos en la siguiente forma:

- a).- Propiedad que se desea calcular (en igual forma que en el primer caso).
- b).- El segundo dato se perfora a partir de la columna 30 a 36 con la palabra: TPPURO
- c).- Se perfora el número de componentes (igual que en el primer caso).

NOTA: La única diferencia con el primer caso es el segundo dato.

SEGUNDA TARJETA.- Se perforan 4 datos en igual forma que el primer caso. (a T y P dadas)

TERCERA TARJETA.- Se perfora el nombre del compuesto (igual que el primer caso).

CUARTA TARJETA.- Se perforan dos datos de la siguiente forma:

- 1a).- Presión final de cálculo-----10 columnas(de la I a la 10-inclusive).
- 2a).- Incremento de presión-----10 columnas(de la 11 a la 20 inclusive).

NOTA: Se perforan como números reales (9 dígitos y punto decimal).

LAS UNIDADES DEBEN SER IGUALES A LAS DE LA SEGUNDA TARJETA.

OBSERVACION.- Está opción cambia de la primera únicamente en el -- segundo dato de la primera tarjeta y en la cuarta -- tarjeta.

Ejemplo de datos para generar una tabla debido al incremento de presión para evaluar la densidad de un compuesto puro.

Tarjeta 1.-

Columnas 1: Propiedad.-	DENSIDAD
Columna 30: Tipo de cálculo.-	TPPURO
Columna 40: Número de compuestos.-	01

Tarjeta 2.-

Columna 1: Temperatura de cálculo.-	298.0 °K
Columna 11: Presión Inicial de Cálculo.-	1.033 Kg/cm <sup>2</sup>
Columna 21: Temperatura de Referencia.-	273.0 °K
Columna 31: Unidades de Temp. y Presión.-	KKG/CM

Tarjeta 3.-

Columna 1: Nombre del compuesto.-	METANO
-----------------------------------	--------

Tarjeta 4.-

Columna 1: Presión final de cálculo.-	500.0 Kg/cm <sup>2</sup>
Columna 11: Incremento de Presión.-	5



CONSTANTES FISICAS

COMPUESTO.	METANO
CLAVE	37
ESTADO FISICO	GAS
PESO MOLECULAR	16.04
TEMP. NORMAL DE EBULLICION K	111.76
DENSIDAD RELATIVA A 25 C G/CC	0.4360
TEMPERATURA CRITICA K	190.66
PRESION CRITICA ATM	45.30
DENSIDAD CRITICA G/CC	0.1620
FACTOR COMP. CRITICO	0.290
FACTOR ACENTRICO	0.003

CONSTANTES DEL CP GASEOSO

A	4.597650
B	.124471E-01
C	.285970E-05
D	-.270310E-08
LIMITE INFERIOR TEMP. K	298.0
LIMITE SUPERIOR TEMP. K	1500.0

CONSTANTES DEL CP LIQUIDO

A	166.452
B	.213504E+01
C	.743855E-02
LIMITE INFERIOR TEMP. K	-160.0
LIMITE SUPERIOR TEMP. K	-120.0

TEMPERATURA DE CALCULO K	298.00
PRESION DE CALCULO ATM	1.00
TEMPERATURA DE REFERENCIA K	273.00

GENERACION DE TABLA POR VARIACION DE PRESION

PRESION INICIAL-ATM = 1.00  
 PRESION FINAL-ATM = 484.03  
 INCREMENTO DE PRESION-ATM = 4.84  
 TEMPERATURA DE CALCULO-K = 298.00

PRESION-ATM                      DENSIDAD-LB/PIE<sup>3</sup>

1.00	.408607E-01
5.84	.241036E+00
10.68	.440776E+00
15.52	.647040E+00
20.36	.857575E+00
25.20	.107257E+01
30.04	.129223E+01
34.88	.151682E+01
39.72	.174660E+01
44.56	.196057E+01
49.40	.219885E+01

54.24	.244322E+01
59.08	.269404E+01
63.92	.291869E+01
68.76	.318008E+01
73.60	.344880E+01
78.44	.368234E+01
83.28	.396264E+01
88.12	.420119E+01
92.97	.440781E+01
97.81	.463653E+01
102.65	.492237E+01
107.49	.515387E+01
112.33	.538552E+01
117.17	.568409E+01
122.01	.591904E+01
126.85	.615439E+01
131.69	.639026E+01
136.53	.670642E+01
141.37	.694654E+01
146.21	.718754E+01
151.05	.742955E+01
155.89	.767270E+01
160.73	.791713E+01
165.57	.816295E+01
170.41	.841025E+01
175.25	.865912E+01
180.09	.880298E+01
184.93	.905180E+01
189.77	.930200E+01
194.61	.955337E+01
199.45	.968904E+01
204.29	.993860E+01
209.13	.101882E+02
213.97	.103142E+02
218.81	.105593E+02
223.65	.108030E+02
228.49	.109159E+02
233.33	.111530E+02
238.17	.112563E+02
243.01	.114865E+02
247.85	.117146E+02
252.69	.118042E+02
257.53	.120260E+02
262.37	.121077E+02
267.21	.123237E+02
272.06	.123983E+02
276.90	.126091E+02
281.74	.126774E+02
286.58	.128834E+02
291.42	.129457E+02
296.26	.130056E+02
301.10	.132034E+02
305.94	.132577E+02
310.78	.134507E+02
315.62	.134997E+02
320.46	.136883E+02
325.30	.137324E+02
330.14	.137751E+02
334.98	.139573E+02
339.82	.139965E+02

344.66	.141761E+02
349.50	.142128E+02
354.34	.142493E+02
359.18	.144265E+02
364.02	.144628E+02
368.86	.146413E+02
373.70	.146793E+02
378.54	.147193E+02
383.38	.149016E+02
388.22	.149445E+02
393.06	.149890E+02
397.90	.151753E+02
402.74	.152214E+02
407.58	.152679E+02
412.42	.154547E+02
417.26	.154996E+02
422.10	.156845E+02
426.94	.157254E+02
431.78	.157643E+02
436.62	.159424E+02
441.46	.159766E+02
446.30	.160095E+02
451.15	.161825E+02
455.99	.162132E+02
460.83	.162437E+02
465.67	.164145E+02
470.51	.164440E+02
475.35	.164734E+02
480.19	.166428E+02
485.03	.166710E+02



#### 4.2.d.- GENERACION DE GRAFICAS DE ALGUNA PROPIEDAD DE UN COMPUESTO PURO VARIANDO LA TEMPERATURA DE OPERACION.

##### 1.- PRIMERA TARJETA.

- a).- El primer dato de esta tarjeta es la propiedad que va a calcularse, ya que no se puede hacer la gráfica de todas las propiedades a la vez. Este dato se perfora de la columna 1 en adelante.
- b).- Enseguida se perfora el tipo de cálculo, en este caso: GTPURO de la columna 30 en adelante.
- c).- El último dato es el número de compuestos puros, en este caso es 01 perforado de esta manera de la columna 40 en adelante.

##### 2.- SEGUNDA TARJETA.

- a).- Temperatura inicial de cálculo, perforada de la columna 1 a la 10.
- b).- Presión a la cual se va a evaluar la propiedad, perforado de la columna 11 a la 20.
- c).- Temperatura de referencia para calcular la entalpia. Este dato se debe escribir siempre, aún cuando no se deseé evaluar dicha propiedad. Se perfora este dato de la columna 21 a la 30.
- d).- Finalmente, de la columna 31 a la 36 se perfora el sistema de unidades de temperatura y presión según se describe en el capítulo 3.

##### 3.- TERCERA TARJETA.

En esta tarjeta se deberá perforar el nombre de alguno de los compuestos incluidos en el banco de datos de la columna 1 en adelante.

##### 4.- CUARTA TARJETA.

- a).- El primer dato es la temperatura final de cálculo perforado de la columna 1 a la 10

- b).- Por último se perfora de la columna 11 a la 20 el incremento de temperatura. Tanto el dato anterior como este deberán estar en las mismas unidades usadas en la tarjeta dos.

GENERACION DE GRAFICAS DE ALGUNA PROPIEDAD DE UN COMPUESTO PURO VA  
RIANDO LA PRESION DE OPERACION.

1.- PRIMERA TARJETA.

- a).- El primer dato es el nombre de la propiedad que va a calcularse perforado de la columna 1 en adelante. No se puede hacer la gráfica de todas las propiedades a la vez.
- b).- Tipo de cálculo, en este caso GPPURO perforado de la columna-30 en adelante.
- c).- Número de compuestos, en este caso 01 perforado de la columna 40 en adelante.

2.- SEGUNDA TARJETA.

- a).- Temperatura de cálculo, perforada de la columna 1 a la 10.
- b).- Presión inicial de cálculo perforada de la columna 11 a la 20
- c).- Temperatura de referencia para calcular la entalpia perforado (aunque no sea necesaria) de la columna 21 a la 30.
- d).- Unidades de temperatura y presión según se describe en el capítulo 3. Perforado de la columna 31 a la 36.

3.- TERCERA TARJETA.

Nombre del compuesto, perforado de la columna 1 en adelante.

4.- CUARTA TARJETA.

- a).- Presión final de cálculo perforado de la columna 1 a la 10. --  
En las mismas unidades que en la tarjeta dos.
- b).- Incremento de presión, perforado de la columna 11 a la 20.

#### 4.3.- MEZCLAS DE COMPUESTOS

##### 4.3.a.- DATOS PARA EVALUAR ALGUNA PROPIEDAD DE UNA MEZCLA DE COMPUESTOS A UNA TEMPERATURA Y PRESION.

1.- Primera tarjeta de datos: En esta tarjeta se perforan los siguientes datos:

a).- Propiedad deseada.

Las propiedades que se pueden calcular para mezclas de compuestos son:

Capacidad Calorífica	Viscosidad
Densidad	Difusión
Entalpia	Conductividad Térmica.

ó TODAS (Las 6 propiedades anteriores).

Dichas propiedades tienen un campo disponible en la tarjeta de 6 columnas, las restantes son ignoradas por la computadora por ejemplo:

CONDUCTividad Térmica.

b).- Tipo de cálculo:

Las diferentes maneras de evaluar una propiedad de mezclas es:

MEZCLA (A una Presión y Temperatura)  
TTMEZC (Tabla de valores de una propiedad por incremento de Tem.)  
TPMEZC (Tabla de valores de una propiedad por incremento de Presión)  
GTMEZC (Gráfica de valores de una propiedad Vs. Temperatura.)  
GPMEZC (Gráfica de valores de una propiedad VS. Presión.)

En este caso debemos perforar MEZCLA a partir de la columna 30.

c).- Número de componentes de la mezcla:

La cantidad de compuestos que pueden formar la mezcla es de-

10 como máximo, escogidos de entre los que se incluyeron en el banco de datos (ver Cap. 1); este dato se perfora a partir de la columna 40.

2.- Segunda tarjeta. Consta de los siguientes datos:

a).- Temperatura a la cual se va a calcular la propiedad de la mezcla, se perfora este valor de la columna 1 a la 10.

b).- Presión de cálculo, perforada de la columna 11 a la 20.

c).- Temperatura de referencia para calcular la Entalpia de la mezcla con un campo para su escritura comprendido entre las columnas 21 y 30. Este dato deberá perforarse siempre (aunque no se quiera calcular la entalpia) ya que de otra manera la computadora marcará un error en la escritura de los datos.

d).- Unidades de los tres datos anteriores.

Las dos temperaturas (T y TRE) deben ir en las mismas unidades, las combinaciones de unidades de presión y temperatura incluidas en el programa son 20 (Ver Cap. 3, Subrutina SIDEU) para su escritura en la tarjeta cuentan con un campo de 6 columnas, de la 31 a la 36.

3.- TERCERA TARJETA.

Estado Físico.- Para el caso de mezclas se debe suministrar el estado físico de ellas, ya que no se evalúa éste en el programa.

Este dato se perfora de la columna 1 en adelante de la siguiente manera:

LIQUIDO            ó            GAS.

4.- TARJETAS PARA CADA COMPONENTE DE LA MEZCLA.

Se deberá anotar el nombre de un componente de la mezcla con su fracción mol correspondiente, en una tarjeta, se hará así para cada componente de la mezcla por ejemplo: para 2 compuestos se hacen 2 tarjetas, para 5 compuestos 5 tarjetas, etc.

El nombre del componente se perfora de la columna 1 en adelante y su fracción mol de la columna 30 a la 35 incluyendo el punto decimal. Se deberá tener cuidado de que la suma de fracciones mol sea igual a 1.0

NOTA: Todas las propiedades requieren como información la fracción mol de c/componente con excepción de la Conductividad térmica de líquidos, la cual necesita de la fracción MASA.

Ejemplo de datos para evaluar la propiedad de una mezcla, en---  
este caso difusión de metano en n-hexano a una temperatura y presión da--  
das.

