

15
24

RECIBO
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES
ZARAGOZA
1995



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES
ZARAGOZA**

**EVALUACION DE PROPIEDADES TERMOFISICAS
Y DE TRANSPORTE VIA PRINCIPIOS DE
ESTADOS CORRESPONDIENTES (P.E.C.)**

T E S I S

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

**GARCIA DIAZ TEODORO GERMAN
HILARIO NUÑEZ RAMON
MARTINEZ GARCIA GUILLERMO**

**ASESOR:
ING. JOSE ANTONIO GONZALEZ HERNANDEZ**



MEXICO, D. F.

1995

FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL
AVENIDA DE
MEXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS
SUPERIORES *ZARAGOZA*

JEFATURA DE LA CARRERA
DE INGENIERIA QUIMICA

OF/JU/082/034/95

SRES. TEODORO GERMAN GARCIA DIAZ
RAMON HILARIO NUÑEZ y
GUILLERMO MARTINEZ GARCIA,
P R E S E N T E.

En respuesta a su solicitud de asignación de jurado para el -
Examen Profesional, le comunico que la Jefatura a mi cargo ha
propuesto la siguiente designación:

PRESIDENTE: ING. EDUARDO VAZQUEZ ZAMORA
VOCAL: ING. SALVADOR GALLEGOS RAMALES
SECRETARIO: ING. JOSE ANTONIO GONZALEZ HERNANDEZ
SUPLENTE: ING. RAFAEL SANCHEZ DIRZO
SUPLENTE: ING. JOSE BENJAMIN RANGEL GRANADOS

A T E N T A M E N T E
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"
México, D.F., 17 de mayo de 1995


ING. JOSE BENJAMIN RANGEL GRANADOS
JEFE DE LA CARRERA

Irm

Para ustedes Jorge Valencia Alegría y Remedios:

Por la enseñanza del camino del bien y honrado, por el gran apoyo para cumplir una meta fijada, por el cariño y la paciencia mostrada a lo largo del camino.

Esto es la culminación de la obra que ustedes iniciaron.

A mis abuelitos:

Gracias por sus oraciones y bendiciones para que Dios iluminara este camino.

A mi padre:

Gracias por el gran apoyo que me dieron a lo largo de este camino para cumplir con una de mis principales metas.

A mi esposa:

Por su apoyo y paciencia mostrada para la culminación de este trabajo.

A mis compadres Guillermo y Teodoro:

Por la paciencia mostrada y su esfuerzo para la culminación de este trabajo.

Al Ing. José Antonio González:

Por su paciencia y continuo apoyo para que llegase a su fin este trabajo.

Y a todos mis amigos:

Gabriel, Germán, Martín, Juan Manuel y Javier.

MUCHAS GRACIAS.

Ramón Hilario Niñez

A la Facultad de Estudios Superiores "Zaragoza" por haberme dado la oportunidad de formarme en ella.

Al Ing. José Antonio González:

Por la ayuda, paciencia y todos los consejos que me otorgó, los cuales fueron de gran importancia para darle forma a esta Tesis Profesional.

A mis padres y a mis hermanos:

Quiénes me dieron todas las facilidades y me impulsaron a continuar siempre adelante en mi preparación profesional. Gracias por su cariño, apoyo y comprensión.

A Adila:

A quien agradezco su comprensión y sobre todo el amor que me brinda día con día.

Guillermo Martínez García

Agradezco a Dios:

Por permitirme alcanzar un objetivo más en mi vida y sobre todo por la fe que tengo hacia El.

A mi madre:

A quien dedico este trabajo, ya que gracia a sus buenos consejos y a la confianza que me ha brindado, he terminado una etapa más.

A mi sobrina Erenice:

Por el tiempo que no te dediqué durante el desarrollo de este trabajo.

A mis hermanos Nicolás y Rey:

Por sus esfuerzos y apoyo que me brindaron durante mi carrera profesional.

A mi novia Esther:

Por su dedicación y tiempo para el término de este trabajo, también gracias por su cariño y paciencia hacia mí.

Al Ing. Pedro Brutista Santiago:

Zulen por sus orientaciones me ha enseñado a superarme en mi vida personal y profesional. (Cosas, que sólo se aprenden en la escuela de la vida).

Al Ing. José Antonio González:

Zue gracias a su paciencia mostrada y su buena orientación pudimos terminar este trabajo.

*A mis amigos y compadres Guillermo y Rambo:
Quienes juntos hemos logrado no sólo un proyecto, sino
una gran amistad y una unión que nos ha enseñado
muchas cosas.*

*Y a todos mis amigos:
Gabriel, Juan Manuel, Germán, Martín y Graciela.*

MUCHAS GRACIAS.

*La suprema recompensa del trabajo no
consiste en lo que te permita ganar, sino
en que te permita llegar a ser.*

Teodora G. García Díaz

***EVALUACION DE PROPIEDADES
TERMOFISICAS Y DE TRANSPORTE
VIA EL PRINCIPIO DE ESTADOS
CORRESPONDIENTES (P.E.C.)***

**TEODORO GERMAN GARCIA DIAZ
RAMON HILARIO NUÑEZ
GUILLERMO MARTINEZ GARCIA**

INDICE

<i>Introducción</i>	1
CAPITULO 1	
<i>Generalidades.</i>	4
CAPITULO II	
<i>Propiedades</i>	29
CAPITULO III	
<i>Tablas de resultados y análisis de resultados.</i>	49
CAPITULO IV	
<i>Conclusiones y recomendaciones</i>	60
APENDICE "A"	
<i>Programa de cómputo.</i>	63
<i>Bibliografía</i>	134

INTRODUCCION

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

A través de los años se han recopilado y ordenado una enorme cantidad de dichos datos, pero el rápido avance tecnológico en nuevos campos parece mantener siempre un adelanto entre la demanda de datos básicos y su determinación experimental.

En la bibliografía especializada se ha presentado un gran número de métodos para la estimación de propiedades termofísicas y de transporte de los fluidos, éstos han sido sujetos de una revisión crítica por parte de distintos autores en cuanto a los diferentes procedimientos de cálculo para un determinado número de propiedades de gases y líquidos.

En vista de lo antes mencionado, resalta la necesidad de elaborar un sistema de cálculo rápido, preciso 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.

Consecuentemente, en este trabajo se diseña un sistema capaz de manipular una gran cantidad de información para ser aplicada a correlaciones que utilizan el Principio de Estados Correspondientes (P.E.C.) y, que proporcione resultados más acordes con la realidad minimizando el tiempo de cálculo y la información que se le ha de suministrar, para lograr estos propósitos se han planteado los siguientes objetivos:

- a) Efectuar una búsqueda bibliográfica de los diversos métodos para la predicción de propiedades termodinámicas, físicas y de transporte vía el P.E.C.*
- b) Analizar el origen, ventajas y desventajas del P.E.C.*

- c) *Determinar cual de todos los métodos analizados son los más adecuados para la evaluación de las propiedades termodinámicas, físicas y de transporte via el P.E.C.*
- d) *Desarrollar un programa de cómputo para la evaluación de las propiedades termodinámicas, físicas y de transporte de una forma dinámica, exacta y de fácil manejo.*
- e) *Analizar el alcance y limitaciones de los diferentes métodos del P.E.C. de acuerdo a la evaluación de las distintas propiedades comparando sus resultados con datos experimentales.*

Por lo que en el presente trabajo, el capítulo I describe el origen del P.E.C. y su importancia en la estimación de propiedades termodinámicas, físicas y de transporte.

El capítulo II se concreta a dar una breve definición de las propiedades evaluadas así como los métodos empleados, rangos de aplicación y grado de confiabilidad.

En el capítulo III se presenta el análisis de resultados en base a los datos experimentales reportados en la bibliografía especializada.

Además, el capítulo IV contiene las conclusiones obtenidas en la realización de este trabajo así como algunas recomendaciones o sugerencias que especifican claramente el procedimiento que debe seguirse para utilizar con eficacia el programa de cómputo.

Y finalmente se agrega el apéndice "A" en el cual se desarrolla un programa de cómputo para la evaluación de Propiedades Termodinámicas, Físicas y de Transporte via el PEC procesado en lenguaje FORTRAN, contemplando los métodos de evaluación previamente seleccionados.

I. GENERALIDADES

La tarea de resolver problemas termodinámicos referentes a la evaluación de propiedades termodinámicas, físicas y de transporte puede resultar muy tediosa si no se dispone de la información necesaria para todos los fluidos. Así pues, nos ocuparemos aquí del Principio de Estados Correspondientes (P.E.C.), como una herramienta muy útil para la predicción de estas propiedades con base en correlaciones de propiedades generalizadas, basadas en datos experimentales disponibles respecto a fluidos similares.

El P.E.C. es la más poderosa generalización sobre el comportamiento termodinámico de fluidos; la mayor parte de las correlaciones de aplicación práctica están fundamentadas, de una forma u otra, en extensiones de este principio.

El P.E.C. se originó en el trabajo publicado por Van der Waals, en 1873, en donde aparece por primera vez su famosa ecuación de estado.

Considerándola de la siguiente manera:

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2} \right) (V - nb) = nRT \dots (1)$$

Para el caso de $n = 1$ (esto es, para un mol de gas) adopta la forma:

$$\left(P + \frac{a}{V^2} \right) (V - b) = RT \dots (2)$$

despejando P , tenemos:

$$P = \frac{R T}{V-b} - \frac{a}{V^2} \dots (3) \quad \text{siendo } a>0 \text{ y } b>0$$

En el punto crítico, igualando a cero las derivadas primera y segunda de P con respecto a V , se tiene:

$$\bullet \quad \frac{R T_c}{(V_c-b)^2} - \frac{2a}{V_c^3} = 0 \dots (4)$$

$$\frac{2 R T_c}{(V_c-b)^3} - \frac{6 a}{V_c^4} = 0 \dots (5)$$

Podemos expresar estas ecuaciones así:

$$\frac{R T_c}{(V_c-b)^2} = \frac{2 a}{V_c^3} \dots (6)$$

$$\frac{R T_c}{(V_c-b)^3} = \frac{3 a}{V_c^4} \dots (7)$$

Dividiendo miembro a miembro, se obtiene:

$$V_c - b = \frac{2}{3} V_c \dots (8)$$

De donde:

$$V_c = 3b \dots (9) \quad y,$$

$$T_c = \frac{8a}{27bR} \dots (10)$$

Sustituyendo en la ecuación de Van der Waals, obtenemos la presión crítica:

$$P_c = \frac{R T_c}{V_c - b} - \frac{a}{V_c^2} = \frac{8}{27b} \frac{a}{2b} - \frac{a}{9b^2} = \frac{a}{27b^2} \dots (11)$$

Si la ecuación de Van der Waals representase exactamente el estado real de un gas, se pueden predecir las constantes críticas P_c , V_c y T_c a partir de las constantes a , b y R , o viceversa. De aquí se desprende que:

$$b = \frac{V_c}{3} \dots (12)$$

$$a = 3 P_c V_c^2 \dots (13)$$

$$R = \frac{8 P_c V_c}{3 T_c} \dots (14)$$

Sustituyendo las expresiones de las constantes a , b y R en la ecuación de Van der Waals:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2} = \frac{3 T_c}{V - \frac{V_c}{3}} T - \frac{3 P_c V_c^2}{V^2} \dots (15)$$

$$P = \frac{8}{3} \left(\frac{T}{T_c} \right) \frac{P_c}{\left(\frac{V}{V_c} - \frac{1}{3} \right)} - 3 P_c \left(\frac{V_c}{V} \right)^2 \dots (16)$$

y dividiendo ambos miembros por P_c ,

$$\left(\frac{P}{P_c} + 3 \left(\frac{V_c}{V}\right)^2\right) = \frac{8}{3} \left(\frac{T}{T_c}\right) \frac{1}{\left(\frac{V_c}{V}\right) - \frac{1}{3}} \dots (17)$$

Esta última expresión adoptará una forma más simple si se definen las llamadas variables reducidas, que relacionan los valores de P , V y T con los que adopta el gas en el punto crítico:

$$P_r = \frac{P}{P_c} \dots (18)$$

$$V_r = \frac{V}{V_c} \dots (19)$$

$$T_r = \frac{T}{T_c} \dots (20)$$

Entonces quedará transformada en:

$$\left(Pr + \frac{3}{Vr^2} \right) \left(Vr - \frac{1}{3} \right) = \frac{8}{3} Tr \quad \dots (21)$$

Ecuación en la que no aparece ninguna de las constantes empíricas a, b y R. De acuerdo a ella, si expresáramos la ecuación $P = f(T, V)$ en función de las variables reducidas, la ecuación de estado resultante $Pr = f(Vr, Tr)$ sería la misma para todos los fluidos. Ello lleva a afirmar que, a un volumen reducido y a una temperatura reducida determinados, todos los gases y los líquidos poseen la misma presión reducida, afirmación que es la llamada Ley de los Estados Correspondientes.

Aunque se sabe que esta ecuación no es una representación cuantitativamente correcta de los gases reales, ella sí representa la conducta cualitativa de la mayoría de los gases, así, esta ecuación sugiere que puede ser posible desarrollar una ecuación de estado "generalizada", en función de las propiedades reducidas, que debería ser aplicable a todos los gases reales. Esto es, si especificamos dos propiedades reducidas cualesquiera (Pr , Tr o Vr) la tercera queda fijada.

Dado que la presión y la temperatura son las propiedades más fáciles de fijar arbitrariamente, estas son las propiedades especificadas normalmente. Se dice que los gases que están a igual presión y temperatura reducidas están en estados correspondientes. La Ley de Estados Correspondientes establece que todos los fluidos en estados correspondientes deberían tener el mismo volumen reducido.

Si se introduce ahora el Factor de Compresibilidad

$$Z = \frac{PV}{RT} \quad \dots (22)$$

Como una medida de la desviación de la conducta del gas real respecto a la que corresponde al gas ideal. La compresibilidad puede ser expresada en función de variables reducidas en la forma:

$$Z = \frac{P_r V_r}{R T_r} \frac{P_c V_c}{T_c} = \frac{P_r V_r}{T_r} \frac{P_c V_c}{R T_c} \dots (23)$$

El término $P_c V_c/R T_c$, es simplemente la compresibilidad en el punto crítico, Z_c , de modo que la ecuación anterior se convierte en:

$$Z = Z_c \frac{P_r V_r}{T_r} \dots (24)$$

Dado que la Ley de Estados Correspondientes indica que V_r es una función universal de P_r y T_r , para todos los gases que poseen las mismas compresibilidades críticas. El examen de las propiedades críticas (P_c , V_c , T_c) de la mayoría de los gases reales indica que sus compresibilidades críticas caen dentro de un intervalo bastante restringido, $0.25 < Z_c < 0.31$ (The corresponding state principle).

Así, La Ley de Estados Correspondientes indica que los factores de compresibilidad para todos los gases deberán estar representados esencialmente como una función universal de P_r y T_r .

Este resultado concuerda aproximadamente con la observación experimental de que las isothermas presión-volumen resultan muy similares para todos los fluidos.

La forma simplificada del P.E.C. equivale a considerar que las moléculas del fluido interactúan por pares con un potencial intermolecular de dos parámetros, relacionados con la energía máxima de atracción y con el tamaño de las moléculas. Las limitaciones de esta forma simplificada resultan aparentes si se considera que dicha expresión indica que el factor de compresibilidad en el punto crítico es una constante universal.

Se obtienen mejores resultados si se generaliza el P.E.C. clasificando a las sustancias en grupos, de acuerdo con el principio de equivalencia mecánica de Kamerlingh-Onnes, y aplicando el P.E.C. dentro de cada grupo de sustancias con propiedades similares. Esta generalización equivale a suponer que las moléculas interactúan de acuerdo a un potencial de tres parámetros, estando el tercer parámetro relacionado con la forma o con el momento dipolar de la molécula.

Para la mayoría de los fluidos, la dependencia funcional del factor de compresibilidad respecto a la presión, la temperatura y las propiedades moleculares pueden expresarse como:

$$Z = \left(\frac{KT}{\epsilon}, \frac{P\rho^2_0}{\epsilon}, \frac{a}{\rho_0}, \frac{\mu^2}{\epsilon\rho^2_0}, \frac{h}{\rho_0(m\epsilon)^{1/2}} \right) \dots \quad (25)$$

Donde los grupos adimensionales que aparecen en la función representan lo siguiente:

$\frac{KT}{\epsilon}$ representa la energía máxima de interacción entre moléculas.

$\frac{P\rho^2_0}{\epsilon}$ representa el tamaño de las moléculas.

$\frac{a}{\rho_0}$ representa los efectos de forma.

$\frac{\mu^2}{\epsilon \rho_0^3}$ representa los efectos de interacción dipolo-dipolo.

$\frac{h}{\rho_0 (m \epsilon)^{1/2}}$ representa los efectos cuánticos.

En la ecuación (25) :

K Constante de Boltzmann, 1.3805×10^{-6} erg/°k

T Temperatura, °k

ϵ Energía máxima de atracción, erg

P Presión, atm

ρ_0 Distancia mínima entre núcleos para energía potencial igual a cero

a Parámetro característico de forma

μ Momento dipolar de la molécula, Debyes

h Constante de Planck

m Masa molecular

En general, los efectos cuánticos sólo aparecen en algunas moléculas (H_2 , He, Ne) a bajas temperaturas, y las correlaciones generalizadas no cubren a estos fluidos cuánticos, sobre los cuales existe además suficiente información termodinámica.

Si en la función se emplean solamente los dos primeros grupos adimensionales, la ecuación resultante es correcta estrictamente sólo para los llamados fluidos simples (metano, argón, kriptón y xenón), caracterizados por la esfericidad de sus moléculas y por un potencial intermolecular de dos parámetros, del tipo del potencial de Lennard-Jones:

$$\Psi(r) = \epsilon \left[\left(\frac{\delta}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\delta}{r} \right)^6 \right] \dots \quad (26)$$

Donde:

ϵ profundidad del potencial mínimo

δ diámetro de colisión

r distancia entre moléculas

Para estas moléculas, los puntos potenciales son considerados y $\rho_0 = \delta$

La inclusión del tercer grupo adimensional en la función permite aplicar la ecuación a los llamados fluidos normales, caracterizados por su baja polaridad y por un potencial intermolecular que incluye un parámetro de forma, tal como el potencial de Kihara para una forma de núcleo dada. Dentro de la clasificación de fluidos normales se encuentran las parafinas, isoparafinas y olefinas ligeras.

El potencial de Kihara puede escribirse como sigue:

$$\Psi(\rho) = A \left[\left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{12} - \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^6 \right] \dots (27)$$

Donde:

ρ Distancia más corta entre el centro de las moléculas

ρ_0 Distancia cuando la energía potencial es cero

Para un núcleo esférico:

$$\rho = r - 2a \dots (28), \quad y$$

$$\rho_0 = \delta - 2a \dots (29)$$

Donde: a = Radio del núcleo

Si se incluye el cuarto grupo adimensional en la función general de la ecuación, puede aplicarse la correlación a fluidos moderadamente polares, siempre que no presenten asociación molecular debida a polaridad, a formación de puentes de hidrógeno o a interacciones de tipo químico.

El potencial intermolecular correspondiente es una superposición del potencial de Kihara con un término relacionando las interacciones dipolo-dipolo:

$$\Psi = A \left[\left(\frac{\rho^0}{\rho} \right)^{12} - \left(\frac{\rho^0}{\rho} \right)^6 \right]^2 - \frac{\mu}{r^3} g(\theta) \dots (30)$$

Donde, $g(\theta)$ representa la dependencia angular de la interacción dipolo-dipolo. Si los estados moleculares son considerados, la ecuación (30) representa el potencial de Stockmayer, el cual es frecuentemente usado para moléculas polares y excluye efectos de forma.

El quinto grupo de la ecuación permite incluir una corrección por efectos cuánticos a la función general del factor de compresibilidad.