Tarjeta 1.-

Columna 1: Propiedad.-	DIFUSION
Columna 30: Tipo de Cálculo.-	MEZCLA
Columna 40: Número de Compuestos.-	02

Tarjeta 2.-

Columna 1: Temperatura de cálculo.-	65.0 °C
Columna 11: Presión de cálculo.-	760.0 MM de Hg
Columna 21: Temp. de Referencia.-	25.0 °C
Columna 31: Unidades de Temp. y Presión.-	CMMHG

Tarjeta 4.-

Columna 1: Nombre de un Componente.-	METANO
Columna 30: Fracción mol del Cpte.-	0.50

Tarjeta 5.-

Columna 1: Nombre de un componente.-	N-HEXANO
Columna 30: Fracción mol del Cpte.-	0.50

Tarjeta 3.-

Columna 1: Estado físico de la mezcla.-	GAS
---	-----



CALCULO DE PROPIEDADES DE UNA MEZCLA

COMPUESTOS	FRACCION MOL
METANO	0.5000
n-HEXANO	0.5000

ESTADO FISICO: GAS

DIFUSION CM2/SEG

.844264E-01



4.3.b.- GENERACION DE TABLAS DEBIDO AL INCREMENTO DE TEMPERATURA -  
DE EVALUACION DE ALGUNA PROPIEDAD DE MEZCLAS.

1.- PRIMERA TARJETA.

a).- El primer dato en esta tarjeta es la propiedad que se va a calcular la cual se debe escoger de entre:

Capacidad Calorífica	Viscosidad
Entalpia	Densidad
Difusión	Conductividad Térmica

Aquí no se evalúan las 6 propiedades a la vez.

La propiedad escogida se perfora de la columna 1 en adelante.

b).- Tipo de cálculo.

En este caso será: TTMEZC el que se escribe de la columna 30 a la 35.

c).- El último dato en esta tarjeta corresponde al número de compuestos que integran la mezcla el cual no puede exceder de 10 (Ver lista de compuestos en el Cap. 1) este número se perfora de la columna 40 a la 41.

2.- SEGUNDA TARJETA.

a).- Temperatura inicial de cálculo a la cual le corresponden las columnas 1 a la 10.

b).- Presión a la cual se va a evaluar la propiedad escrito de la columna 11 a la 20.

c).- Temperatura de referencia para evaluar la entalpia. Este dato se debe escribir siempre ya que si no es leído por la computadora se -- producirá un error. Esta temperatura se escribe de la columna 21 a la 30. Las unidades de la temperatura inicial de cálculo y la de ésta deberán ser las mismas.

d).- Por último se perforan de la columna 31 a la 36 las unidades de temperatura y presión. (En este orden, siguiendo la nomenclatura indicada en el Cap. 3).

### 3.- TERCERA TARJETA.

En ésta se indica el estado físico de la mezcla partiendo de la -- columna 1 de la siguiente manera:

LIQUIDO      ó      GAS.

### 4.- Tarjetas para cada componente de la Mezcla.

En la cuarta tarjeta se debe escribir el nombre y la fracción mol del primer componente de la mezcla, el nombre se escribe de la columna 1 - en adelante y la fracción mol de la 30 a la 36 incluyendo el punto decimal. En la 5a. tarjeta se hace lo mismo para el segundo componente y así sucesivamente hasta el último de los compuestos que forman la mezcla. La suma de fracciones mol debe ser igual a 1.0

5.- En la última tarjeta se escriben la temperatura final de cálculo en las mismas unidades de las anteriores y el incremento de temperatura. El primer dato se perfora de la columna 1 a la 10 y el otro de la columna 11 a la 20.

Nota: Para el cálculo de la conductividad térmica de líquidos, se deberá suministrar la Fracción Masa en lugar de la Fracción mol.

Ejemplo de datos para generar una tabla debido al incremento de -- temperatura para evaluar la Conductividad térmica de una mezcla de Metano- y Propano.

Tarjeta 1.-

Columna 1: Propiedad.-	CONDUCTIVIDAD TERMICA
Columna 30: Tipo de cálculo.-	TTMEZC
Columna 40: Número de Compuestos.-	02

Tarjeta 2.-

Columna 1: Temp. inicial de cálculo.-	50.0 °C
Columna 11: Presión de cálculo.-	29.92 Pulg.-Agua
Columna 21: Temp. de referencia.-	0.0 °C
Columna 31: Unidades de Temp. y Presión.-	CPULHG

Tarjeta 3.-

Columna 1: Edo. físico de la Mezcla.-	GAS
---------------------------------------	-----

Tarjeta 4.-

Columna 1: Nombre de un compuesto.-	METANO
Columna 30: Fracción mol del Cpte.-	0.769

Tarjeta 5.-

Columna 1: Nombre de un compuesto.-	PROPANO
Columna 30: Fracción mol del Cpte.-	0.231

Tarjeta 6.-

Columna 1: Temp: final de cálculo.-	150.0 °C
Columna 11: Incremento de Temp.-	3.0 °C



GENERACION DE TABLA

COMPUESTOS	FRACCION MOL
PROPANO	0.2310
METANO	0.7690

TEMPERATURA INICIAL-K = 323.00  
 TEMPERATURA FINAL-K = 423.00  
 INCREMENTO DE TEMP.-K = 3.00  
 PRESION DE CALCULO-ATM = 1.00  
 ESTADO FISICO: GAS

TEMPERATURA-K CONDUCTIVIDAD TERMICA  
BTU/HR-PIE-F

323.00	.204221E-01
326.00	.206073E-01
329.00	.207927E-01
332.00	.209784E-01
335.00	.211644E-01
338.00	.213505E-01
341.00	.215370E-01
344.00	.217236E-01
347.00	.219105E-01
350.00	.220976E-01
353.00	.222850E-01
356.00	.224726E-01
359.00	.226604E-01
362.00	.228485E-01
365.00	.230368E-01
368.00	.232253E-01
371.00	.234140E-01
374.00	.236030E-01
377.00	.237921E-01
380.00	.239815E-01
383.00	.241711E-01
386.00	.243610E-01
389.00	.245510E-01
392.00	.247412E-01
395.00	.249317E-01
398.00	.251223E-01
401.00	.253132E-01
404.00	.255042E-01
407.00	.256955E-01
410.00	.258869E-01
413.00	.260786E-01
416.00	.262704E-01
419.00	.264624E-01
422.00	.266547E-01
425.00	.268471E-01

4.3.c.- GENERACION DE TABLAS DEBIDO AL INCREMENTO DE PRESION DE -  
EVALUACION DE ALGUNA PROPIEDAD DE MEZCLAS.

Para este caso se sigue el mismo procedimiento que el de temperatura variable, con las siguientes diferencias en los datos escritos en las tarjetas:

1.- PRIMERA TARJETA.

En lugar de escribir TTMEZC como tipo de cálculo se perfora: TPMEZC en el mismo campo designado para este dato.

2.- SEGUNDA TARJETA.

a).- Temperatura a la cual se va a evaluar la propiedad, se escribe de la columna 1 a la 10.

b).- Presión inicial de cálculo, de la columna 11 a la 20.

c).- Temperatura de referencia para calcular la entalpía, este dato deberá escribirse siempre de la columna 21 a la 30 y con las mismas unidades que la temperatura anterior.

d).- Unidades en las que se han suministrado los datos de Temp. y Presión (Consultar Cap. 3) de las columnas 31 a la 35.

3.- TERCERA TARJETA.

Estado físico de la mezcla: LIQUIDO ó GAS.  
de la columna 1 en adelante.

4.- TARJETAS PARA CADA COMPONENTE DE LA MEZCLA.

Se hace una tarjeta para cada componente escribiendo su nombre de la columna 1 en adelante y su fracción mol de la columna 31 a la 36, se perfora una 2a. tarjeta para el segundo componente y así sucesivamente hasta el último compuesto que forma la mezcla.

Por lo que se emplearán tantas tarjetas como número de compuestos tenga la mezcla. Se debe cuidar de que la suma de las fracciones mol sea

igual a 1.0.

5.- Presión final de cálculo y el incremento de presión para elaborar la tabla. El primer dato se escribe en las mismas unidades que la presión inicial de cálculo, de la columna 1 a la 10.

El incremento se perfora de la columna 11 a la 20.

Nota: Para calcular la conductividad térmica de líquidos se deberá suministrar la Fracción Masa en lugar de la Fracción Mol.

Ejemplo de datos para generar una tabla debido al incremento de -  
presión para evaluar la densidad de una mezcla de Metano y Propano.

Tarjeta 1.-

Columna 1: Propiedad.-	DENSIDAD
Columna 30: Tipo de cálculo.-	TPMEZC
Columna 40: Número de compuestos.-	02

Tarjeta 2.-

Columna 1: Temperatura de cálculo.-	-40.0 °C
Columna 11: Presión inicial de Cálculo.-	100.0 atm
Columna 21: Temp. de referencia.-	0.0 °C
Columna 31: Unidades de Temp. y Presión.-	CATM

Tarjeta 3.-

Columna 1: Edo. físico de la mezcla.-	GAS
---------------------------------------	-----

Tarjeta 4.-

Columna 1: Nombre de un Compuesto.-	METANO
Columna 30: Fracción Mol. del Cpte.-	0.221

Tarjeta 5.-

Columna 1: Nombre de un Compuesto.-	PROPANO
Columna 30: Fracción mol del Cpte.-	0.779

Tarjeta 6.-

Columna 1: Presión final de cálculo.-	300.0 atm.
Columna 11: Incremento de presión.-	2.0 atm.





GENERACION DE TABLA

CUMPUESTOS	FRACCION MOL
METANO	0.2210
PROPANO	0.7790

PRESION INICIAL-ATM = 100.00  
 PRESION FINAL-ATM = 300.00  
 INCREMENTO DE PRESION-ATM = 2.00  
 TEMPERATURA DE CALCULO-K = 233.00  
 ESTADO FISICO: GAS

PRESION-ATM                      DENSIDAD-LB/PIE<sup>3</sup>

100.000	.339313E+02
102.000	.337085E+02
104.000	.334963E+02
106.000	.341628E+02
108.000	.339432E+02
110.000	.337336E+02
112.000	.343665E+02
114.000	.341506E+02
116.000	.339441E+02
118.000	.337464E+02
120.000	.343345E+02
122.000	.341314E+02
124.000	.339367E+02
126.000	.337498E+02
128.000	.342986E+02
130.000	.341071E+02
132.000	.339231E+02
134.000	.337460E+02
136.000	.342603E+02
138.000	.340792E+02
140.000	.339048E+02
142.000	.343983E+02
144.000	.342204E+02
146.000	.340488E+02
148.000	.338831E+02
150.000	.343484E+02
152.000	.341797E+02
154.000	.340167E+02
156.000	.338591E+02
158.000	.342990E+02
160.000	.341387E+02
162.000	.339835E+02
164.000	.344080E+02
166.000	.342505E+02
168.000	.340979E+02
170.000	.339499E+02
172.000	.343531E+02
174.000	.342031E+02

176.000	.340575E+02
178.000	.344476E+02
180.000	.343001E+02
182.000	.341569E+02
184.000	.340178E+02
186.000	.343898E+02
188.000	.342490E+02
190.000	.341121E+02
192.000	.344729E+02
194.000	.343344E+02
196.000	.341997E+02
198.000	.340687E+02
200.000	.344139E+02
202.000	.342814E+02
204.000	.341524E+02
206.000	.344880E+02
208.000	.343577E+02
210.000	.342307E+02
212.000	.345571E+02
214.000	.344290E+02
216.000	.343041E+02
218.000	.341822E+02
220.000	.344958E+02
222.000	.343729E+02
224.000	.342530E+02
226.000	.345585E+02
228.000	.344376E+02
230.000	.343195E+02
232.000	.346174E+02
234.000	.344985E+02
236.000	.343823E+02
238.000	.342687E+02
240.000	.345559E+02
242.000	.344415E+02
244.000	.343296E+02
246.000	.346101E+02
248.000	.344975E+02
250.000	.343873E+02
252.000	.346613E+02
254.000	.345505E+02
256.000	.344420E+02
258.000	.343358E+02
260.000	.346007E+02
262.000	.344939E+02
264.000	.343893E+02
266.000	.346485E+02
268.000	.345432E+02
270.000	.344402E+02
272.000	.346938E+02
274.000	.345902E+02
276.000	.344886E+02
278.000	.347370E+02
280.000	.346349E+02
282.000	.345348E+02
284.000	.344367E+02
286.000	.346776E+02
288.000	.345790E+02
290.000	.344822E+02
292.000	.347183E+02
294.000	.346211E+02
296.000	.345257E+02
298.000	.347573E+02
300.000	.346615E+02

4.3.d.- GENERACION DE GRAFICAS DE ALGUNA PROPIEDAD DE UNA MEZCLA--  
DE COMPUESTOS VARIANDO LA TEMPERATURA DE OPERACION.

1.- PRIMERA TARJETA.

- a).- Nombre de la propiedad que va a calcularse, perforado de la -  
columna 1 en adelante.
- b).- Tipo de cálculo, en este caso: GTEZCLA perforado de la colum  
na 30 en adelante.
- c).- Número de compuestos que constituyen la mezcla, perforado de-  
la columna 40 a la 41.

2.- SEGUNDA TARJETA.

- a).- Temperatura inicial de cálculo, perforado de la columna 1 a -  
la 10.
- b).- Presión de operación perforado de la columna 11 a la 20.
- c).- Temperatura de referencia para calcular la entalpia perforado  
(aunque no sea necesario) de la columna 21 a la 30.
- d).- Por último se perfora de la columna 31 en adelante las unida-  
des de temperatura y presión.