Si las condiciones en el punto crítico:

$$\left(Z = Z_c \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_{T_c} = 0, \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_{T_c} = 0 \right)$$

Aplicando a la ecuación general las condiciones del punto crítico, se encuentra que el término $\epsilon \cdot k$ es directamente proporcional a la temperatura crítica, y el término $\epsilon \cdot \rho^3$ es directamente proporcional a la presión crítica. Si representamos los demás grupos adimensionales por medio de los parámetros macroscópicos w , x , y , relacionados con los efectos de forma, de polaridad y cuánticos respectivamente, el factor de compresibilidad queda expresado como una función universal de las condiciones reducidas y de los parámetros considerados:

$$Z = f_1 (Tr, Pr, w, x, y) \dots (31)$$

Si los efectos de forma de polaridad y cuánticos se consideran despreciables, esta expresión general se reduce a la forma simplificada del P.E.C.

Recientemente, se han desarrollado métodos basados en extensiones del Principio de Estados Correspondientes, lo que permite cálculos más precisos de valores de propiedades termodinámicas, físicas y de transporte para ciertos fluidos puros y mezclas.

La generalización más simple es la sugerencia de que no debe haber una relación tan sencilla $Z = Z(Pr, Tr)$ para todos los fluidos, sino una familia de relaciones para distintos valores de Z_c . Así pues, para encontrar el valor del factor de compresibilidad, si se conocen los valores de Tr y Pr , será necesario utilizar una gráfica de $Z = Z(Pr, Tr)$ preparada a partir de datos experimentales para los fluidos, con el mismo valor de Z_c . Esto equivale a decir que la ecuación (22) se debe reemplazar con la ecuación (24).

Las funciones termodinámicas de exceso pueden ser expresadas también como funciones universales de la temperatura y presión reducidas, aplicando extensiones del P.E.C. Los valores para las funciones termodinámicas de exceso pueden ser obtenidos a partir de la información volumétrica generalizada, aplicando relaciones termodinámicas, o pueden ser presentados en correlaciones independientes.

Puesto que una de las fallas del P.E.C. simplificado es la predicción de un valor universal para el factor de compresibilidad en el punto crítico, resulta lógico proponer el valor experimental de Z_c como un tercer parámetro empírico en los métodos basados en este principio.

La utilización de Z_c como tercer parámetro fue sugerida inicialmente por Meissner y Seferian en 1951, y desarrollada posteriormente por Lydersen, Greenkorn y Hougen en 1955. El factor de compresibilidad crítico, considerado como tercer parámetro en el Principio de Estados Correspondientes, presenta las siguientes características:

a) Existe una cierta relación entre el valor de Z_c y el número de coordinación efectivo o promedio del fluido, que, a su vez, depende de la polaridad y forma de las moléculas. Por lo tanto, el factor de compresibilidad crítico es un parámetro que representa los efectos combinados de forma y polaridad de las moléculas; puede esperarse que las correlaciones desarrolladas empleando a Z_c como tercer parámetro presenten gran versatilidad, siendo aplicables tanto a fluidos no polares como a fluidos polares. La combinación de los efectos de polaridad y de forma en un sólo parámetro se traduce, por otra parte, en una pérdida de exactitud para ambos tipos de fluidos; algunas sustancias con marcadas diferencias estructurales tienen valores de Z_c muy similares.

b) Los valores experimentales de Z_c difieren solamente en un 20% para fluidos tan disímiles como el argón y el agua; por tanto, es necesario correlacionar notables desviaciones del P.E.C. simplificado con pequeñas variaciones en este parámetro.

c) El volumen crítico de un fluido es un dato particularmente inexacto, sujeto a considerable error experimental; esta inexactitud en el tercer parámetro reduce la confiabilidad de los resultados obtenidos por estos métodos.

d) Puesto que el P.E.C. con tres parámetros es sólo una aproximación, el tercer parámetro seleccionado debe optimizar el ajuste de la correlación en alguna región del diagrama temperatura reducida-presión reducida. El empleo de Z_c optimiza el ajuste en el punto crítico, dejando al resto del diagrama sujeto al error inherente a una aproximación con tres parámetros.

De otra forma, se pueden utilizar características de fluido distintas de Z_c , como parámetro adicional en la generalización del P.E.C. simple. De hecho, puesto que para muchas sustancias la densidad crítica, y por tanto, Z_c , no se conocen con gran exactitud, tiene ciertas ventajas evitar la utilización de Z_c .

Existen otros terceros parámetros basados en la curva de presión de vapor, en que la pendiente de la curva de presión de vapor está íntimamente relacionada con la entropía de vaporización, de acuerdo con la ecuación de Clapeyron, y puede ser considerada como una medida indirecta de la desviación del potencial intermolecular respecto al del fluido simple.

Pitzer utilizó los modelos propuestos por Lennard-Jones y por Kihara para estudiar el efecto de la forma y polaridad de las moléculas en la curva de potencial intermolecular, y determinó que el efecto esencial es un estrechamiento de la región de potencial mínimo con respecto a la curva de potencial intermolecular del fluido simple. Este estrechamiento de la región de potencial mínimo disminuye la probabilidad (y por lo tanto la entropía) de agrupación de las moléculas para un valor dado de la relación ϵ/KT .

Puesto que el estado líquido se caracteriza por la agrupación de las moléculas, el efecto mencionado debe ser más marcado en el equilibrio líquido-vapor. Para los fluidos formados por moléculas no esféricas, la disminución de la entropía durante la condensación es mayor que para los fluidos simples, y la temperatura debe ser menor relativamente, para que se produzca la condensación; además la variación de la presión de vapor con la temperatura será más rápida para estos fluidos que para el fluido simple.

Los principales parámetros basados en la curva de presión de vapor del fluido son:

1) *Parámetro de Riedel.*- El parámetro propuesto por Riedel es la pendiente logarítmica de la curva de presión de vapor reducida en el punto crítico:

$$a_k = \left(\frac{d \ln P_{v_r}}{d \ln T_r} \right)_{T_r=1} \dots (32)$$

El valor del parámetro de Riedel para un fluido simple es 5.811 (The corresponding state principle).

2) *Parámetro de Halm-Stiel.*- El factor acéntrico de un fluido representa el efecto de la forma de las moléculas en la desviación del comportamiento del fluido respecto del fluido simple; su capacidad para representar el efecto de la polaridad es muy limitado. Para complementar al factor acéntrico, Halm y Stiel definen un parámetro que representa el efecto de la polaridad, dado por la diferencia entre el logaritmo de la presión de vapor reducida del fluido y el logaritmo de la presión de vapor reducida de fluidos normales, a la temperatura reducida de 0.6 :

$$x = \log_{10} P_{v_r} |_{T_r=0.6} - \log_{10} P_{v_r^N} |_{T_r=0.6} \dots (33)$$

$$x = \log_{10} P_{v_r} |_{T_r=0.6} + 1.70 \omega + 1.552 \dots (34)$$

El parámetro de Halm-Stiel ha sido utilizado como cuarto parámetro en correlaciones aplicables tanto a fluidos no polares como a fluidos polares.

3) *Factor Acéntrico.- Pitzer indica que el valor de la presión de vapor reducida para una temperatura reducida dada es una medida de la pendiente de la curva de presión de vapor reducida. El valor de la temperatura reducida seleccionado como referencia es 0.7 (The properties of gases and liquids), un valor suficientemente alejado del punto crítico y arriba de la temperatura de fusión para la mayoría de la sustancias. El parámetro propuesto por Pitzer, llamado factor acéntrico, es definido como:*

$$\omega = -1 - \log_{10}(P_{v,r})_{T_r=0.7} \dots (35)$$

Para los fluidos simple, la presión de vapor reducida en este punto es casi exactamente 0.1 y, por consiguiente su factor acéntrico es cero.

El Principio de Estados Correspondientes es ampliamente usado para la predicción de propiedades termodinámicas de fluidos y mezclas de fluidos, este principio tuvo que ser extendido por numerosos investigadores incluyendo un tercer parámetro, en adición a la temperatura y presión (o volumen) reducidos. Aunque se han usado diferentes terceros parámetros, la mayoría de las extensiones siguen la combinación general de Pitzer, donde un término de corrección proporcional al factor acéntrico, ω , es adicionado a la propiedad termodinámica en cuestión.

En este caso, la relación de estados correspondientes sería de la forma:

$$Z = Z(T_r, P_r, \omega) \dots (36)$$

Incluso estas extensiones del concepto de estados correspondientes, con las que pretende explicar la estructura molecular, no se puede esperar que se apliquen a los fluidos con cuadrípolos y dipolos permanentes. Puesto que las moléculas con dipolos permanentes fuertes interactúan de manera distinta que las moléculas sin dipolos o que las moléculas con dipolos débiles, es de esperar que la ecuación volumétrica de estado para los fluidos polares sea función del momento (cantidad de movimiento) dipolar.

Esta clase de extensiones generalmente usan una propiedad termodinámica en su derivación, e involucran condiciones no consistentes. Sin embargo, su aplicación a las mezclas no es directa porque el tercer parámetro está definido solamente para componentes puros. Así, es necesaria la introducción de una regla empírica para determinar el tercer parámetro para mezclas.

Para superar este defecto, Leland y sus colaboradores introdujeron una extensión al P.E.C. (The corresponding state principle) basado en factores de forma, lo cual no requiere la estimación del tercer parámetro para mezclas. Sin embargo, desde entonces, el uso simultáneo de dos propiedades termodinámicas son utilizadas para determinar dos factores de forma σ y θ , la dependencia de σ y θ sobre el volumen y temperatura, se hace evidente según Rowlinson y Watson. La derivación de una expresión explícita requerida termodinámicamente para la consistencia entre σ y θ y una prueba para la consistencia de la ecuación de σ y θ es presentada por Leland y sus colegas:

Leland y sus colaboradores, calculan el factor de forma requiriendo de dos sustancias, 0 y 1.

$$(f/P)_1 = (f/P)_0 \dots (37) \quad y,$$

$$Z_1 = Z_0 \dots (38)$$

Cuando:

$$\frac{T_1}{\theta_{1,0} T_0^{c_1}} = \frac{T_0}{T_0^{c_0}} \dots (39) \quad y,$$

$$\frac{V_1}{\theta_{1,0} V_0^{c_1}} = \frac{V_0}{V_0^{c_0}} \dots (40)$$

Donde el subíndice, 0, se refiere a la sustancia de referencia y, 1, se refiere a cualquier otra sustancia. Tal aproximación podría producir valores únicos de θ y θ a un volumen y temperatura dados.