3.- TERCERA TARJETA.

Estado físico de la mezcla: LIQUIDO o GAS.

4.- CUARTA TARJETA.

Nombre y fracción mol del primer compuesto que forma la mezcla,  
el nombre se perfora de la columna 1 a la 24 y la fracción mol  
de la 30 en adelante. Esto se hace para cada uno de los com--  
puestos los cuales ocuparán una tarjeta cada uno.

5.- ULTIMA TARJETA.

- a).- Temperatura final de cálculo, perforada de la columna 1 a la-  
10.
- b).- Incremento de temperatura, perforado de la columna 11 a la 20.

Ejemplo que muestra la generación de una gráfica de viscosidad -- contra temperatura para un compuesto puro, en este caso Benceno. Los datos se perforan de igual manera que para generar tablas excepto el tipo - de cálculo, ya que en lugar de TTPURO se escribe GTPURO.

Tarjeta 1.-

a).- Nombre de la propiedad	VISCOSIDAD
b).- Tipo de cálculo	GTPURO
c).- Número de compuestos	01

Tarjeta 2.-

a).- Temperatura inicial	32.0
b).- Presión de operación	760.0
c).- Temperatura de referencia	32.0
d).- Unidades de T. y P.	FMMHG

TARJETA 3.-

a).- Nombre del compuesto	BENCENO
---------------------------	---------

Tarjeta 4.-

a).- Temperatura final	180.0
b).- Incremento de temperatura.	2.0

Nota: Los formatos de salida son idénticos a los del ejemplo de - la tabla (Ver hoja de resultados).



VISCOSIDAD CENTIPOISES VS TEMPERATURA-K

GENERACION DE GRAFICAS DE ALGUNA PROPIEDAD DE UNA MEZCLA DE COMPUESTOS PUROS VARIANDO LA PRESION DE CALCULO.

1.- PRIMERA TARJETA.

- a).- Nombre de la propiedad que va a calcularse, perforado de la columna 1 en adelante.
- b).- Tipo de cálculo, en este caso: GPMEZCLA perforado de la columna 30 en adelante.
- c).- Número de compuestos que constituyen la mezcla, perforado de la columna 40 a la 41.

2.- SEGUNDA TARJETA.

- a).- Temperatura de cálculo, perforado de la columna 1 a la 10.
- b).- Presión inicial de cálculo, perforado de la columna 11 a la 20.
- c).- Temperatura de referencia para calcular la entalpia perforado (aunque no sea necesaria) de la columna 21 a la 30.
- d).- Unidades de temperatura y presión de los datos anteriores perforado de la columna 31 en adelante.

3.- TERCERA TARJETA.

Estado físico de la mezcla: LIQUIDO o GAS.

4.- CUARTA TARJETA.

Nombre y fracción mol del primer compuesto que forma la mezcla, el nombre se perfora de la columna 1 en adelante y la fracción mol de la columna 30 en adelante. Esto se hace para cada uno de los compuestos, empleando para cada uno de ellos una tarjeta.

5.- ULTIMA TARJETA.

- a).- Presión final de cálculo, perforado de la columna 1 a la 10.
- b).- Incremento de presión, perforado de la columna 11 a la 20.

Ejemplo que muestra la generación de una gráfica de Conductividad Térmica contra temperatura para una mezcla de Metano Propano; cabe hacer notar que los datos se perforan de igual forma que para generar una tabla a excepción del tipo de cálculo el cual debe ser escrito como GTMEZCLA.

Tarjeta 1.-

a).- Nombre de la propiedad	CONDUCTIVIDAD TERMICA
b).- Tipo de cálculo	GTMEZCLA
c).- Número de compuestos	02

Tarjeta 2.-

a).- Temperatura inicial	50.0	C
b).- Presión de cálculo	29.92	
c).- Temperatura de referencia	0.0	C
d).- Unidades de T. y P.	CPULHG	

Tarjeta 3.-

a).- Estado Físico.	GAS
---------------------	-----

Tarjeta 4.-

a).- Primer compuesto	METANO
b).- Fracción mol	0.769

Tarjeta 5.-

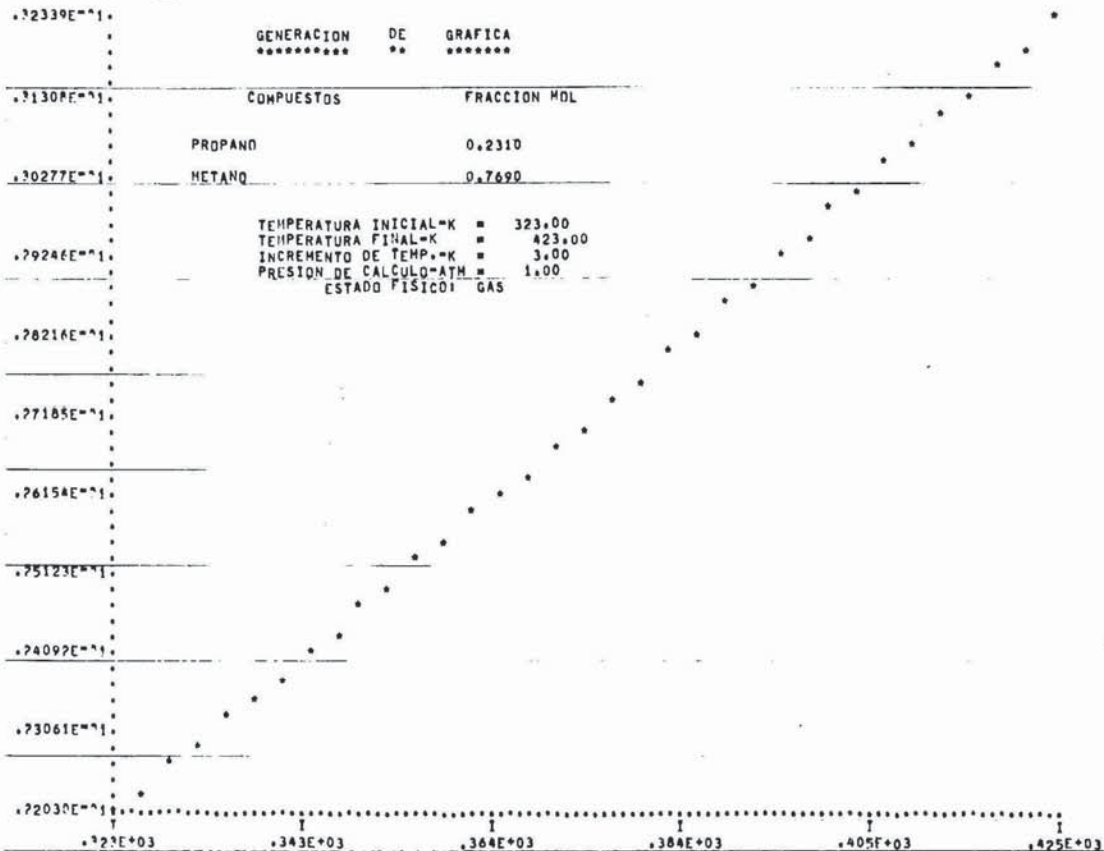
a).- Segundo compuesto	PROPANO
b).- Fracción mol	0.231

Tarjeta 6.-

a).- Temperatura final	150.0	C
b).- Incremento de temperatura.	3.0	C

Nota: Los formatos de salida son idénticos a los de la tabla (Ver-  
hoja de resultados).





CONDUCTIVIDAD TERMICA BTU/HR-PIE-F VS TEMPERATURA=K

## RECOMENDACIONES Y CONCLUSIONES

Para finalizar éste trabajo y hacerlo lo más explícito posible es necesario mencionar algunas recomendaciones para obtener un mejor aprovechamiento del sistema.

En primer término tenemos las tarjetas de control y sus respectivas tarjetas de datos. Las primeras pueden variar dependiendo del tipo de computadora o si se trabaja en biblioteca (archivo), disco o el paquete de tarjetas, lo referente a esta información debe obtenerse en el lugar donde se va a correr el programa. Por ejemplo, si se va a correr en el CIMASS-- (Centro de Investigaciones de Matemáticas Aplicadas, Servicios y Sistemas) y se encuentra en biblioteca (LIBRARY) las tarjetas de control serían:

```
[1] USER = AL02/GX
[1] EXECUTE JOR/PROP  FORTRAN
[1] DATA FILE5
```

DATOS DEL PROGRAMA

```
[1] END
```

NOTA: ESTE PROGRAMA ESTA ESCRITO EN BCL.

Las perforaciones en las tarjetas se hacen en una máquina perforadora especial, y cuentan con ellas la Facultad de Química, Facultad de Ingeniería, CIMASS, etc. es decir se tiene fácil acceso a ellas.

En cuanto a las tarjetas de datos deben estar perfectamente perforadas con los nombres y números necesarios para efectuar el cálculo tal y como se describe en el capítulo 3. De lo contrario, si una columna es equivocada aparecerá un error.

Se debe escribir el nombre de la propiedad, del compuesto y las -- condiciones de trabajo como están escritos anteriormente. Los números dígitos deben empezar en la columna que les corresponde y ponerle punto decimal si se trata de un número real.

Además de los errores que se puedan tener en las tarjetas de datos, el programa puede tener errores internos, pues aunque fue probado en condiciones extremas de Presión y Temperatura es imposible abarcar todas las posibilidades de falla acerca del programa. Contiene sin embargo, un gran número de letreros y declaraciones internas de tal forma que no efectúe -- cálculos inoperables por la máquina.

Como existen muchas correlaciones con sus respectivas operaciones-- no es posible detectar en qué momento y bajo que condiciones podría presentarse una operación ilógica, tal es el caso de elevar una potencia fraccionaria un número negativo, ya que la computadora lo hace mediante logaritmos lo que es imposible de efectuar si se trata de números negativos como consecuencia el programa es abortado por la máquina declarando un error por logaritmo inválido (ALOG INVALID). También tenemos el caso de una división donde el divisor lleve a valer cero, no es operable esta expresión de igual forma con el error: DIVIDE BY ZERO.. Existen muchos otros errores -- que no están a nuestro alcance y no podemos modificar.

Sin embargo, con el frecuente uso del programa puede aparecer un --

error que no hayamos detectado y sería de gran utilidad si se reporta al centro de computación de la Facultad de Química donde se tiene un listado completo del programa así como una copia de todas las tarjetas que lo estructuran y el usuario mismo (mediante un permiso) o el personal encargado puede efectuar el pequeño cambio.

Con frecuencia la computadora B-6700 del CIMASS presenta anomalías y fallas propias que no deben atribuirse a los programas, por ejemplo, lee mal las tarjetas, reduce el tiempo de procesamiento y/o de ejecución del programa, en fin problemas externos que hay que investigar antes de atribuirlos al programa.

Los formatos de salida pueden también sufrir algunos cambios. Así para el caso del compuesto puro donde las tarjetas de datos no contienen el estado físico que le corresponde sino que el sistema mismo lo calcula con el primer juego de datos que se le proporcionen, si es para una presión y temperatura dadas no hay problema, pero si se trata de una tabla ya sea por variación de presión o temperatura el problema se presenta cuando el compuesto cambia de estado pues lo sigue considerando en el estado físico inicial.

En el caso de mezclas se presenta el mismo caso, ya que si el usuario le proporciona el estado físico LIQUIDO y se trata de una tabla por temperatura llega un momento en que cambia de estado y los cálculos se seguirán haciendo considerando esta premisa proporcionando errores sensibles.

En el caso de las correcciones por presión existen diferentes correlaciones para cada rango de ellas, si la presión es baja pero diferente a la atmosférica aparecerá un letrero y el valor de la propiedad de éste pero correspondiente a la presión atmosférica. Para presiones elevadas -- además del letrero la propiedad tendrá el valor 1.0 (en lugar de 0.0 pues podría dar expresiones ilógicas) ya que no hay correlación que calcule a esas condiciones y el error sería elevado comparado con el que correspondría a la presión atmosférica.

No hay que perder de vista que existen algunas propiedades como la Conductividad Térmica que requieren de otras propiedades (viscosidad y capacidad calorífica) y si estas traen un error consigo se reflejará en la anterior.

A esto se debe que algunas veces aparecen dos letreros repetidos en un mismo calculo, por ejemplo, para el caso de una tabla de TODAS, primero llama a la subrutina de viscosidad y la calcula como tal y pone un letrero debido a las condiciones de trabajo, cuando llama a la subrutina de conductividad térmica la cual depende de la viscosidad la vuelve a llamar y escribe por segunda vez el letrero ya que las condiciones de trabajo son las mismas y calcula la conductividad térmica.

Todos los letreros siempre van arriba de los resultados numéricos.

Finalmente lo referente al banco de datos donde algunos parámetros constantes no fué posible encontrarlos en la literatura, por ejemplo, constantes de la capacidad calorífica del líquido, constantes para la ecuación de Andrade (viscosidad de líquidos), constantes para la tensión superficial, etc. son mínimas, sin embargo, fué necesario poner letreros para que no efectuará los cálculos de tales propiedades.