La aplicación de correlaciones basadas en el Principio de Estados Correspondientes a sistemas multicomponentes requiere de la definición de las propiedades críticas y de los parámetros adicionales de correlación para la mezcla de interés. Aunque las propiedades críticas de la mezcla pueden ser determinadas aplicando las condiciones termodinámicas del punto crítico, este punto crítico no tiene el mismo significado que el de su componente puro. La aplicación del P.E.C. a una mezcla resulta entonces una aproximación que normalmente se maneja a través de la definición de propiedades "psudocríticas" de la mezcla, calculables a partir de los componentes puros y de la composición del sistema por medio de expresiones combinatorias denominadas reglas de mezclado.

Las principales reglas de mezclado presentadas para el cálculo de las constantes pseudocríticas son:

a) *Regla de Kay.*- Kay sugirió para la determinación de las constantes pseudocríticas de un sistema multicomponente una combinación lineal en fracción mol de las constantes críticas de los componentes puros.

$$Tc_i = \sum x_j Tc_j \quad \dots \quad (41)$$

$$Pc_i = \sum x_j Pc_j \quad \dots \quad (42)$$

$$Zc_i = \sum x_j Zc_j \quad \dots \quad (43)$$

Estas reglas de mezclado son simples de aplicación, pero poco precisas; las constantes pseudocríticas calculadas con la regla de Kay pueden diferir apreciablemente de las constantes críticas reales, produciendo inconsistencias de localización del fluido en el diagrama de condiciones reducidas.

b) *Reglas de Pitzer-Hultgren.*- Basándose en un estudio realizado para mezclas binarias, Pitzer y Hultgren proponen la utilización de un término cuadrático en fracción mol para la determinación de las constantes pseudocríticas. Las ecuaciones de Pitzer y Hultgren, generalizadas para multicomponentes son:

$$Tc = \sum_i \sum_j x_i x_j Tc_{ij} \quad \dots \quad (44)$$

$$Pc = \sum_i \sum_j x_i x_j Pc_{ij} \quad \dots \quad (45)$$

$$Zc = \sum_i \sum_j x_i x_j Zc_{ij} \quad \dots \quad (46)$$

Donde $T_{c_{ij}}$, $P_{c_{ij}}$ y $Z_{c_{ij}}$ ($i \neq j$) son términos de interacción ajustables experimentalmente; este método queda limitado por el requerimiento de estos términos de interacción binaria.

c) Reglas de Prausnitz-Gunn.- En un estudio de 10 sistemas multicomponentes, Prausnitz y Gunn determinaron que la regla de Kay da resultados adecuados para temperatura y volumen pseudocríticos, pero produce errores apreciables para la presión pseudocrítica; su recomendación es utilizar la regla de Kay para temperatura, volumen y factor de compresibilidad pseudocríticos, y calcular la presión pseudocrítica por medio de:

$$P_c = \frac{Z_c R T_c}{V_c} \dots (47)$$

Prausnitz y Gunn indican que estas reglas deben producir errores menores al 5% para la mayoría de las mezclas no polares. Para obtener mayor precisión se requiere utilizar reglas de mezclado más complicadas que utilizan términos de interacción binaria.

El Principio de Estados Correspondientes es el fundamento de la aplicabilidad de las ecuaciones de estado generalizadas, siendo aplicado también en la mayor parte de las correlaciones de importancia en la Termodinámica práctica.

Además de las propiedades mecánicas P y V , un sistema tiene tres propiedades fundamentales T , E y S , definidas mediante las leyes de la termodinámica, y tres propiedades compuestas H , A y G que son importantes. Se pueden establecer las ecuaciones diferenciales que relacionen estas propiedades entre sí.

Limitemos el análisis a sistemas que producen sólo trabajo de expansión, de modo que $dU = 0$. La condición de equilibrio será en estas condiciones,

$$dE = TdS - pdV \dots (48)$$

Esta combinación de la primera y segunda ley de la termodinámica es la ecuación fundamental de la termodinámica. Utilizando las definiciones de las funciones compuestas,

$$H = E + pV \dots (49)$$

$$A = E - TS \dots (50)$$

$$G = E + pV - TS \dots (51)$$

Mediante diferenciación, obtenemos:

$$dH = dE + pdV + Vdp \dots (52)$$

$$dA = dE - TdS - SdT \dots (53)$$

$$dG = dE + pdV + Vdp - TdS - SdT \dots (54)$$

Si en cada una de estas ecuaciones reemplazamos dE por su valor de la ecuación (48), se transforman en,

$$dE = TdS - pdV$$

$$dH = TdS + Vdp \dots (55)$$

$$dA = -SdT - pdV \dots (56)$$

$$dG = -SdT - Vdp \dots (57)$$

Estas cuatro ecuaciones se denominan con frecuencia ecuaciones fundamentales de la termodinámica.

La ecuación (48) relaciona las variaciones de la energía con variaciones de entropía y volumen. La ecuación (49) relaciona las variaciones de entalpía con las entropía y presión. La ecuación (50) relaciona las variaciones de la función trabajo dA con cambios de la temperatura y volumen. La ecuación (51) relaciona las variaciones de la energía libre con variaciones de temperatura y presión. Por la sencillez de estas ecuaciones, S y V se denominan variables "naturales" de la energía; S y p son las variables naturales de la entalpía; T y V son las variables naturales de la función trabajo; y T y p son las variables naturales de la energía libre.

Como las expresiones a la derecha de estas ecuaciones son diferenciales exactas, sus derivadas cruzadas serán iguales. De esta manera se obtienen las cuatro relaciones de Maxwell:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_V \quad \dots \quad (58)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_S = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_p \quad \dots \quad (59)$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \quad \dots \quad (60)$$

$$-\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \quad \dots \quad (61)$$

Las primeras dos ecuaciones se relacionan con cambios de estado a entropía constante. Esto es, cambios de estado adiabático reversibles. La derivada $(\partial T / \partial V)_S$ representa la rapidez de variación de temperatura respecto al volumen en una transformación adiabática reversible.

Las ecuaciones (60) y (61) son muy importantes porque relacionan la dependencia de la entropía con el volumen y la dependencia de la entropía con la presión en procesos isotérmicos con cantidades fácilmente medibles.

II. PROPIEDADES

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*
- 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 (The law of corresponding states in it's most general form), requiriéndose para algunos de ellos una información especializada que se publica en revistas.

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.

De tal manera que en el diseño de este sistema se toman en cuenta las propiedades más comunes y que contienen un gran número de parámetros semejantes, a saber:

Densidad

Capacidad calorífica

Conductividad térmica

Viscosidad

Entalpia

Presión de vapor

Difusividad

Volumen

***DENSIDAD.** - La densidad está definida como la masa de una sustancia contenida en una unidad de volumen. Frecuentemente expresada en g/ml o en lb/pie³ y en muchas ocasiones es indicada en grados API (Instituto Americano del Petróleo), 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.*

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 despreciar 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 si 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 (Hidrógeno), O_2 (Oxígeno), aire, etc.) en ciertas circunstancias si son consistentes con la leyes de los gases perfectos a pesar de existir desviaciones que pueden considerarse milas.

Los gases pesados, tales como el SO_2 (Bióxido de azufre) y los hidrocarburos, particularmente cuando las presiones son altas y las temperaturas altas, 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.

El método para correlacionar el comportamiento de los gases reales es deducido a partir de la teoría de estados correspondientes y está basado en consideraciones de similitud dimensional; en general ofrecen buenos resultados y son los más convenientes a utilizar.

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

$$\rho = \frac{l}{V} = \frac{P}{ZRT} \quad \dots (62)$$

- Donde ρ = densidad de fluido, g cm³, lb ft³, etc.
 V = Volumen, cm³, ft³
 P = Presión del sistema, atm, Pa, etc.
 Z = Factor de compresibilidad [$=f$]
 T = Temperatura del sistema, °C, °K, etc.
 R = Constante de gases = 0.08205 $\frac{\text{atm}\cdot\text{L}}{\text{gmol}\cdot\text{K}}$, 1.987 $\frac{\text{cal}}{\text{gmol}\cdot\text{K}}$

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.

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 evaluado en el punto normal de ebullición.

CAPACIDAD CALÓRFICA. - 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.

Desde el punto de vista termodinámico, la capacidad calorífica, es la derivada de la energía con respecto a la temperatura (dE/dT) y $\dots C_v$. A la energía molecular se le puede dividir en varios subtipos, entonces al expresar la energía total como una suma algebraica, es posible calcular las capacidades caloríficas.

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.

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 se designa 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 ligera. Sin embargo, en los gases donde aquellos cambios son grandes, la diferencia C_p-C_v siempre es significativa y no debe despreciarse.

Existen varios métodos para la evaluación de la capacidad calorífica del estado gaseoso, una gran cantidad de ellos dependen de la forma en que se suministran los datos así como de la exactitud requerida en la estimación. Para el estado líquido la estimación del C_p ha sido revisada desde 1957 y únicamente se han publicado pocas correlaciones. En general, 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.

C_p = Capacidad calorífica a presión constante
 C_v = Capacidad calorífica a volumen constante
[=] cal/gmol°k, Joul/gmol, etc.

CONDUCTIVIDAD TÉRMICA - La conductividad térmica es una medida de la habilidad de una sustancia para transferir calor por conducción molecular debido a la interacción entre 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:

$$\frac{q}{Aq} = -k \frac{dT}{dy} \dots (63)$$

donde:

q = razón de flujo de calor por unidad de tiempo, $\frac{\text{cal}}{h}$, $\frac{\text{Joul}}{h}$, etc.

Aq = área de flujo (transfereencial), m^2 , ft^2

$dT.dy$ = gradientes de temperatura del material

k = conductividad térmica de la sustancia, $\frac{BTU}{hft^2F}$ o $\frac{\text{cal}}{scm^2k}$

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).

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 líquido decrece con la temperatura. Primeramente se debe a que es función de la densidad, a veces la conductividad térmica aumenta con la temperatura, 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 general, la conductividad térmica de gases es independiente de la presión abajo de la presión reducida igual a 0.2, arriba de ésta aumenta su valor rápidamente y en el caso de líquido es independiente de la presión abajo de $Pr = 0.1$.