Podemos concluir en esta forma que el sistema opera satisfactoriamente bajo condiciones prácticas de presión y temperatura arrojando valores muy cercanos a la realidad (experimentales).

Se puede tener toda la seguridad ya que han sido probados, como se menciona anteriormente, en condiciones normales y extremas con el fin de encontrar los errores posibles, así se trabajo con mezclas de 10 componentes o aire en estado físico líquido. Todos los resultados de los que se contaba información fueron comparados con gran aproximación, de otros no se disponía de tal información.

No se debe jugar con el programa metiéndole datos ilógicos ya que éste también arroja resultados absurdos.

El usuario puede disponer de los resultados obtenidos con gran exactitud para la resolución de sus problemas en el caso de estudiantes, como ejemplo o extensión en la enseñanza de su cátedra si se trata de maestros, así como medios de comparación en los resultados obtenidos en el laboratorio por el Investigador o simplemente en la vida profesional del Ingeniero relacionado con este campo de propiedades termodinámicas y de transporte.

Nuestra mayor satisfacción sería que alguien se interesará en este sistema y continuará aumentando su capacidad así como su aplicabilidad.

A P E N D I C E 1-A

SISTEMAS COMPUTACIONALES DE ESTIMACION DE PROPIEDADES FISICAS.

ANO EN QUE SE DIO A CONOCER:	NOMBRE COMPLETO	INSTITUCION EN DONDE FUE DESARROLLADO	PRINCIPALES COLABORADORES	
CHEVRON	1964	Generalized Heat and Material Balancing System	Chevron Research and Development Co., Richmond, Calif.	A. E. Raviez R. L. Norman
APPES	1965	A.I.Ch.E. Physical Property Estimation System	Arthur D. Little, Inc. Cambridge, Mass.	G. H. Harris R. C. Reid J. E. Murphy R. C. Norris R. E. Heitman C. Hill
PHILLIPS	1968	General-Purpose Physical Data - System for Computer Process Calculations	Phillips Petroleum Co. Bartlesville, Okla.	L. C. Yen K. R. Cantwell B. L. Giles
CHESS	1969	Chemical Engineering Simulation System	University of Houston Houston, Texas.	R. L. Motard H. M. Lee R. W. Barkley D. M. Ingels
TAP	1969	Thermodynamics - and Physical Property Package	University of Houston Houston, Texas.	E. J. Henley R. M. Beiruté
HALCON	1969	Halcon Physical-Properties System	Halcon International, Inc. Two Park Avenue New York, N. Y.	T. W. Stein C. F. Chueh
NCPAK*H	1969	Computes Program for Phase Equilibrium and Enthalpy	Oklahoma State University. Stillwater, Okla.	J. H. Ebar R. N. Maddox
P-V-T	1969	Modified Redlich Kwong Equation - of State Computer Program	P-V-T, Inc. Houston, Texas	G. M. Wilson
KVALUE	1970	KVALUE	University of Houston Houston, Texas.	R. A. Williams E. J. Henley
VAPLIQ	1970	Vapor-Liquid Program	United Computing Systems, Inc. Kansas City, Missouri.	J. F. Ruf
EQUILIB	1970	Low-Temperature, Vapor-Liquid Program	United Computing Systems, Inc. Kansas City, Missouri.	J. F. Ruf
APPES-NEL	1970	APPES Modified-by National Engineering Laboratory	National Engineering - Laboratory East Kilbride, Scotland.	C. N. B. Martin

	AÑO EN QUE SE DIO A CONOCER:	NOMBRE COMPLETO	INSTITUCION EN DONDE FUE DESARROLLADO	PRINCIPALES COLABORADORES
Pennsylvania System	1969	Physical Property Data-Base-Storage, Retrieval and Estimation System	University of Pennsylvania, Philadelphia, Pa.	W. D. Seider D. S. Pozharovic
FLOWTRAN	1969	Flowtran	Monsanto Co. New Enterprises Div. St. Louis, Missouri.	R. H. Cavett
JUSE-AESOP	1969	Japanese Union of Scientists and Engineers Physical-Data Program.	Nippon Kagaku-Gizyutsu Kenshu-Zyo Co., LTD 5-10-11 Sendagaya, Shibuya-Ku Tokyo, Japan.	
GEPDS	1970	General Electric-Process Design System	Oklahoma State University Stillwater, Okla.	J. H. Ebar R. N. Maddox
GECEC	1970	General Electric-Chemical Engineering Calculation System.	Abcor, Inc. Cambridge, Mass.	J. H. Porter



A P E N D I C E I-B

COMPARACION DE LA CAPACIDAD DE ESTIMACION DE PROPIEDADES Y-  
NUMEROS DE COMPUESTOS EN BANCO DE DATOS DE NUESTRO SISTEMA-  
CON OTROS YA EXISTENTES.

SISTEMA	NUMERO DE COM- PUESTOS EN EL- BANCO DE DATOS	PROPIEDADES QUE PUEDE ESTIMAR			
		P-V-T	TERMICAS	VAP-LIQ EQUILIB	TRANS- PORTE.
CHEVRON	65	?	?	?	?
APPES	NINGUNO	SI	SI	NO	SI
PHILLIPS	100	SI	SI	SI	SI
CHESS	62	SI	SI	SI	NO
TAP	NINGUNO	SI	SI	NO	SI
HALCON	300	SI	SI	SI	SI
NGPAK*H	60	SI	SI	SI	NO
U. Of Penn sylvania	55	SI	SI	SI	NO
FLOWTRAN	184	SI	SI	SI	SI
JUSE-AESOP	3000	SI	SI	SI	SI
GEPDS	60	SI	SI	SI	NO
GECEC	66	SI	SI	SI	SI
P-V-T	NINGUNO	SI	SI	SI	SI
KVALUE	NINGUNO	NO	NO	SI	NO
VAPLIQ	60	NO	SI	SI	NO
EQUILIB	20	NO	SI	SI	NO
APPES-NEL	123	SI	SI	SI	SI
JOR/PROP	55	SI	SI	NO	SI

A F E N D I C E II-A

OTRAS CORRELACIONES PARA CALCULAR EL CALOR LATENTE DE VAPORIZACION.

a) Ecuaciones Teóricas.-			
METODO	ECUACION	ERROR	LITERATURA.
BAKKER	$\lambda_{20} = \left(\frac{27}{64}\right) R^2 T_c^2 / P_c V_c + RT_c$	Los valores obtenidos por medio de esta ecuación son de alrededor de 2/3--- partes de los experimentales.	(34)
PARTINGTON	$\lambda_{20} = \left(\frac{27}{64}\right) R^2 T_c^2 / P_c V_c + T_c - RT_c$	Buena precisión para no polares, inexacta para O <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> y líquidos asociados.	(34)
BATSCHINSKY	$\lambda_{20} = 2T_c + 6.5(T_c^2 / T_c) / (V_{Lc} / V_c + 0.94)$	30-40 %	(34)
CLAUSIUS-CLAPEYRON	$\frac{dP}{dT} = \frac{r}{T(V_g - V_l)}$	Termodinámicamente exacta.	(1)
b) Ecuaciones basadas en la ley de los estados correspondientes.-			
CLAUSIUS-CLAPEYRON reducida	$d(\ln Pr^0) = (-r / RT_c Z_c) d(1/Tr)$	Lo mismo que para la ecuación original	(1)
FACTOR DE RIEDEL	Tabulaciones de $r / T_c$ como función de $Tr$ , $Z_c$ y factor de Riedel	Hidrocarburos: 1.8 %	(1)
LYDERSEN-GREENKORN Y HOUGEN	Se evalúa $r$ en base a las tablas de entalpías de líquido y vapor saturado para varios valores de $Tr$ y $Z_c$ .	Poco precisa.	(1)
FACTOR ACENTRICO de PITZER	$\frac{r}{T} = S_1 + S_2$  $S_1$ y $S_2$ son funciones tabulares de $Tr$ .	Da buenos resultados.	(1)
CHEN	$r = T(7.90Tr - 7.82 - 7.111 \sqrt{Pr}) / (1.07 - Tr)$	2.55 %	(1)
MARTIN Y EDWARDS	Método que utiliza gráficas y tablas además de los parámetros de la ecuación de Riedel emplea el término M.	0.9%	(34)

c) Métodos de estimación obtenidos a partir de ecuaciones de presión de vapor.									
ECUACION REDUCIDA DE KIRCHHOFF	$\frac{\lambda_{L_1}}{2.303 \cdot Z_{RTc}} = (T_{L_1} \log Pc)/(1 - T_{L_1})$	Buenos resultados.	(2)						
RIEDEL-PLANK y - MILLER	$\lambda_{L_1} = 2.303 \text{ GRTc} \cdot Z_{L_1} [1 + T_{L_1}^2 + k'(1 + 2T_{L_1})]$ $G = 0.2471 + 0.1965 a$ $a = (T_{L_1} \ln Pc)/(1 - T_{L_1})$ $k' = [a/(2.303G) - (1 + T_{L_1})^2]$ $Z_{L_1} = 1 - \left(\frac{0.97}{PcT_{L_1}}\right)$	Es de las más precisas para predecir el calor latente en el punto normal de ebullición.  Para 94 compuestos: 1.7 % Orgánicos: 1.52 % Inorgánicos: 1.19 %	(1)						
d) Otros métodos de estimación.									
EMPIRICO DE RIEDEL	$\lambda_{L_1} = T_{L_1} (5 \log Pc - 2.17)/(0.930 - T_{L_1})$	1.8 %	(34), (1)						
MEISNER	$K = 4.576 \frac{\log(Pr) (Z_2 - Z_1)}{T_r - 1}$ $(Z_2 - Z_1) = \frac{P(V_2 - V_1)}{RT}$	10.0 %	(34)						
WATSON	$\lambda_{L_1} = \frac{0.95 (4.576) T_{L_1}^2 (T_c - 43) \log(Pc)}{(T_c - T_{L_1}) (T_{L_1} - 43)}$	4 %	(34)						
KLEIN modificada	$\lambda_{L_1} = 4.576 (K_{L_1}) \frac{T_{L_1} (\log Pc) \sqrt{1 - \left(\frac{1}{Pc}\right) (T_{L_1})^2}}{1 - T_{L_1}}$ <table style="margin-left: auto; margin-right: auto;"> <tr> <td><math>T_{L_1} &lt; 200</math></td> <td><math>K_{L_1} = 1.02</math></td> </tr> <tr> <td><math>200 - 300</math></td> <td><math>K_{L_1} = 1.04</math></td> </tr> <tr> <td><math>&gt; 300</math></td> <td><math>K_{L_1} = 1.045</math></td> </tr> </table>	$T_{L_1} < 200$	$K_{L_1} = 1.02$	$200 - 300$	$K_{L_1} = 1.04$	$> 300$	$K_{L_1} = 1.045$	1.29 %  Es bastante preciso para inorgánicos e hidrocarburos.	(34)
$T_{L_1} < 200$	$K_{L_1} = 1.02$								
$200 - 300$	$K_{L_1} = 1.04$								
$> 300$	$K_{L_1} = 1.045$								
GIACALONE	$\lambda_{L_1} = \frac{4.576 T_{L_1} \log Pc}{1 - T_{L_1}}$	Orgánicos: 3.0 % Inorgánicos: -2.6 %	(34)						
OTHMER	$\frac{\log(Pr)}{\log(Pr)} = \left[ \frac{T_c}{K_{L_1} T_{L_1}} \right]^2$ <p>Los subíndices R denotan las propiedades del compuesto de referencia.</p>	1.55 %	(34)						

GORDON	$\frac{\log(P^s) - \log P_c}{\log(P^s) - \log P_{c_2}} = \frac{\log Pr^s}{\log Pr^c} = \frac{T_{c_2}}{T_c} \left(\frac{r_2}{r_1}\right)$ <p>Nuevamente el subíndice R señala las propiedades de la sustancia de referencia.</p>	Ofrece buenos resultados.	(34)
CHU Y CHIN	$\lambda_{20} = 6.7T_c \frac{Tr(\log Pr)}{(1 - Tr)^{0.5}}$	3.62 %	(34)
REGLA DE TROUTON	$\lambda_{20} = 10.4 R T_c M$	Orgánicos: -1.4 % Inorgánicos: -5.1 %	(12)
HAGGENMACHER	$\lambda = \frac{4.576T^2 B \cdot Z}{M[T - (273 - Z)]^2}$ $B = \frac{T_2 - (273 - Z) [T_1 - (273 - Z)]}{T_2 - T_1} x$ $\log \frac{P_2^{s_1}}{P_1^{s_1}} : \Delta Z = \left[1 - \frac{Pr^s}{Tr^s}\right]^{1.2}$ <p><math>P_1^{s_1}</math> y <math>P_2^{s_1}</math> son presiones de vapor a las temperaturas <math>T_1</math> y <math>T_2</math> respectivamente. Para Z se usan métodos específicos.</p>	Orgánicos: -2.5 % Inorgánicos: -13.8 %	(12)
FISHTINE	$\lambda = \frac{T_c^2 [T_2 - (273 - Z)] \Delta Z}{T_2^2 [T - (273 - Z)] \Delta Z_2}$ <p><math>\Delta Z</math> se obtiene como en la anterior <math>\Delta Z_2</math> y <math>r_2</math> son evaluados al punto normal de ebullición</p>	Orgánicos: 1.0 % Inorgánicos: 1.6 %	(12)
NARSIMHAN	$\lambda = \frac{RT_c \ln Pc (1 - Tr)^{0.75}}{M(1.963 - 3.46T_{c,20})}$	Orgánicos: 6.25 % Inorgánicos: -8.1 %	(12) (45)
CLAUSIUS-CLAPEYRON modificada	$\lambda = \frac{RT}{M} \left(\frac{d \ln P^s}{d \ln T}\right) \left(1 - \frac{Pr}{Tr}\right)^{1.2}$ <p><math>\frac{d \ln P^s}{d \ln T}</math> se obtiene de la curva de presión de vapor.</p>	Orgánicos: 0.76 % Inorgánicos: 7.3 %	(12)
MATHUR y KULLOOR	$\frac{C}{M}$ <p>C y n son constantes características de grupos funcionales</p>	2 - 5 %	(46)