YISCOSIDAD- Viscosidad es una medida que tiene 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 sobre cualquier elemento de volumen es proporcional al gradiente de velocidad en la dirección perpendicular (y) a la del fluido este 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:

$$\frac{F}{A} = \mu \frac{v}{y} \quad \dots (64)$$

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 μ se denomina VISCOSIDAD del fluido.

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 τ_{yx} , y el componente $-x$ del vector velocidad del fluido por V_x . Así:

$$\tau_{yx} = -\mu \frac{dV_x}{dy} \dots (65)$$

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 está programado para trabajar únicamente con fluidos Newtonianos como gases, hidrocarburos líquidos e inorgánicos líquidos sencillos.

De la expresión anterior las unidades correspondientes serían:

$$\tau_{yx} = \text{dina cm}^{-2}$$

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

$$\gamma = cm$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned}\mu &= -\tau_{yx} \left(\frac{dV_x}{dy} \right)^{-1} = (g_m \text{ cm}^{-1} \text{ seg}^{-2}) (\text{cm seg}^{-1} \text{ cm}^{-1})^{-1} \\ &= g_m \text{ cm}^{-1} \text{ seg}^{-1} \\ &= 1 \text{ poise}\end{aligned}$$

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 expresados 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, dando 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 sólo 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:

$$Re = \frac{DV\rho}{\mu} \quad \text{No. de Reynolds}$$

$$Pr = \frac{Cp \mu}{k} \quad \text{No. de Prandtl}$$

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

entre otros.

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

$$H = E - PV$$

$$H [^{\circ}] = \frac{\text{cal}}{\text{gmol}}, \text{ Joul, etc.}$$

Los cambios térmicos a presión constante se expresan más adecuadamente mediante la función llamada entalpía o contenido de calor de un sistema. Esta función se define por la relación anterior, 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 Entalpía es también una función de estado y es completamente independiente de la manera en que se logra aquel. En consecuencia el cambio de entalpía (H), puede escribirse así:

$$\Delta H = H_2 - H_1$$

Donde H_2 es la entalpía 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 entalpía se obtienen para ΔH :

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

Esta ecuación es la definición general de ΔH , cuando la presión permanece constante durante el proceso, entonces:

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

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

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 densidad 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 (líquido a gas)*
- 3.- Calor o entalpia de sublimación (sólido a vapor)*
- 4.- Calor o entalpia de transición (sólido a sólido)*

El último caso representa una modificación del estado cristalino.

CALOR LATENTE DE VAPORIZACION- *El calor latente de vaporización es el nombre con el que comúnmente se designa a la entalpia de vaporización, ΔH_v .*

ΔH_v [=], cal/gmol, Joules, etc.

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

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, ΔE_v . En este proceso se está efectuando un trabajo sobre la fase gaseosa conforme la evaporización 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 $P^o (V_g - V_l)$.

PRESION DE VAPOR- *La 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.*

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.

El término es comúnmente 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.

$P^o [=]$, atm, Pascales, etc.

FACTOR ACÉNTRICO- Una de las constantes más comunes para componentes puros es el factor acéntrico, el cual se define como:

$$w = - \log P_{vp} \text{ (a } T_r=0.7) - 1.00$$

Para obtener valores de w , se requieren de la presión de vapor a $T_r = T / T_c = 0.7$ así como la presión crítica.

Originalmente se dijo que w representa solamente la acentricidad o no esfericidad de una molécula. Para gases monoatómicos, w es muy pequeño, sin embargo para moléculas grandes de hidrocarburos pesados, w se incrementa y con esta polaridad. Por esto, w es ampliamente utilizado como un parámetro el cual de una manera mide la complejidad de una molécula con respecto a su geometría y la polaridad. La aplicación de la correlación empleada del factor acéntrico puede limitarse a fluidos normales; y no en el caso de las correlaciones usadas para H_2 , He , Ne , o para fuertemente polares y/o fluidos con ligaduras de hidrógeno.

El Principio de Estados Correspondientes y sus modificaciones ofrecen métodos para calcular valores para las constantes de las ecuaciones de estado. Es probable que la generalización más útil se base en el trabajo realizado por Pitzer y sus colaboradores quien mejoró la correlación generalizada acostumbrada que se basa en la temperatura reducida T_r y también en la presión reducida P_r incorporando un tercer parámetro conocido como el factor acéntrico, w .

W [=] adimensional

DIFUSIVIDAD.- El gran uso del término difusión en la Ingeniería Química está basado en una simple intuición para el concepto, es decir, difusión se refiere al transporte neto del material dentro de un compuesto simple sin haber mezcla (por promedios mecánicos o por convección). Tanto la teoría como los experimentos han demostrado que la difusión puede resultar de gradientes de presión (presión de difusión), gradientes de temperatura (difusión térmica), fuerzas externas (difusión forzada) y gradientes de concentración donde ésta última es la que contribuye más a la difusión por lo que sólo se considera la más importante, ya que la difusión se limita a sistemas isotérmicos, isobáricos y sin gradientes de fuerzas externas.

Con estas limitaciones, se puede confundir fácilmente a menos que sea manejado cuidadosamente para definir claramente los fluxes y potenciales de difusión, es decir, manejando fuerzas. La constante de proporcionalidad entre el flux y potencial es el coeficiente de difusión o difusividad.

Coficiente de difusión:

El coeficiente de difusión para una mezcla binaria de A y B están definidas por:

$$J_A^M = -C D_{AB} \nabla x_A \quad \dots \quad (1)$$

$$J_B^M = -C D_{BC} \nabla x_B$$

donde C es la concentración molar total ($=V^{-1}$). Con la ecuación

$$J_A^M = J_B^M = 0 \text{ entonces } \nabla x_A - \nabla x_B = 0,$$

por lo tanto $D_{AB} = D_{BA}$. El coeficiente de difusión entonces representa la proporcionalidad entre el flux de A relativo al plano de flujo molar no neto y el gradiente $C \nabla x_A$.

$$J_A^V = \frac{\nabla_A}{V} J_A^M \quad \text{y} \quad J_B^V = \frac{\nabla_B}{V} J_B^M \quad \dots \dots (2)$$

de las dos ecuaciones anteriores la definición del volumen parcial pueden demostrar que para un sistema binario isotérmico e isobárico:

$$J_A^V = - D_{AB} \nabla C_A \quad \text{y} \quad J_B^V = - D_{AB} \nabla C_B \quad \dots \dots (3)$$

Así, cuando los fluxes son expresados en relación al plano del flujo de volumen no neto el potencial es el gradiente de concentración. D_{AB} en la ecuación (3) es el mismo que se definió en la ecuación (1). En muchos casos $\nabla_A = \nabla_B = \nabla$ (gases ideales, soluciones ideales) y en algunas instancias $J_A^V = J_A^M$, $J_B^V = J_B^M$.

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 rango de temperatura y presión así como el error asociado con dichos datos experimentales.

El coeficiente de difusión comúnmente llamado difusividad es la densidad de flujo de la especie en difusión y el gradiente de potencial apropiado dado por la siguiente ecuación diferencial.

$$\frac{N_M}{A_{NM}} = - D \frac{dC^M}{dY} \quad \dots \dots (4)$$

donde:

N_M = radio molar de difusión

A_{NM} = área

dC_M/dY = gradiente de concentración de la sustancia en difusión

D = Coeficiente de difusión

El coeficiente de difusión depende de los dos o más componentes del sistema. 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 más sencillamente 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 es el flujo molar de la especie 1, $\text{gmol} / \text{seg} \cdot \text{cm}^2$; 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 cm^2 / seg .

VOLUMEN- El volumen específico de una sustancia se define como el volumen por unidad de masa, y tiene por símbolo v . La densidad (o masa específica) de una sustancia en su masa por unidad de volumen y, por tanto, es el recíproco del volumen específico. La densidad se representa por ρ . El volumen específico y la densidad son propiedades intensivas.

El volumen específico de un sistema que está en un campo gravitacional puede variar de punto a punto, por ejemplo, considerando la atmósfera como un sistema, el volumen específico aumenta conforme lo aumenta la altura. Por consiguiente, la definición de tal volumen implica el de una sustancia en un punto de un sistema.

Consideramos un elemento de volumen δV de un sistema, representando la masa del elemento por δm . el volumen específico está definido por la relación.

$$v = \lim_{\delta V \rightarrow \delta V^*} \frac{\delta V}{\delta m}$$

donde δV^* es volumen mínimo para el cual puede considerarse el sistema como un continuo.

Así, en relación a un sistema dado se hablará del volumen específico, y se reconocerá que puede variar con la altura. Sin embargo, la mayor parte de los sistemas que se considerarán son relativamente pequeños, y el cambio de volumen específico con la altura no es significativo. En este caso podemos hablar de un valor de volumen específico para todo el sistema.

En este trabajo el volumen específico se expresará comúnmente sobre la base de un kilogramo masa o una libra masa, o bien, kilogramomol o una libramol, una raya sobre el símbolo ν se utilizará para designar la propiedad sobre una base molar, así pues, $\bar{\nu}$ designará el volumen específico molar, las unidades que se emplearán para el volumen específico son: m^3 / kgm o $\text{pie}^3 / \text{lbm}$ y m^3 / kgmol o $\text{pie}^3 / \text{lbmol}$.

III. TABLAS DE RESULTADOS

Y ANALISIS DE RESULTADOS

TABLA DE RESULTADOS No. 1

PROPIEDAD: CAPACIDAD CALORIFICA

COMPUESTO	METODO	CONDICIONES	RESULTADOS			% DE ERROR
			VALOR CALCULADO	VALOR EXPERIMENTAL	UNIDADES	
ETANO	SAN JOSE STERLING-BROW	T= 274°K P= 1 ATM NO - POLAR	424.50	377.10	Cal/gmol·°K	12.5
ETANO	SAN JOSE ROWLINSON-BONDI	T= 274°K P= 1 ATM NO - POLAR	426.80	377.10	Cal/gmol·°K	13.1
ETANO	SAN JOSE YUAN-STIEL	T= 274°K P= 1 ATM NO - POLAR	395.50	377.10	Cal/gmol·°K	4.9
ETANO	SAN JOSE LEE-KESLER	T= 274°K P= 1 ATM NO - POLAR	386.60	377.10	Cal/gmol·°K	2.5
ETANO	LYMAN - DANNER	T= 274°K P= 1 ATM NO - POLAR	418.50	377.10	Cal/gmol·°K	12.5
BUTANOL	SAN JOSE YUAN-STIEL	T= 298°K P= 1 ATM POLAR	1931.60	1931.64	Cal/gmol·°K	0.002
BUTANOL	SAN JOSE LEE-KESLER	T= 298°K P= 1 ATM POLAR	1955.59	1931.64	Cal/gmol·°K	1.24
BUTANOL	LYMAN - DANNER	T= 298°K P= 1 ATM POLAR	1994.59	1931.64	Cal/gmol·°K	3.25
BUTANOL	SAN JOSE LYMAN-DANNER	T= 313°K P= 1 ATM POLAR	42.28	42.01	Cal/gmol·°K	0.65
BUTANOL	SAN JOSE YUAN-STIEL	T= 313°K P= 1 ATM POLAR	2010.79	2010.79	Cal/gmol·°K	0.0
BUTANOL	SAN JOSE LEE-KESLER	T= 313°K P= 1 ATM POLAR	1955.48	2010.79	Cal/gmol·°K	3.24
BUTANOL	LYMAN - DANNER	T= 313°K P= 1 ATM POLAR	1996.30	2010.79	Cal/gmol·°K	0.72
PENTANO	SAN JOSE LYMAN-DANNER	T= 313°K P= 1 ATM NO - POLAR	54.02	48.816	Cal/gmol·°K	10.60

TABLA DE RESULTADOS No. 2

PROPIEDAD: CONDUCTIVIDAD TERMICA

COMPUESTO	METODO	CONDICIONES	RESULTADOS		UNIDADES	% DE ERROR
			VALOR CALCULADO	VALOR EXPERIMENTAL		
NO ₂	THOMAS	T= 105°C P= 136 ATM	0.0205	0.0225	BTU/h-ft-°F	8.0
ACETONA	THOMAS	T= 192°C P= 1 ATM	0.01597	0.01451	BTU/h-ft-°F	10.0
ACETONA	THODOS	T= 192°C P= 1 ATM	5.9815x10 ⁵	5.998x10 ⁵	Cal/s-cm-°K	0.27
BENCENO	THOMAS	T= 377°C P= 1 ATM	0.019685	0.019609	BTU/h-ft-°F	0.38
BENCENO	THODOS	T= 160°C P= 1 ATM	5.1631x10 ⁵	5.40x10 ⁵	Cal/s-cm-°K	4.38
ACETILENO	THOMAS	T= 50°C P= 1 ATM	0.014025	0.01398	BTU/h-ft-°F	0.32
ACETILENO	THODOS	T= 50°C P= 1 ATM	0.6809x10 ⁴	0.7550x10 ⁴	Cal/s-cm-°K	9.8
ISOPENTANO	THODOS	T= 100°C P= 1 ATM	5.68x10 ⁵	5.20x10 ⁵	Cal/s-cm-°K	9.2
METANO (1) - PROPANO (2)	STIEL 2	T= 104.4°C P= 10 ATM X ₁ = 0.80 X ₂ = 0.20	0.1716x10 ⁵	0.1657x10 ⁵	Cal/s-cm-°K	3.53
METANO (1) - CO ₂ (2)	STIEL 2	T= 50°C P= 1 ATM X ₁ = 0.768 X ₂ = 0.232	0.766x10 ⁴	0.755x10 ⁴	Cal/s-cm-°K	1.45

TABLA DE RESULTADOS No. 3

PROPIEDAD: DENSIDAD

COMPUESTO	METODO	CONDICIONES	RESULTADOS		UNIDADES	% DE ERROR
			VALOR CALCULADO	VALOR EXPERIMENTAL		
ETANO	CHUEH	T= 20°C P= 1 ATM	0.557	0.548	g/ml	1.64
ETANO	MARTIN	T= 20°C	0.598	0.548	g/ml	9.2
BENCENO	CHUEH	T= 20°C P= 1 ATM	0.858	0.885	g/ml	3.0
BENCENO	MARTIN	T= 20°C	0.963	0.885	g/ml	8.9
BENCENO	YEN - WOOD	T= 20°C	0.9708	0.885	g/ml	9.7
HEXANO	MARTIN	T= 20°C	0.715	0.659	g/ml	8.6
HEXANO	YEN - WOOD	T= 20°C	0.7281	0.659	g/ml	10.5
BENCENO (1) - TOLUENO (2)	YEN OK	T= 25°C P= 1 ATM X ₁ = 0.6425 X ₂ = 0.3575	1.065	0.8676	g/ml	22.75
BENCENO (1) - TOLUENO (2)	YAMADA	T= 25°C X ₁ = 0.6425 X ₂ = 0.3575	0.8577	0.8676	g/ml	1.14
CLOROFORMO (1) - BENCENO (2)	YENOK	T= 25°C P= 1 ATM X ₁ = 0.5111 X ₂ = 0.4889	1.3805	1.1104	g/ml	20.28
CLOROFORMO (1) - BENCENO (2)	YAMADA	T= 25°C X ₁ = 0.5111 X ₂ = 0.4889	1.1725	1.1104	g/ml	5.60

TABLA DE RESULTADOS No. 4

PROPIEDAD: DIFUSIVIDAD

COMPUESTO	MÉTODO	CONDICIONES	RESULTADOS			% DE ERROR
			VALOR CALCULADO	VALOR EXPERIMENTAL	UNIDADES	
ACETONA	MATHUR	T= 298°K P= 1 ATM	1.9033x10 ⁵	1.7891x10 ⁵	cm ² /S	6.38
ACETONA	CHEN	T= 298°K P= 1 ATM	1.8934x10 ⁵	1.7891x10 ⁵	cm ² /S	5.82
NITROGENO (1) BIOXIDO DE CARBONO (2)	MATHUR	T= 590°K P= 1 ATM	0.510	0.575	cm ² /S	11.03
METANO (1) - ETANO (2)	MATHUR	T= 40°K P= 136.1 ATM	9.3x10 ⁻⁴	8.4x10 ⁻⁴	cm ² /S	10.71
BROMO BENCENO (1) - ETIL BENCENO (2)	CHEN	T= 7.3°K P= 1 ATM	1.51x10 ⁻⁵	1.44x10 ⁻⁵	cm ² /S	4.86
ACETONA (1) - CLOROFORMO (2)	CHEN	T= 40°K P= 1 ATM	3.04x10 ⁵	2.90x10 ⁵	cm ² /S	5.10
BENCENO	MATHUR	T= 60°K P= 1 ATM	2.03x10 ⁵	1.92x10 ⁵	cm ² /S	5.90
HIDROGENO (1) - ACETONA (2)	CHEN	T= 296°K P= 1 ATM	0.436	0.424	cm ² /S	3.00

TABLA DE RESULTADOS No. 5

PROPIEDAD: ENTALPIA

COMPUESTO	METODO	CONDICIONES	RESULTADOS			% DE ERROR
			VALOR CALCULADO	VALOR EXPERIMENTAL	UNIDADES	
PROPIONALDEHIDO	PITZER	T= 48°C P= 1 ATM	6926.0	6760.0	Cal/gmol	2.50
PROPIONALDEHIDO	LEE - KESLER	T= 48°C P= 1 ATM	7124.88	6760.0	Cal/gmol	5.38
PROPIONALDEHIDO	FROST	T= 48°C P= 1 ATM	6987.39	6760.0	Cal/gmol	3.36
PROPIONALDEHIDO	RIEDEL	T= 48°C P= 1 ATM	7021.85	6761.0	Cal/gmol	3.87
n - OCTANO	PITZER	T= 171°C P= 1 ATM	7108.5	7254	Cal/gmol	2.05
n - OCTANO	LEE - KESLER	T= 171°C P= 1 ATM	7362.4	7254	Cal/gmol	1.49
n - OCTANO	FROST	T= 171°C P= 1 ATM	7729.31	7254	Cal/gmol	6.55
n - OCTANO	RIEDEL	T= 171°C P= 1 ATM	8108.0	7254	Cal/gmol	11.77
ISOBUTANO	PITZER	T= 300°K Tc= 408.1°K w= 0.176 Tb= 261.3°K Pc= 36 ATM	4439.9	4533.4	Cal/gmol	2.06
ISOBUTANO	LEE - KESLER	T= 300°K Tc= 408.1°K w= 0.176 Tb= 261.3°K Pc= 36 ATM	4956.84	4533.4	Cal/gmol	9.34
ISOBUTANO	FROST	T= 300°K Tc= 408.1°K w= 0.176 Tb= 261.3°K Pc= 36 ATM	4744.13	4533.4	Cal/gmol	4.64
ISOBUTANO	RIEDEL	T= 300°K Tc= 408.1°K w= 0.176 Tb= 261.3°K Pc= 36 ATM	4970.06	4533.4	Cal/gmol	9.63

TABLA DE RESULTADOS No. 6

PROPIEDAD: PRESION DE VAPOR

COMPUESTO	METODO	CONDICIONES	RESULTADOS			% DE ERROR
			VALOR CALCULADO	VALOR EXPERIMENTAL	UNIDADES	
METANO	JACK ANTOINE	T= 148.52°K	9.3689	9.6302	ATM	2.5
METANO	JACK WAGNER	T= 148.52°K	9.5774	9.6302	ATM	0.55
METANO	JACK RIEDEL	T= 148.52°K	9.6744	9.6302	ATM	1.04
n - OCTANO	JACK ANTOINE	T= 463.165°K	4.4793	4.45	ATM	0.65
n - OCTANO	JACK WAGNER	T= 463.165°K	4.4756	4.45	ATM	0.57
n - OCTANO	JACK RIEDEL	T= 463.165°K	4.507	4.45	ATM	1.28
BENCENO	JACK ANTOINE	T= 453.165°K	10.1816	10.0394	ATM	1.21
BENCENO	JACK WAGNER	T= 453.165°K	10.137	10.0394	ATM	0.97
BENCENO	JACK RIEDEL	T= 453.165°K	10.155	10.0394	ATM	1.15
1,3 BUTADIENO	JACK ANTOINE	T= 303.165°K	3.2223	3.2223	ATM	0.0
1,3 BUTADIENO	JACK WAGNER	T= 303.165°K	3.4192	3.2223	ATM	6.08
1,3 BUTADIENO	JACK RIEDEL	T= 303.165°K	3.2862	3.2223	ATM	1.98