IBRAHIM y KULLOOR	$1.18 V^{0.17} T_c^{0.73} = K$ <p>V = volumen molecular al punto normal de ebullición. K = constante.</p>	Menor al 5%	(47)
KISTYAKOWSKY	$\frac{T_c}{T_b} = 8.75 + 4.571 \log T_c$	Ofrece buenos resultados.	(48)
BRADFORD y THODOS	$k = \lambda_b [1 - Tr]^{0.72}$ $\lambda_b = 800M^{0.72}$	Hidrocarburos: 2.6%	(48)
e) <u>Correlaciones de <math>\lambda</math></u>	vs. <u>T.</u>		
THIESSEN	$\lambda = k(T_c - T)$ <p>k varía para cada sustancia. n está muy próxima a ser una constante universal para todos los compuestos.</p>	No se reporta	(34)
WATSON	$\lambda = \lambda_1 \frac{T_c - T}{T_c - T_1}^{0.15}$ <p><math>\lambda_1</math> = calor latente a una temperatura arbitraria <math>T_1</math>.</p>	4%	(34), (1) (48)

Otras funciones son discutidas por Fishtine (34)

A P E N D I C E II. b.

METODOS PARA CALCULAR LA CAPACIDAD CALORIFICA.

Método	Ecuación	Error %	Literatura
<u>(Gases)</u>			
Bennewitz, Rossner y Dobratz.	$C_p = A + BT + CT^2$	6.9	(49)
Modificaciones al Método de B, R. y D.	$C_p = A + BT + CT^2$	4.1	(50)
Sam C. Yuan y Young I. Mok	$C_p = A + B.e^{CT^2}$	0.3	(51)
T.P. Thin y J.L. Durán	$C_p = A + BT + CT^2$	0.3	(52)
Souders, Matthews y Hurd.	Contribución.	0.9	(53)
Por contribución de grupos	Contribución.	4-7	(62), (23)
<u>(Líquidos)</u>			
Sakiadis y Coates	$C_p = (6+a)R + \sum q_i C_{p,i} + ((3n-6-a-\sum q_i)/\sum q_i) S \cdot \sum q_i C_{v,i}$	3	(54)
Yuan y Stiel	$\Delta C_p = C_p - C_p^{ref} = \Delta C_p + \sum C_p^{ref} + X^2 C_p^{ref} + X^3 C_p^{ref} + \dots$	3	(55)
Tamplin y Zuzic	$C_p = A + BT + CT^2$	1.4	(56)
V. Puchaiyappan	$C_p = C(M)^n$	2	(57)
Por contribución estructural	Contribución	2	(17), (54)
Nomograma	Nomograma	3	(39)

A P E N D I C E II.c

METODOS PARA CALCULAR LA CONDUCTIVIDAD TERMICA.

Método	Ecuación	Error	Literatura
Mét. de la Energía potencial in termolecular.	$k = 1.9891 \times 10^{-7} (T/M^{1/3})^{1/2}$	7	(1)
Mét. del modelo molecular (gases)	$kM/\mu.C = f(15R/4) (2/3R)$	2.5	(1)
Mét. de Eucken (Gas poliatómico)	$kM/\mu = 1.77R - 1.32C (1.77 - 0.45) \mu.C$	10	(1)
Corrección de Eucken	$k = 2.42 \mu.C (C - (2.48/M))$	5.0	(2)
Mét. de Brombley	Moléc. Lineal no-polar $kM/\mu = 1.3 C - 3.4 - 0.7/T_c$	3	(1)
	Moléc. no lineal $kM/\mu = 1.3 C - 3.6 - 0.3 C - 69T_c - 3$	6	
Método de Misic y Thodos	Metano Naftaleno y aromáticos. $k_c/C = (0.445 \times 10^{-7}) T_c$ Todos los Hidrocarburos. $k_c/C = 10^{-7} (14.52T_c - 5.14)$ No Hidroc. Tr 1.0 $k_c/C = 10^{-7} (20Z + 1.08) T_c$ No Hidroc. 1.0-Tr 3.0 $k_c/C = 10^{-7} (195Z - 31.94)$ $T_c = 16.83 - 82.52c$ No Hidroc. 3.0 Tr 15 $k_c/C = 10^{-7} ((718 - 18.25Zc)$ $T_c = 10.22c - 4.91$		(1)
Mét. Corregido de Palmer	$k = 22.9C (T_c/H_c)$	10	(2)
Mét. de Hirschfelder	$k = C / (3.67/C + 1.272)$		(7)
Mét. de Liley	$k = aT$		(58)
Mét. de Vargaftik	$k = k_0 + B^2$		(53)

(Líquido) Mét. de Shefly y Johnson	$k = (4.66 \times 10^{-7}) \{1 - 0.00126$ $(T - T_c) / T_c\}^{0.55} M^{1.75}$	13.0	(1)
Robbins-Kingrea	$k = \frac{86 - 4.83 H}{1000 (S^*)} \left( \frac{0.55}{T_c} \right) \left( \frac{C}{M} \right)^{0.55} C$	3.7	(1)
Sakiadis y Coates	$k = C_p U_s L$ $U_s = \text{Vel. del Sonido}$	5-7	(1)
Efecto de la Temperatura.	$k = k_c [1 + \alpha (T - T_c)]$	10.0	(1)
Weber	$k = 0.00347 C_c (C/M)^{1.75}$	8.3	(41)
Foust	$k = D_{1,2} \rho C_p$	12.0	(41)
Para Hidrocar- buros.	$k = 0.0024 C_c / T_c (C/M)^{1.75}$	7.5	(41)
Corregido de Palmer	$k = 41.2 C (S \cdot g/M)^{1.75} (T_c / H_{v,c})$ $(0.55 / T_c)$	10.0	(2)



A P E N D I C E 11-D

OTROS METODOS PARA ESTIMAR LA DENSIDAD DE LOS LIQUIDOS

METODO	ECUACION	ERROR	LITERATURA
a) <u>En el punto normal de ebullición:</u>			
Métodos aditivos	Requieren de información acerca de la estructura del compuesto. No son aplicables a sistemas por computadora.	No son muy precisos.	(1)
Benson	$\rho_{Lp} = (0.422 \log Pc + 1.981)$	Menor al 3% para la mayoría de los compuestos orgánicos y algunos inorgánicos.	(1),(12)
b) <u>A cualquier temperatura:</u>			
Lydersen, Greenhorn y Hougen.	$1/\rho_L = V_L = V_L/\rho_{Lp}$	orgánicos: 1.27% inorgánicos: 17.15%	(1)
Wicks	$\rho_L = 1.20 + (5.563 - 11.03Zc) \times (1 - Tr)^{-0.02 - 0.01Zc}$	Especialmente diseñada para $0.25 < Zc < 0.29$ y -- produce valores confiables hasta $Tr = 0.99$	(1)
Mathias	$\rho_L + \rho_v = \rho_{Lp} (2 - Tr)/(2 - Tb_p)$	En 32 compuestos probados produjo un 1.7% -- excepto en regiones -- muy cercanas al punto crítico.	(1)
Benson	$\rho_L = 2\rho_{Lp} + [(Tc - T)/(Tc - Tb_p)] (\rho_{Lp} - 2\rho_{Lp}) - \rho_v$	1.1%	(1)
Guggenheim	$\rho_L = 1 + a(1 - Tr)^{0.33} + b(1 - Tr)$ <u>Consta de 5 variaciones:</u> 1.- $a = 1.75$ ; $b = 0.75$ 2.- $a = 1.93 + 0.2(z - 7)$ $z = 7 + (1 - 3.72Zc)/0.26Zc$ $Zc = PcVc/RTc$ ; $b = 0.85$ 3.- $a = 1.93 + 0.2(z - 7)$ $z = \frac{0.314 + \ln \rho_{Lp}}{0.0838 - \ln(Tb_p)}$ $\rho_L = 36 \left(\frac{Tc}{Tb_p}\right) - 35 - (Tb_p)^{0.42} \ln(Tb_p)$ $b = 0.85$ 4.- $a = 1.93 + 0.2(z - 7)$ $z = 0.9076 \ln \left(1 + \frac{Tb_p \ln Pc}{1 - Tr}\right)$ $b = 0.85$	orgánicos: -7.73% inorgánicos: -1.76% orgánicos: -0.28% inorgánicos: 2.87% Orgánicos: -0.71% inorgánicos: 1.67% orgánicos: -1.22% inorgánicos: -0.63%	(12)

	$5. - a = 1.93 \cdot 0.2(i - 7)$ $= 0.9076 i - (M_c / RTc)$ $b = 0.85$	orgánicos: -6.87 ° inorgánicos: -20.51 °	
Eykman	$i = (n_c - 1) / (c(n_c + 0.4))$ $c = \text{constante}$ $n = \text{índice de refracción}$	orgánicos: 1.12 °	(12)
Narsimban	$I_{\text{org}} = [i - 2.50(1 - Tr)^{0.55}]/(Vc/M)$ $II \quad M_c = (0.044ZcRTc)/Pc \cdot 0.044 - 0.110(1 - Tr)^{0.55}$	orgánicos: -0.22 ° inorgánicos: 3.37 °	(12)
Barile y Thodos	<p>Zona I: <math>0.10 &lt; Pr \leq 1.0</math></p> $1/\rho_c = (Tr/Pr) [n Pr + c(Pr)^{-1} + (Pr)^{-2}]$ <p>Zona II: <math>Pr \leq 0.10</math></p> $1/\rho_c = (Tr/Pr) (c + r Pr^2)$	orgánicos: -23.3 °	(12)
Chueh-Präusnitz	$\rho_c = \rho_{c0} [1 + 92cN(P - P_0)/Pc]^{0.5}$ $N = (1 - 0.39) [\exp(6.9547 - 76.2853Tr + 191.306(Tr)^2 - 203.5472(Tr)^3 + 82.7631(Tr)^4)]$	sus resultados son excelentes.	(3)
Lyckman, Eckert y Präusnitz	$1/\rho_c = Vr + Vr^{0.5} + Vr$ $Vr^{0.5} = \text{función de } Tr$	Hidrocarburos: 4.22 °	(3), (59)
Harlacher	$i = 1 + K(1 - Tr)^{-1} + L(1 - Tr)$ $K \text{ y } L \text{ son funciones del paracoro}$	Hidrocarburos: 0.31	(5), (59)
Goyal y Doraiswamy	$Pc/M_c Tc$ $\frac{0.0653}{0.773} = 0.09Tr$ $Zc$	Para toda clase de líquidos: 0.5	(60), (3)
Hals y Stiel	$1/\rho_c = \sum_{i=1}^n \frac{V_i}{V} + \sum_{i=1}^n \frac{V_i}{V} x_i$ $= \sum_{i=1}^n \frac{V_i}{V} (1 + x_i)$ $V = \text{funciones de } Tr$ $x = \log Pr \cdot Tr \cdot 0.6 + 1.70 + 1.552$	No se reportan comparaciones con datos experimentales	(3), (59)
Rackett (modificada)	$i = \frac{1}{c} \left( \frac{1}{1 - Tr} - 1 \right) - 1 - Tr^2$	Para toda clase de líquidos: 0.5	(59)

	$Z_r$ es una constante		
Holmes	$\rho_v / \rho_g = (1 - \dots)^{1.1} + \dots$ son funciones de Tr y Pr	Hidrocarburos: 1.8	(59)
Gunn y Yanada	$1 / \rho_v = \dots (1 - \dots)^{1.1} / (0.3862 - 0.0866 \dots)$ $\rho_v$ son funciones de Tr	Hidrocarburo: 0.59	(59)
Francis	$\rho_v = A - BT - C/(E-T)$ a temps bajas $(\dots)^{1.1} = C(Tc - T)$ a temps altas A, B, C, E y H son constantes específicas de cada compuesto.	Para todo tipo de sustancias: 0.7	(59)
Harmans	$\rho_v / \rho_g = (0.43875 - 0.625Zc)f(Tr)$ $f(Tr)$ es una función tabular	Hidrocarburos: 0.68	(59)
Bradford y Thodos	$\rho_v / \rho_g = 1 + (2.924 - 7.34Zc)(1 - Tr) - (1.139 - 3.796Zc)(1 - Tr)^2 + (2.785 - 3.544Zc)(1 - Tr)^3$ s = 0.160 + 586Zc	Hidrocarburos: 2.19	(59)
Riedel	$\rho_v / \rho_g = 1 + (1.69 + 0.984 \dots)(1 - Tr)^{1.4} + 0.85(1 - Tr)$	Hidrocarburos: 1.16	(59)
Ehrlich	$\rho_v / \rho_g = 1 - 1 / (1 + \dots)(1 - Tr) = A + 8(1 - Tr) + C(1 - Tr)^2$	Hidrocarburos: 1.30	(59)

A P E N D I C E II.e.

METODOS PARA CALCULAR LA DIFUSION.

Método	Ecuación	Error %	Literatura
(Gas) Wilke y Chung	$D_{1,2} = \frac{0.01858 T^{1.75} (1/M_1 + 1/M_2)^{-0.5}}{P^{1/2} (\sum v_i)^{1.75}}$ $\sum v_i = 5/6 V_c^{1.75}$ $\mu/k = 0.75 T c \quad \rho_{1,2} = f(\mu/k)$	10-40	(1)
Wilke y Lee	$D_{1,2}^0 = 0.00217 - 0.0005 [(M_1 + M_2)/M_1 M_2]^{0.5}$ $\{T^{1.75} [(M_1 + M_2)/M_1 M_2]^{-0.5} / P^{1/2} (\sum v_i)^{1.75}\}$	12.00	(1)
Slattery y Bird	$D_{1,2}^0 = [(2.74 \times 10^{-2}) / P] [(M_1 + M_2) / M_1 M_2]^{1/2}$ $\{P^{1/2} (\sum v_i)^{1.75} (Tc_1 + Tc_2)^{-0.425} + 1.823\}$	7.0	(1)
Chen y Othmer	$D_{1,2}^0 = 0.015 T^{1.75} [(M_1 + M_2) / M_1 M_2]^{1/2}$ $\{P^{1/2} (\sum v_i)^{1.75} (Vc_1^{0.4} + Vc_2^{0.4})\}$	6.8	(1)
Fuller, Shettler y Diddings.	$D_{1,2}^0 = \frac{0.001 T^{1.75} (1/M_1 + 1/M_2)^{1/2}}{P^{1/2} (\sum v_i)^{1.75} + (\sum v_i)^{1/2}}$	4.5	(1)
Euckony (Altas Presiones)	$\frac{D_{1,2}^0}{D_{1,2}^0} = \frac{1}{X}$ $X = 1.0 - 1.31 n^{0.2} + 1.26 (n^{0.2})^2 + 1.06 (n^{0.2})^3$ $n^{0.2} = 0.00735 \rho P / ZT$	10.00	(1)
(Líquido) Wilke y Chang	$D_{1,2}^0 = \frac{1.59 \times 10^{-7} (v_1 M_1)^{0.5} T}{(M_1 / v_1)^{0.5}}$	30-50	(7)
Scheibel	$D_{1,2} = (3.2 \times 10^{-7} T^{1.75}) (1 + (3V/v_2)^2)^{0.5} v_2^{0.5}$	10	(90)
Einstein	$D_{1,2} = kT/6 \pi \eta r$	15	(1)
Othmer y Thakar	$D_{1,2} = 1.4 \times 10^{-7} (v_1^{0.5} M_1^{0.5} / \eta) (H/H_0)$	5	(1)
Sitaram, Ibralum y Kulloor (Solns diluidas)	$D_{1,2} = 5.4 \times 10^{-7} (M_1^{0.5} Hb_1 / v_1^{0.5} Hb_2)$	13.00	(1)

A P E N D I C E II. f.

OTROS MÉTODOS PARA CALCULAR LA ENTALPIA.

Método	Ecuación	Error %	Literatura
(Comp. Puro) Franklin, Vera ma y Doraiswā mi.	$\Delta H = A + BT$	3	(61)
Bennowitz, Ross ner y Dobratz.	$\Delta H = \int (A + BT + CT^2) dT$	6.9	(49)
Sam C. Yuan y Young I. Mok	$\Delta H = \int (A + Be^{-T/T_0}) dT$	0.3	(51)
T.P. Thin y J.L. Duran	$\Delta H = \int (A + BT + CT^2) dT$	0.3	(52)
Erbor, Persin y Watson	Contribución	1	(62)
Handrik	Contribución	2	(63)
(Efecto de Presión.) Bennedic-Webb- Rubin.	$H-H^0 = (\beta_0 RT - 2A_0 + 4C_0 T^{-2}) V^{-1}$ $+ 1/2(2bRT - 3a) V^{-2} + 6/5 a_0 V^{-3}$ $+ CV^{-2} T^{-2} \{3[(1 - e^{-T/T_0})/T_0 V^{-2}]$ $- (1/2 - T_0^{-2}) e^{-T/T_0} V^{-2}\}$	10.0	(1)
Redlich-Kwong	$\Delta H_{0,0} / RT_0 = T_0 (Z_{0,0} - 1) - 3A^* T_0 / Z_{0,0}^*$ $\ln (1 + B^* / Z_{0,0}^*)$	10.0	(31)
Barner y Adler	$-\Delta H / RT_c = T_c (1 - Z) + (1 / RT_c b^*)$ $(\ln [(V - b) / V]) (ab^2 f^2 + cb^2 f^2 +$ $dbf^2 + ef^2) - [1 / RT_c 2b^2 (V - b)^2]$ $(bdf^2 + ef^2) + ef^2 / 3RT_c (V - b)^3$	15.0	(64)
(Mezclas) Brewer y Geist	$H_0 - H_0^0 / RT = 1/V [B_0 - T dB_0 / dT] +$ $1/V^2 [C_0 - T/2 dC_0 / dT] + \dots$	15.0	(65)
Bennedic-Webb- Rubin.	$H = X H^0 + (B RT - 2A_0 - 4C_0 / T) V^{-1}$ $- (2bRT - 3a) / 2 - 6a_0 V^{-2} / 5 + (3C_0 / T^2)$ $[1 - e^{-T/T_0}] / T_0 - e^{-T/T_0} / 6 +$ $CV_0 e^{-T/T_0} / 3 - (1/2)(dC_0 / dT)$	10.0	(66)

A P E N D I C E II-G  
OTRAS CORRELACIONES PARA ESTIMAR LA PRESION DE VAPOR

METODO	ECUACION	ERROR	LITERATURA
a) Ecuaciones Reducidas.-			
FROST-KALKWARF-THODOS	$\log Pr^* = 0.4343 [C - 2 - 0.57817 (z - 2)^{1/4} (1/Tr - 1) + C \log Tr + C \log Tr - 0.1832 (Pr^*/Tr^* - 1)^{1/4}]$ $n = 0.9076(1 + a)$ $a = T_c \ln Pc / (T_c - T_c)$	Región I: 5.5 % Región II: 1.56 %	(36), (1)
RIEDEL	$\ln Pr^* = \ln Tr + 0.0838(z - 3.75) \times [36/Tr - 35 - Tr^2 + 42 \ln Tr]$ $T_c$ se estima como en la correlación de Frost et al.	Región I: 5.3 % Región II: 1.67 %	(1), (12) (36)
MILES-UNWIN	$\log Pr^* = A [1 - 1/Tr^{1.25}]$ $A = \log P_c / [1 - 1/Tr_c^{1.25}]$ Región I: $n = 1.25$ Región II: $n = 1.0$	Región I: 8.9 % Región II: 3.88 %	(36)
KIRCHHOFF	$\log Pr^* = A [1 - 1/Tr]$ $A = T_c \log Pc / (1 - T_c)$	Región I: 40.4 % Región II: 3.20 %	(36), (1)
ANTOINE	$\log Pr^* = (T_c - C) / (T - T_c) \log P_c + (T - T_c) / (T - C)$ $C = -0.3 + 0.034 T_c$ para elementos monoatómicos y todos los materiales con $T_c > 125$ K. $C = -18 + 0.19 T_c$ para las demás.	Región I: 8.5 % Región II: 4.58 %	(36)
MILLER	$\log P = k / Tr^2 [Tr (0.60706 Tr - 1.44779) - 1] Tr - 0.98045$ $k = 1.44779 [Tr - 1 / Tr^2] + 0.60706 Tr - 4 / T \dots (a)$ $k = \log Pc / (1 - 1)$ $l$ o $l$ se obtienen con la ecuación (a) para $T_c$ y $T_c$ respectivamente.	Región I: 12.8 % Región II: 3.06 %	(36)

THEK, STIEL	$\ln Pr = A \cdot 1.14893 - 1/Tr - 0.11719Tr - 0.03174Tr - 0.375 \ln Tr \cdot (1.042 - 0.46284A) - \frac{Tr \cdot \{5.2691 + 2.0753 - 3.1738a\}}{5.2691 + 2.0753 - 3.1738a} - 1$ $a = 0.040 \cdot (1/Tr - 1)$ $A = \frac{1}{RTc} \ln \left( \frac{P_c}{P} \right)$ $a = T \cdot \ln P_c / (1 - T_c)$	Región I: 2.91 Región II: 1.82	(3)
<b>b) Ecuaciones Semirreducidas.-</b>			
MILLER-ERPENBECK	$\log P = A - B/Tr - \log(1-Tr)$ $B = 0.4343 \cdot 1.03 \cdot T_c / (TcR + T_c) \cdot (1 - T_c)$ $A = B/T_c - \log(1 - T_c)$	Región I: 4.0 Región II: No es válida.	(36)
<b>c) Ecuaciones no reducidas.-</b>			
ERPENBECK-MILLER	$\log P = A - B/T_c + \log(1-C_2)$ $B = 0.4343 \cdot 1.03 \cdot T_c / (RT_c \cdot C_2 \cdot (1-C_2))$ $A = B/T_c - \log(1 - C_2)$ $C_2 = T/T_c$ $C = 0.512 + 4.3 \times 10^{-7} T_c \text{ para orgánicos}$ $C = 0.59 \text{ para inorgánicos.}$	Región I: 4.5 Región II: No es válida.	(36)
ANTOINE	$\log P = A - B/(T-C)$ $B = 1/2 \cdot [(T_c - C)^2 - (RT_c \cdot x2.303)]$ $1/2 = 1.046$ <p>Los valores de C son los mismos que se utilizaron en la ecuación reducida de Antoine.</p>	Región I: 5.0 Región II: 9.40	(36)
KIRCHHOFF	$\log P = A - B/T$ $B = 1/2 \cdot (2.303 \cdot ZR) : A = B/T$ <p>Región I: <math>1/2 = 1.093</math></p> <p>Región II: <math>1/2 = 1</math></p>	Región I: 8.6 Región II: 10.8	(36)
MILES-UNWIN	$\log P = A - B/T$ $B = T_c^2 / (2.303 \cdot Z(1.3)R) : A = B/T$ $1/2 = 1.05$	Región I: 6.6 Región II: 13.4	(36)

d) Métodos misceláneos.-			
HARLACHER	$\ln Pr^* = B' \left[ \frac{1}{Tr} \right] - (E - B) \ln Tr + 0.4218 \left[ \frac{Pr^*}{Tr} - 1 \right]$ $B = 6.545986 + (8.30918 \times 10^{-3}) P^* + 8.87139 - (5.586785 \times 10^{-7}) P^* + (5.173538 \times 10^{-11}) P^* x_{11} - 3.0657$ $E = -4.14342 + (1.13843 \times 10^{-7}) P^* - 4.079 - (1.223881 \times 10^{-11}) P^* + (1.2214605 \times 10^{-11}) P^* - 1.34806$ <p><math>P^*</math> = paracoro</p>	<p>Si se determinan los valores de E y B por medio de tablas el error es menor al 1% para todo tipo de sustancias desde presiones de 10 mmHg hasta <math>P/Pr = 0.99</math></p> <p>Los valores de esas variables evaluados por las ecuaciones pueden derivar errores para <math>P^*</math> entre 5-20% en algunos casos.</p>	(3)
HALM-STIEL	$\log Pr^* = f_1(Tr) + f_2(Tr) + x f_3(Tr) \dots (b)$ $x = \log Pr^*(\theta Tr = 0.6) - \log Pr^*(\theta Tr = 0.6)$ <p><math>Pr^*(\theta Tr = 0.6)</math> se calcula con la ecuación (b) a <math>Tr = 0.6</math>.</p> <p><math>Pr^*</math> es la Presión de vapor reducida de un fluido "normal", se evalúa por medio de la ecuación (b) utilizando los dos primeros términos a <math>Tr = 0.6</math>.</p> <p><math>f_1</math> y <math>f_2</math> son funciones de la temperatura.</p>	Muy buenos resultados.	(3)
OTHMER	<p>Método basado en el empleo de sustancias de referencia.</p> $d(\ln P^*) = \left( \frac{1}{P^*} \right) \left( \frac{dP^*}{dTr} \right) d(\ln P^*)$ <p>Integrando: <math>\ln P^* = m \ln P^* + C</math></p> <p>Para evaluar m y C es necesario conocer por lo menos 2 presiones de vapor de un compuesto o una <math>P^*</math> y el calor latente de vaporización, además las propiedades de la sustancia de referencia.</p>	De notable exactitud.	(63)
PITZER	$\log Pr^* = (A \log Pr^*) + (B \log Pr^*)$ $(A \log Pr^*) = C - 1.1928$ $(B \log Pr^*) = 4.938$ $C = 21 \log Tr - 0.1134$ $B = \log Tr - 0.0354A$ $A = 36/Tr - 35 - Tr + 96.73 \log Tr$	2.5% si se usa para compuestos no polares, a temperaturas reducidas mayores a 0.75.	(7)