TABLA DE RESULTADOS No. 7

PROPIEDAD: VISCOSIDAD

COMPLEJOS	METODO	CONDICIONES	RESULTADOS			N° DE ERROR
			VALOR CALCULADO	VALOR EXPERIMENTAL	UNIDADES	
METANO (1) - BUTANO (2)	WILKEOK	T= 20°C P= 1 ATM X ₁ = 0.697 X ₂ = 0.303	92.24	93.35	micropoises	1.18
METANO (1) - BUTANO (2)	DEAN - STIEL	T= 20°C P= 1 ATM X ₁ = 0.697 X ₂ = 0.303	95.96	93.35	micropoises	2.79
METANO (1) - BUTANO (2)	Y - T	T= 20°C P= 1 ATM X ₁ = 0.697 X ₂ = 0.303	95.95	93.35	micropoises	2.79
H ₂ (1) - N ₂ (2)	WILKEOK	T= 100°C P= 1 ATM X ₁ = 0.202 X ₂ = 0.798	208.66	205.80	micropoises	1.39
METANO (1) - PROPANO (2)	WILKEOK	T= 25°C P= 1 ATM X ₁ = 0.6 X ₂ = 0.4	94.63	95.00	micropoises	0.38
METANO (1) - PROPANO (2)	DEAN - STIEL	T= 25°C P= 1 ATM X ₁ = 0.6 X ₂ = 0.4	97.39	95.00	micropoises	2.50
METANO (1) - PROPANO (2)	Y - T	T= 25°C P= 1 ATM X ₁ = 0.6 X ₂ = 0.4	97.23	95.00	micropoises	2.50
ETER ETILICO (1) - SULFURO DE HIDROGENO (2)	WILKEOK	T= 58°C P= 1 ATM X ₁ = 0.796 X ₂ = 0.204	80.85	83.50	micropoises	3.17
ETER ETILICO (1) - SULFURO DE HIDROGENO (2)	DEAN - STIEL	T= 58°C P= 1 ATM X ₁ = 0.796 X ₂ = 0.204	89.77	83.50	micropoises	7.50
ETER ETILICO (1) - SULFURO DE HIDROGENO (2)	Y - T	T= 58°C P= 1 ATM X ₁ = 0.796 X ₂ = 0.204	90.77	83.50	micropoises	8.70
HEXANO (1) - TOLUENO (2)	LETSOU - STIEL	T= 60°C P= 1 ATM X ₁ = 0.2578 X ₂ = 0.7422	0.2877	0.3205	Centipoises	10.20
HEXANO (1) - CLOROBENCENO (2)	LETSOU - STIEL	T= 60°C P= 1 ATM X ₁ = 0.4367 X ₂ = 0.5633	0.3224	0.3529	Centipoises	10.40
n - HEPTANO	LETSOU - STIEL	T= 60°C P= 1 ATM	0.078	0.085	Centipoises	8.20

TABLA DE RESULTADOS No. 8

PROPIEDAD: VOLUMEN MOLAR

COMPUESTO	MÉTODO	CONDICIONES	VALOR		UNIDADES	A. REFER.
			CALCULADO	EXPERIMENTAL		
BENCENO	RACKETT	T= 16°C	86.14	88.13	cm ³ /gmol	2.25
ETIL MERCAPTANO	RACKETT	T= 150°C	82.48	95.0	cm ³ /gmol	13.17
ETIL MERCAPTANO	LICKMA2	T= 150°C	81.40	95.0	cm ³ /gmol	14.31
CLOROBENCENO	RACKETT	T= 404.9°C	128.05	115.0	cm ³ /gmol	11.30
CLOROBENCENO	LICKMA2	T= 404.9°C	94.07	115.0	cm ³ /gmol	18.20
BENCENO (1) - TOLUENO (2)	GUNN	T= 25°C X ₁ = 0.6425 X ₂ = 0.3575	96.99	96.99	cm ³ /gmol	0.0
CLOROFORMO (1) - BENCENO (2)	GUNN	T= 25°C X ₁ = 0.5111 X ₂ = 0.4889	84.60	89.29	cm ³ /gmol	5.00

ANÁLISIS DE RESULTADOS

Las tablas de resultados demuestran en forma general la evaluación de propiedades termofísicas y de transporte por el método del Principio de Estados Correspondientes, obtiene errores menores del 10%. Esto significa que los resultados son confiables para hacer un análisis más amplio, es decir, con mayor número de compuestos.

No obstante hay que señalar que también existen valores arriba del 10% con respecto a los reales, pero esto se debe a que no se contaba con valores reportados en la literatura a las condiciones de cálculo.

También el programa de cómputo del método del Principio de Estados Correspondientes puede ser de utilidad para la determinación de algunas propiedades termofísicas y de transporte que posteriormente ayuden al cálculo de alguna o varias propiedades termodinámicas, físicas y de transporte que se requieran, como por ejemplo, para el cálculo de la conductividad térmica, es necesario contar con valor de capacidad calorífica, los cuales pueden calcularse mediante este método.

Es decir, en el programa realizado, al evaluar la Propiedad Termodinámica denominada Conductividad Térmica para mezclas gaseosas por el método de Misić & G. Thodos, se pide entre otros datos de alimentación los valores de las constantes A, B, C y D para conocer primeramente el valor de la capacidad calorífica, en caso de no contar con estas constantes, se puede ir al cálculo de esta propiedad y calcular su valor por cualquiera de los métodos que se presentan a elegir de acuerdo al tipo de fluidos que se estén trabajando.

Tabla 1: En esta tabla se observa que el Etano evaluado con diferentes métodos tiene resultados similares, lo cual indica que los métodos utilizados son confiables. Con lo que respecta al Butanol, además de tener resultados similares también tiene un bajo porcentaje de error.

Tabla 2: En esta tabla se observa que los resultados obtenidos son confiables y con bajo porcentaje de error, excepto Acetona (Thomas), Acetileno (Thodos) e Isopentano (Thodos), esto podría ser por el tipo de compuesto evaluado.

- Tabla 3: En esta tabla se observan dos valores de casi el 20% de error, Benceno-Tolueno (Yen Ok) y Cloroformo-Benceno (Yen Ok), esto podría ser porque el método utilizado no es el adecuado a estas condiciones de evaluación, sin embargo, la aproximación con respecto a otros métodos es satisfactoria.*
- Tabla 4: En esta tabla se observa que los valores obtenidos son menores del 10% , lo que indica que los métodos utilizados tienen buena aproximación a excepción del Nitrógeno-Bióxido de carbono (Mathur), esto podría ser debido a que el cálculo se hizo a alta temperatura.*
- Tabla 5: En esta tabla se observa que los valores obtenidos son satisfactorios ya que son menores del 10% , excepto el de n-otano (Riedel), esto podría ser debido a que el método utilizado no es el adecuado para este tipo de fluidos.*
- Tabla 6: En esta tabla se observa que realmente los métodos utilizados son satisfactorios, ya que los valores obtenidos son menores del 10% del real.*
- Tabla 7: En esta tabla se observan valores de hasta el 10% en Hexano-Tolueno (Letsou - Stiel) y Hexano-Clorobenceno (Letsou - Stiel), esto podría ser debido a que el método no es 100% adecuado para estos sistemas.*
- Tabla 8: En esta tabla se observan valores arriba del 10% , pero esto podría ser debido a que los cálculos se hicieron a temperatura alta, sin embargo, los métodos utilizados son satisfactorios.*

**ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA**

IV. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

CONCLUSIONES

En primera instancia se puede concluir que la información basada para la evaluación de propiedades termodinámicas y de transporte via el Principio de Estados Correspondientes (P.E.C.) fue difícil pero satisfactoria, ya que la información utilizada para este trabajo puede ser realmente útil para cualquier proyecto de ingeniería que requiera de este tipo de evaluaciones.

El programa de cómputo presentado es realmente práctico para utilizarse, ya que se buscó la forma de que contuviera el menor número de datos a utilizar para las ecuaciones aplicadas, esto disminuye en mucho el tiempo de cómputo, así como el tiempo disponible para los cálculos. Dicho programa de cómputo fue realizado en lenguaje Fortran con el fin de que pueda ser utilizado como apoyo a nivel de enseñanza e industrial.

Este trabajo presenta los diversos métodos para predecir las propiedades termodinámicas y de transporte via el P.E.C. los cuales fueron se analizados para cada uno de las propiedades mencionadas en los capítulos anteriores. Estos métodos de evaluación se seleccionaron debido a que los resultados obtenidos demostraron menor porcentaje de error o pequeñas desviaciones a los valores reales.

Cabe mencionar que en la actualidad existen programas de cómputo que son utilizados tanto en la industria como en la enseñanza y que tienen resultados excelentes, pero no obstante este trabajo puede ser utilizado como una guía o herramienta para primeros cálculos, puesto que los programas de cómputo son demasiado costosos.

Se observa en las tablas de resultados que los valores calculados son muy aproximados a los reales, con esto se puede concluir finalmente que el método de evaluación via el principio de estados correspondientes (P.E.C.), puede ser comparado con respecto a buenos resultados con cualquier otro tipo de método que evalúe propiedades termodinámicas y de transporte. También lo que se ha pretendido demostrar es la aplicación del método P.E.C. para las distintas propiedades y para diversos compuestos.