A P E N D I C E II-H

OTRAS ECUACIONES PARA EVALUAR LA TENSION SUPERFICIAL

METODO	ECUACION	ERROR	LITERATURA
Original de EOTVOS	$k (T_c - T)/V$ <p>k = constante específica de c/material.  V = volumen molar del líquido</p> <p>a) Modificación de Ramsey-Shields  <math display="block">k (T_c - T - 6)/V</math></p> <p>b) Variación de Van der Waals  <math display="block">k T_c^{1.5} P^{0.5} (1 - Tr)^{-1}</math></p> <p>k y n son supuestamente constantes universales.</p>		(1)
ESTADOS CORRESPONDIENTES.	$P/P_c = T/T_c^{0.7} (0.133 - 0.281)(1 - Tr)^{1.1}$ <p>factor de Riedel.</p>	Orgánicos: 3 No aplicable a compuestos polares, H <sub>2</sub> y H <sub>2</sub> O.	(1)
PARACORO de SUGDEN	$P^* (1 - \mu) / M^{0.5}$ $\log \mu = 5 T/T_c - 1$ $\mu = M/82.06T$ <p>P* = paracoro.</p>	Orgánicos: -1.1	(1), (12)
COMPRESIBILIDAD ISOTERMICA	$z = (k/T_c)^{-0.5}$ <p>z = compresibilidad isotérmica.  k = constante que se estima por un valor de z y T<sub>1</sub>, ambos tomados a la misma temperatura.</p>	Orgánicos: -- 0.44	(12)
RAO-RAO	<p>1. <math display="block">z = (A/z_c)^{-0.5}</math></p> <p>A y Z se obtienen por 2 valores de z y T<sub>1</sub> tomados a la misma temperatura.</p> <p>2. <math display="block">z = (2.13 \times 10^{-4} / z_c)^{-0.5}</math></p> <p>z = compresibilidad isotérmica.</p>	Orgánicos: -- 0.22	(12)
INDICE DE REFRACCION	$C (T - 1) / (T - 2)^{0.5}$ <p>C = índice de refracción.  C se determina por un valor de z y T<sub>1</sub> obtenidos a temperaturas iguales.</p>	Orgánicos: -- 6.3 Inorgánicos: -2.5	(1), (12)

<p>DENSIDAD-PRESION DE VAPOR</p>	<p><math>\log P = 0.567T - 4.795 + \log(T/760P) + M/V_1</math></p> <p>P y <math>V_1</math> deben estar a las mismas condiciones de temperatura que <math>V_2</math>.</p>	<p>Orgánicos: 3.9 % Inorgánicos: 25.7 %</p>	<p>(12)</p>
<p>POPEL', PAVLOV y ESIN</p>	<p>1. <math>\log P = 0.31 RT \ln V_1/V_2 - DP^0 (V_1 - V_2) / (N^0 V_1^0)</math></p> <p><math>R = 8.3144 \times 10^7 \text{ erg}/(\text{g-mol})(K)</math></p> <p><math>DP^0 = 1.01325 \times 10^6</math></p> <p><math>N^0 = 6.02 \times 10^{23}</math></p> <p><math>V_1</math> se estima por:</p> <p><math>\log 82.06 T_2/V_1 = 5(T_2/T_1 - 1)</math></p> <p><math>V_1, V_2, P^0</math> y <math>\rho</math> son calculadas a una sola temperatura.</p> <p>2. <math>\log P = 0.31 RT (\ln  1 + (RT \sqrt{1 - (Pr^0/Tr^0)^2}  / (DP^0 V)) - \sqrt{1 - (Pr^0/Tr^0)^2} / N^0 V_1^0 x^{2/3})</math></p>	<p>Orgánicos: 13.2 % Inorgánicos: 33.3 %</p> <p>Orgánicos: 2.5 %</p>	<p>(12)</p>
<p>PACHAIYAPPAN, --- IBRAHIM y KULDOOR</p>	<p><math>\log P = C(M)^n</math></p> <p>C y n son constantes particulares para cada grupo funcional.</p> <p><math>\log P = \log P_1 + n \log [(1 - Tr)/(1 - Tr_1)]^{1/2}</math></p>	<p>2.65 %</p> <p>Sólo para compuestos no polares.</p>	<p>(69)</p>
<p>RAMANA RAO-REDDY y SASTRI</p>	<p><math>\log P = a' - [b' f(T)]</math></p> <p><math>a'</math> y <math>b'</math> son constantes especiales de compuestos homólogos.</p> <p><math>f(T) = (T - T_c)^2 / (T_c - T_c)^2</math></p> <p><math>\Delta</math> se obtiene por contribución de grupos</p> <p>Para cualquier temperatura:</p> <p><math>\log P = \log P_c + m(T - T_c)/(T_c - T_c)</math></p> <p><math>m = 11/9</math></p> <p><math>T_c</math> es la tensión superficial a una temperatura <math>T_c</math> conocida.</p>	<p>3.5 %</p> <p>4.5 %</p>	<p>(70)</p>
<p>BONNET y PIKE</p>	<p><math>\log P = a + bT + cT^2</math></p> <p>a, b y c son constantes exclusivas de cada compuesto obtenidas por el ajuste de valores experimentales por el método de mínimos cuadrados.</p>	<p>Los errores observados son mínimos</p>	<p>(71)</p>

A P E N D I C E II.  
OTROS METODOS PARA CALCULAR LA VISCOSIDAD.

Método	Ecuación	Error	Literatura
(Gas) Chapman-Enskog	$\mu = 2.569 \times 10^{-4} \frac{MT}{\sqrt{M}} f(kT/\epsilon)$ $\epsilon/k = 0.75 T_c, \quad \epsilon = 0.841 V_c^2$	2	(1)
Bromley-Wilke  Mét. de Edos. Correspondientes	$\mu = \frac{(0.00333(MT_c)^{1/2} f(1.33T_c)/V_c^2 + f(1.33T_c))}{f(kT/\epsilon)}$  No polares $\mu = \frac{T_c^2}{M} \frac{P_c}{V_c} \left[ 34 \times 10^{-4} T_c^{-1.5} - 17.78 \times 10^{-4} (4.85T_c - 1.67) T_c^{-1.5} \right]$	5  1.8	(1)  (72)
Con ligadura de H. Sin ligadura de H.	Polares. $T_c \geq 2.0$ $\mu = (7.55T_c - 0.55) \times 10^{-4} \times Z_c^{-1}$ $\mu = (1.09T_c - 0.29) \times 10^{-4} \times Z_c^{-1}$	3.2	(1)
Arnold	$\mu = \frac{27 M^{1/2} T}{V (T - 1.47T_c) \times 10^4}$	5-15	(73)
Hirschfelder, Bird y Spotz	$r = 1.18 V$ $\epsilon/k = 0.77 T_c$ $I = 0.25277 - 0.28345 (T_k/\epsilon)^{-1}$ $- 0.30566 (T_k/\epsilon)^{-2} - 0.16963 (T_k/\epsilon)^{-3}$ $- 0.19647 (T_k/\epsilon)^{-4} - 0.20887 (T_k/\epsilon)^{-5} - 0.05473 (T_k/\epsilon)^{-6}$ $(6.46 \times 10^{-4} (MT_c)^{-1/2} I) / r$	3	(74)
Sutherland	$\mu T_c^{-1/2} / (S - T_c)$	1.5	(1)
(Líquido) Andrade	$A e^{-B/T}$	5	(40)
Thomas	$0.1667 (T_c)^{-1} \times 10^4$	30-50	(2)
Sonder	$\log(\mu) = \log(\mu_c) - 2.9 \log(T/T_c)$	10-20	(1)

A P E N D I C E II. J.  
METODOS PARA EVALUAR LAS PROPIEDADES CRITICAS.

Método	Ecuación	Error	Literatura
<u>(TC)</u> Regla de Guldber modificada.	$T_c = T /$	1-2	(75)
Forman-Thodos.	$T = 8a/27 - bR$	1	(76)
A partir de Tensión superficial	$\dots a \cdot (1 - T/T_c)^{0.5} y$ $\dots / \dots ((T - T_c)/(T - T_c))$	2.5	(77)
A partir de Densidad de líquidos	$T = \frac{T_c - T_c}{(\dots)^{0.5} - 1} - T_c - 6 \cdot 3$		(78)
A partir de Presión de vapor	$T_c = B/(0.5643C - 1.452)$	1	(79)
Gates y Thodos.	$T_c = 1.47 T_c$	1.4	(30)
<u>(PC)</u> Riedel	$P = M/(\dots - 0.34)$	3.3	(31)
Forman-Thodos	$P = a/27 - b$	1	(75)
<u>(VC)</u> Lydersen	$V = 40 \dots$	2.3	(32)
A partir de ZC	$V = Z_c RT_c / P$	3.6	(33)
<u>(Zc)</u> Lydersen	$Z = 1/((3.43)(6.7)(10^{-1}))$ $(H \dots)$	3.1	(34)
García-Bárcena	$Z = f(T_c) - g(T_c/M) y$ $Z = 0.293 - \dots Z$	2	(33)

A P E N D I C E II-K

CLASIFICACION DE LAS PRINCIPALES ECUACIONES DE ESTADO DE ACUERDO AL-  
NUMERO DE CONSTANTES QUE INVOLUCRAN.

Se mencionarán a continuación las mejores ecuaciones de estado contentándose soberanamente respecto a sus limitaciones y, en algunos casos, su por ciento de confiabilidad.-

Primeramente se enuncia su formulador, después la correlación en su forma general, luego la discusión pertinente y finalmente la literatura de donde se obtuvo la información.

<u>Ecuaciones de 2 constantes:</u>			
METODO	ECUACION	ERROR	LITERATURA
Van der Waals	$(P + a/v^2)(v - b) = RT$	Posee poca aproximación a elevadas densidades.	(23),(37) (1)
Bethelot	$P = RT/(v-b) - a/TV^2$	No produce valores confiables.	(37),(1)
Dieterici	$P = RT/(v-b) \exp[-(aTc^{1/2}/VRT^{3/2})]$	Es de las ecuaciones de dos parámetros constantes más exactas.	(37),(1)
Redlich-Kwong	$P = a/T^{1/2} v(v+b)(v-b) = RT$	Es la mejor ecuación de este tipo para altas presiones.	(1),(3), (28)
<u>Ecuaciones de 3 constantes:</u>			
Wohl	$P = a_1/v(v-b) - a_2/v^2(v-b) = RT$	Ligeramente más exacta que las de dos constantes, pero falla a altas densidades.	(88), (1)
<u>Ecuaciones de 4 constantes:</u>			
MacLeod	$(v - b') = RT$ $b' = b(1 - B - C)$ $P = a/v$	Da muy buenas aproximaciones.	(1)
<u>Ecuaciones de 5 constantes:</u>			
Beattie-Bridgeman	$Pv = RT/v + B(1 - b/v) (1 - c/vT) - A(1 - a/v)$	Contribuye a altas presiones, pero al rebasar la densidad crítica disminuye su precisión, lo mismo sucede a temperaturas reducidas inferiores a 1.0.	(1),(23), (85)
<u>Ecuaciones que utilizan más de 5 constantes:</u>			

<p>Benedict-Webb y Rubin</p>	$P = RT_c + (B \cdot RT_c - A_c - C_c/T_c^2) \rho^2 + (bRT_c - a_c) \rho^3 + a_{2c} \rho^4 + (c_0 \rho^2/T_c^2)(1 + \gamma_c \rho^2) \exp(-\gamma_c \rho^2)$	<p>Una de las mejores ecuaciones de estado para predecir las propiedades termodinámicas y de fase de hidrocarburos ligeros puros y mezclas. Para <math>Tr &gt; 0.6</math> y <math>\rho^* &lt; 2.0</math> su porcentaje de errores del 1% en la estimación de densidades de líquidos y gases.</p>	<p>(5), (2), (66), (1), (3)</p>
<p>Hirschfelder-Buehler-McCee y Sutton</p>	<p>Establece una división por regiones:</p> <p>a) Región I.- Para cualquier <math>T</math> y <math>\rho \leq 1</math>:  <math display="block">P/Tr_c = -w_1(Tr)^{2.16} - w_2(Tr)^{1.5} + g(\rho_c)</math></p> <p>b) Región II.- Para <math>Tr &gt; 1</math> y <math>\rho \leq 1</math>:  <math display="block">P/Tr_c = -w_1(Tr)^{2.16} - w_2(Tr)^{1.5} + f + s(\rho_c - 1) / \rho_c + D(\rho_c, Tr)</math></p>	<p>Para valores de <math>Tr &gt; 1</math> los resultados son excelentes. Evalúa propiedades P-V-T y termodinámicas aplicables tanto a la fase gaseosa como a la líquida. Esta ecuación y la de Martin-Hou son las más exactas.</p>	<p>(4), (2), (86), (1), (7)</p>
<p>Martin-Hou</p>	$P = \sum_{i=1}^5 f_i (V - b)^{-i}$ <p>f. <math>A_c + B T_c + C_c \exp(k_c T_c/T_c)</math></p>	<p>Es una correlación producto de un estudio extraordinariamente cuidadoso de las propiedades de los gases reales. Para condiciones donde <math>Tr &gt; 1</math> los errores esperados no son mayores del 1%.</p>	<p>(2), (87), (1)</p>

Ecuaciones Viriales.- Consideran las fuerzas intermoleculares por el método de la mecánica estadística en la representación de las relaciones P-V-T en función de las constantes que se conocen con el nombre de coeficientes viriales.

Estas ecuaciones son esencialmente exponenciales en  $1/V$  o en P. La forma virial es lo más satisfactorio de que se dispone actualmente, sin embargo, es imposible tratar de resolverlas mediante termodinámica estadística cuando las constantes son más de dos. Son fundamentalmente semiempíricas ya que las constantes han sido determinadas utilizando datos experimentales.

Estas correlaciones están ejemplificadas por las ecuaciones de Kammerlingh-Onnes y de Holborn:

$$PV = RT \left[ 1 + \frac{B}{V} + \frac{C}{V^2} + \dots \right] \quad \text{Kammerlingh-Onnes}$$

$$PV = RT [ 1 + B'P + C'P^2 + \dots ] \quad \text{Holborn}$$

A presiones muy bajas sólo el primer coeficiente es significativo y es igual a RT, pero a temperaturas mayores los restantes son también importantes y deben tomarse en cuenta. Los coeficientes son constantes para una temperatura pero son función de la misma. El primero de ellos es siempre positivo, el segundo es negativo a temperaturas bajas, pasa por el valor cero y se hace positivo y creciente cuando la temperatura aumenta.

Si utilizamos un número suficiente de términos esta ecuación satisface valores experimentales con gran precisión.

# B I B L I O G R A F I A

---

- 1.- Reid, R. C., y Sherwood, T. K., "The Properties of Gases and Liquids", Second Edition, Mac Graw-Hill Book Co., Inc., New York, 1966.
- 2.- Frith, K. M., Chem. Eng., Vol. 79, Febrero 21 de 1972, P. 72.
- 3.- Reid, R. C., y Evans, L. B., "Property Prediction with Computer Systems. Design Data for Industry", AIChE Today Series, New York, 1970.
- 4.- Evans, L. B., "Computer Systems for Estimation and Retrieval of Physical Properties", Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts, Junio 21 - Julio 1, 1971.
- 5.- Klaus, R. L., y Motard, R. L., "Design for a Physical Property-Information System for Undergraduate Education", St. Louis AIChE Meeting, CACHE Symposium, Mayo 24, 1972.
- 6.- Perry, J. H., "Chemical Engineers' Handbook", Fourth Edition, - Mac Graw-Hill Book Co., Inc., New York. 1963.
- 7.- API (American Petroleum Institute) "Technical Data Book", Petroleum Refining Washington D.C., Tomos I, II. 2a. Ed. 1970
- 8.- International Critical Tables of Numerical Data Physics, Chemistry And Technology, National Research Council of U.S.A. Ed. McGraw-Hill Book Co. Inc., N.Y. 1<sup>a</sup> Ed. Vol. I a 7, 1926.



- 9.- Lange, H., "Handbook of Chemistry", 10th. Edition, Mac Graw-Hill Book Co. Inc., New York, 1961.
- 10.- Hodyman, C. D., "Handbook of Chemistry and Physics", 53rd. Edition, Chemical Rubber Publishing Co., Cleveland, Ohio, 1972-73.
- 11.- Gallant, R. W., "Physical Properties of Hydrocarbons", Hydroc. Proc., Artículos desde Julio de 1965 hasta abril de -- 1970.
- 12.- Gold, P. I., y Oyle, G. J., "Thermophysical Properties of Liquids", Chem. Eng., Artículos desde octubre 7 de 1968 hasta sep tiembre 8 de 1969.
- 13.- Guthiere, Spitzer-y-Huffmann; J. Am. Chem. Soc., 66,2120-1 (1968)
- 14.- Thinh, T.P., Duran, J. L. y Ramalho, R.S. Hydroc. Proc., Enero-1971 p. 98
- 15.- Lydersen, A. L.: "Generalized Thermodynamics Properties of. Pure Fluids". Coll. Eng. Univ., Wisconsin, Eng. Expt. Sta.- Rept. 4, Madison, Wis., Octubre, 1955
- 16.- Weiss, A. H.: Ind. Eng. Chem. Fundamentals., 4:328 (1965)
- 17.- Gambill, W. R.: Chem. Eng., 64 (9): 267 (1957)
- 18.- Edmister, W. C.: Petrol. Refiner, 27 (ii): 609 (1948)
- 19.- Sherwood, T. K.: J. Chem. Eng. Data, 7:47 (1962)
- 20.- Yuan, S. C. y Young, I. M.: Hydroc. Proc., 3(47):133, Agosto -- 1968
- 21.- Johnson, D. W., y Colver, C. P., "Mixture Properties by Computer", Hydroc. Proc., Artículos desde diciembre de 1968 hasta marzo de 1969.
- 22.- Saltzman, B. E.: Ind. Eng. Chem., 50:1593 (1958)
- 23.- Hougen, O. A., Watson, K. M., y Ragatz, R. A., "Principios de - los Procesos Químicos", Tomo II, Ed. Reverté, S. A., - 1964, Madrid, pp. 569
- 24.- Pachaiyappan, V.: Chem. Eng.: Octubre 9, 1967, pp. 241
- 25.- Coleman, C. F. y T. de Vries.: J. Am. Chem. Soc. 71:2839 (1949)
- 26.- Dreisbach, R. R., "Physical Properties of Chemical Compounds", - Vols. I, II y III, ACS, Washington, D. C., 1955.
- 27.- Timmermans, J., "Physico-Chemical Constants of Pure Organic --- Compounds", American Elsevier, New York, 1950; Vol. 2, 1965.

- 28.- Redlich, O. y Kwong, J. N. S., Chem Rev., 44,233 (1949).
- 29.- Cheuh, P. L. y Prausnitz, J. M., Ind. Eng. Chem. Fund., 6,492- (1967).
- 30.- Cheuh, P. L. y Prausnitz, J. M., AIChE J., 13, 1099 (1967).
- 31.- Redlich, O., Ackerman, F. J., Gunn, R. D., Jacobson, Max y Silvanus Lau, Ind. Eng. Chem. Fund., 4,369 (1965).
- 32.- Gray, R. D., Rent, N. H. y Zudkevitch, D., Preprint 58 D, 64th. National Meeting, AIChE, New Orleans, La., Marzo --- 16-20, 1969.
- 33.- Yen, L. C., y Woods, S. S., AIChE J., 12,95 (1966).
- 34.- Fishtine, S. H., Hydroc. Proc., 45(4), 173 (1966).
- 35.- Procopio, J. M., y Gouq. Jen Su, Chem. Eng. Junio 3, 1968, p. 104.
- 36.- Miller, D. F., Ind. Eng. Chem., 56(3). 46(1964).
- 37.- Hirschfelder, J. C. et al., "Molecular Theory of Gases and Liquids", John Wiley and Sons, New York, 1954.
- 38.- Chapman y Cowling, "The Mathematical Theory of Non-Uniform --- Gases", Cambridge University, Press London, 1939, -- (223, 225).
- 39.- Phillip I. Gold And Gilbert I. Ogle: "Estimating Thermophysical Propierties of Liquids". Part. 10 - Viscosity. Chemical Engineering, Julio 14, 1969 (121).
- 40.- Jagannathan, T. K. y Viswanath, D. S. "Predict Organic Liquid-Viscosity", Hydroc. Proc., Febrero de 1968. Vol. 47- (133).
- 41.- Robbins, A., y Kingrea, C. L., Hydroc. Proc., Vol. 41, Mayo de - 1962, No. 5 (133).
- 42.- Scheibel, E. G., Ind. Eng. Chem., 45(9). 2007 (1954).
- 43.- Schmidt, A. A., y List, H. L., "Material and Energy Balances"., Prentice-Hall. Second Printing, Englewood, N. J., 1965.
- 44.- Welty, J. R., Wicks, C. E., y Wilson, R. E., "Fundamentals of- Momentum, Heat and Mass Transfer", John Wiley and -- Sons, Inc., USA, 1969.
- 45.- Narsimhan, G., Brit. Chem. Eng., 12(6), 897 (1967).
- 46.- Mathur, B. C., y Kuloor, N. R., Hydroc. Proc., Febrero de 1971, p. 106.

- 47.- Ibrahim, S. H., y Kuloor, N. R., Chem. Eng., Diciembre 5, 1966, p. 147.
- 48.- Bradford, M. L., y Thodos, G., J. Chem. Eng. Data, 12(3),373-- (1967).
- 49.- Allen, T. L., J. Chem. Phys., 31, 1039 (1959).
- 50.- Stull, D. R., y Mayfield, F. D., Ind. Eng. Chem., 35, 639(1943).
- 51.- Yuan, S. C., y Mok, Y. I., Hydroc. Proc., Marzo 1968, (47)3.
- 52.- Thin, T. P., y Duran, J. L., Hydroc. Proc., Enero 1971, p. 98.
- 53.- Souders, M., Ind. Eng. Chem., 41, 1037 (1949).
- 54.- Hughes, A. M., J. Am. Chem. Soc., 61, 2639 (1939).
- 55.- Yuan, T. F., Manuscrito emitido por el Ind. Eng. Chem. Fund.
- 56.- Tamplin, W. S., Hydroc. Proc., 8(46), p. 145.
- 57.- Pachaiyappan, V., Chem. Eng., Octubre 9, 1967, p. 241.
- 58.- Liley, M. C., Chem. Eng., Abril 16, 1973.
- 59.- Spencer, C. F., y Danner, R. P., J. Chem Eng. Data., 2, 236 - (1972).
- 60.- Goyal, P., y Doraiswamy, L. K., Hydroc. Proc., 45(6), 200(1966).
- 61.- Cottrell, T. L., J. Chem. Soc., 1948: 1448 (44).
- 62.- Anderson, J. W., Natl. Petrol. News Tech. Soc., 36: R476,1944.
- 63.- Handrik, G. R., Ind. Eng. Chem., 48, 1366(1956).
- 64.- Barner y Adler, Paper, Press. to the 159th. Nat. Meeting. ACS, Houston, Tex., Febrero de 1970.
- 65.- Brewer, y Geist, J. Chem. Eng. Data, 6, 405(1961).
- 66.- Benedict, M., Webb, G. B., y Rubin, L. C., J. Chem. Phys., 8, 334 (1940).
- 67.- Benedict, M., Webb, G. B., Rubin, L. C., y Friend, L., Chem. - Eng. Prog., 47, 419, 449, 571, 601 (1951).
- 68.- Othmer, D. F., y Ert-Sheen Yu, Ind. Eng. Chem., 60(1),22(1968).
- 69.- Pachaiyappan, V., Ibrahim, S. H., y Kuloor, N. R., Chem Eng., - Octubre 23, 1967, p. 172.

- 70.- Ramana Rao, M. V., Reddy, K. A., y Sastri, S.R.S., Hydroc. Proc., 47(1), 151(1968).
- 71.- Bonnet, J. C., y Pike, F. P., J. Chem. Eng. Data, 17(2), 145 - (1972).
- 72.- Whailey, E., Can. J. Chem., 32, 485(1954).
- 73.- Arnold, J. Chem. Phys., 1, 170(1933).
- 74.- Hirschfelder, Bird y Spatz, Chem. Eng., Febrero 21, 1972.
- 75.- Riedel, L., Chem. Ind. Tech., 24, 353(1952).
- 76.- Forman, J. C., y Thodos, G., AIChE J., 6, 206(1960).
- 77.- Guggenheim, E. A., J. Chem. Phys., 13, 253(1945).
- 78.- Fishtine, S. H., Ind. Eng. Chem. Fund., 2, 149(1963).
- 79.- Stiel, L. I., y Thodos, G., Chem. Eng., 40, 253(1962).
- 80.- Gates, D. S., y Thodos, G., AIChE J., 6, 50(1960).
- 81.- Riedel, L., Z. Elektrochem., 53, 222(1949).
- 82.- Lydersen, A. L., University of Wisconsin, Abril 1955.
- 83.- García-Bárcena, Thesis, Institute of Technology, 1958.
- 84.- Shuster, F., Z. Elektrochem., 32, 191(1926).
- 85.- Beattie, J. A., y Bridgeman, O. C., J. Am. Chem. Soc., 49, 1665 (1927).
- 86.- Hirschfelder, J. O., Buehler, R. J., Mc Gee, H. A., y Sutton, J. R., Ind. Eng. Chem., 50, 375(1958).
- 87.- Martin, J. J., y Yu-Chun Hou., AIChE J., 1, 142(1955).
- 88.- Gambill, W. R., Chem. Eng., 66(21), 195(1959).
- 89.- Anderson, H. W.: M. S. Thesis, URCL-3152. Univ. of Calif.,---- Berkeley Calif., Enero 1958.
- 90.- Ind. & Eng. Chem. Sept. 1954(2007)