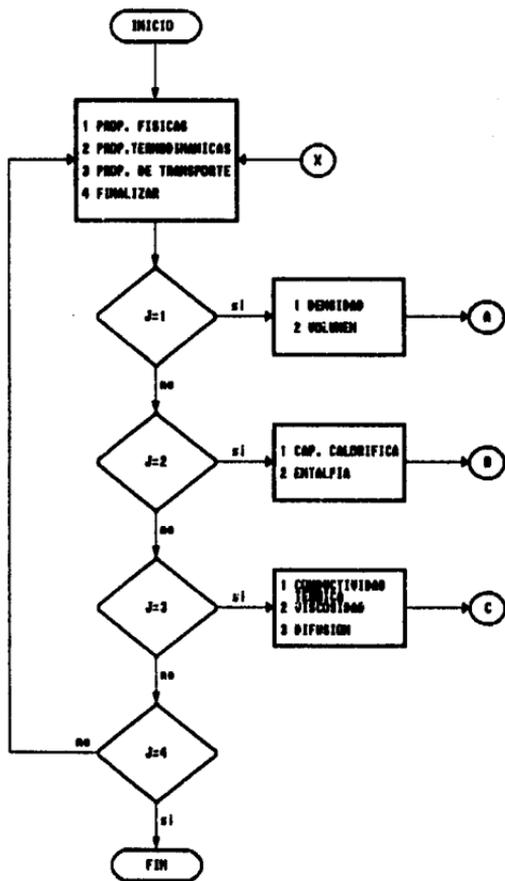
RECOMENDACIONES

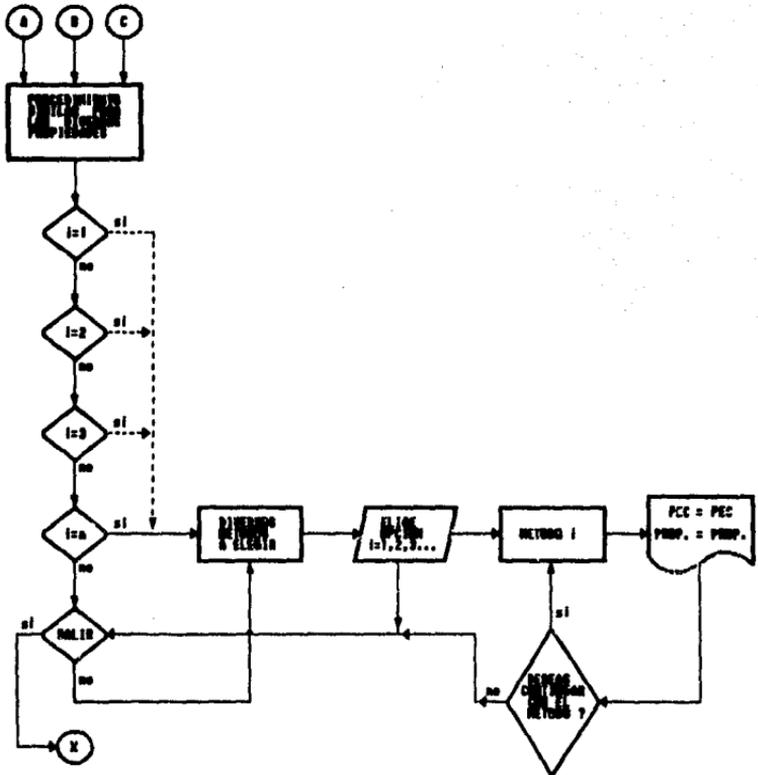
Como recomendación principal para poder evaluar las propiedades por el método de Principio de Estados Correspondientes, es el que se tenga cuidado en el método a elegir y que se sigan correctamente cada uno de los pasos que el programa solicita. También es necesario familiarizarse con la nomenclatura del programa para cada una de las propiedades a evaluar.

PROGRAMA DE COMPUTO

EVALUACION DE PROPIEDADES TERMOFISICAS Y DE TRANSPORTE
VIA EL PRINCIPIO DE ESTADOS CORRESPONDIENTES

DIAGRAMA DE FLUJO





PAGINACION VARIA

COMPLETA LA INFORMACION

```

C      PROGRAMA QUE EVALUA LAS PROPIEDADES TERMOFISICAS Y DE TRANSPORTE
C      VIA EL P.E.C.
5 WRITE(*,*)'*****'
C*****'
WRITE(*,*)'
C      *'
WRITE(*,*)'PROGRAMA PRINCIPAL QUE EVALUA PROPIEDADES TERMOFIS
CICAS      *'
WRITE(*,*)'
C      *'
WRITE(*,*)'Y DE TRANSPORTE VIA EL PRINCIPIO DE ESTADOS CORRES
CNDIENTES  *'
WRITE(*,*)'
C      *'
WRITE(*,*)'*****'
C*****'
PAUSE
CALL LIMPIO
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'PROPIEDADES A EVALUAR'
WRITE(*,*)'1.- CAPACIDAD CALORIFICA'
WRITE(*,*)'2.- CONDUCTIVIDAD TERMICA'
WRITE(*,*)'3.- DENSIDAD'
WRITE(*,*)'4.- DIFUSION'
WRITE(*,*)'5.- ENTALPIA'
WRITE(*,*)'6.- PRESION DE VAPOR'
WRITE(*,*)'7.- VISCOSIDAD'
WRITE(*,*)'8.- VOLUMEN'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'QUE PROPIEDAD ELIGES ?'
READ(*,*) OPC
CALL LIMPIO
IF (OPC.EQ.1) GOTO 200
IF (OPC.EQ.2) GOTO 300
IF (OPC.EQ.3) GOTO 400
IF (OPC.EQ.4) GOTO 500
IF (OPC.EQ.5) GOTO 600
IF (OPC.EQ.6) GOTO 1000
IF (OPC.EQ.7) GOTO 1100
IF (OPC.EQ.8) GOTO 1200
STOP
200 WRITE(*,*)'PROPIEDAD ELEGIDA CAPACIDAD CALORIFICA'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'CALCULO DE CAPACIDAD CALORIFICA DE LIQUIDOS POLARES Y
C NO POLARES'
WRITE(*,*)'LOS METODOS A ELEGIR SON LOS SIGUIENTES :
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'1.- METODO DE STERNLING-BROWN: " LIQUIDOS NO- POLARES'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'2.- METODO DE ROWLINSQN-BONDI: " LIQUIDOS NO-POLARES'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'3.- METODO DE LYMAN DANER: " PARA LIQUIDOS POLARES Y
C NO-POLARES "
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'4. METODO DE YUAN-SIEL: " PARA LIQUIDOS NO POLARES"
C
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'5.- METODO DE LEE LESLER: " PARA LIQUIDOS POLARES Y

```

```

CND-POLARES " "
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) ' 8.- METODO DE LYMAN-DANNER: " LIQUIDOS PUROS EN SATURACION " '
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) ' SELECCIONA EL METODO ADECUADO'
WRITE(8,8) " "
IF(OPC.EQ.1)CALL SAN JOSE
IF(OPC.EQ.2)CALL SAN JOSE
IF(OPC.EQ.3)CALL SAN JOSE
IF(OPC.EQ.4)CALL SAN JOSE
IF(OPC.EQ.5)CALL SAN JOSE
IF(OPC.EQ.6)CALL LYMAN
GOTO 1300
300 WRITE(8,8) 'PROPIEDAD ELEGIDA CONDUCTIVIDAD TERMICA'
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) ' CALCULO DE CONDUCTIVIDAD TERMICA DE LA SIGUIENTE FORMA C:'
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) '1.- METODO DE STIEL: " CONDUCTIVIDAD TERMICA DE MEZCLAS C GABEOSAS " '
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) '2.- METODO DE THOMAS: " CONDUCTIVIDAD TERMICA DE HIDROCARBUROS A PRESION ALTA " '
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) '3.- METODO DE THODOS: " CONDUCTIVIDAD TERMICA DE MEZCLAS " '
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) ' SELECCIONA EL METODO ADECUADO '
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) " "
IF(OPC.EQ.1)CALL STIEL2
IF(OPC.EQ.2)CALL THOMAS
IF(OPC.EQ.3)CALL THODOS
GOTO 1300
400 WRITE(8,8) 'PROPIEDAD ELEGIDA DENSIDAD'
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) ' CALCULO DE DENSIDAD '
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) '1.- METODO DE CHUEH: "DENSIDAD DE LIQUIDOS PUROS SATURADOS" '
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) '2.- METODO DE MARTIN: "DENSIDAD DE LIQUIDOS PUROS SATURADOS" '
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) '3.- METODO DE YEN-WOOD: "DENSIDAD DE LIQUIDOS SATURADOS A CUALQUIER TEMPERATURA" '
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) '4.- METODO DE YEN-WOOD: "DENSIDAD DE MEZCLA DE LIQUIDOS SATURADOS A CUALQUIER TEMPERATURA" '
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) '5.-METODO DE YAMADA PARA LIQUIDOS SATURADOS'
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) ' SELECCIONA EL METODO ADECUADO'
WRITE(8,8) " "
WRITE(8,8) " "
IF (OPC.EQ.1)CALL CHUEH
IF (OPC.EQ.2)CALL MARTIN

```

```

IF (OPC.EQ.3)CALL YENWOOD
IF (OPC.EQ.4)CALL YENOK
IF (OPC.EQ.5)CALL YAMADA
GOTO 1300
500 WRITE (*,*) 'PROPIEDAD ELEGIDA DIFUSION'
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' CALCULO DE DIFUSION'
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) '1.- METODO DE MATHUR: "DIFUSIVIDAD DE GASES Y LIQUIDOS
C A PRESION NORMAL Y PRESIONES ELEVADAS" '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) '2.- METODO DE CHEN: "DIFUSIVIDAD DE NO-ELECTROLITOS EN
C LIQUIDOS ORGANICOS"'
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' SELECCIONA EL METODO ADECUADO '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' '
IF(OPC.EQ.1) CALL MATHUR
IF(OPC.EQ.2) CALL CHEN
GOTO 1300
600 WRITE (*,*) 'PROPIEDAD ELEGIDA ENTALPIA'
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' CALCULO DE ENTALPIA ISOTERMICA'
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) '1.- METODO DE CORRELACION YEN-ALEXANDER;'
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' A.- CALCULO PARA VAPOR SATURADO'
WRITE (*,*) ' B.- CALCULO PARA LIQUIDO SATURADO'
WRITE (*,*) ' C.- CALCULO PARA VAPOR SOBRECALENTADO'
WRITE (*,*) ' D.- CALCULO PARA LIQUIDO COMPRIMIDO'
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) '2.- METODO POR CORRELACION DE PITZER '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' SELECCIONA EL METODO ADECUADO '
WRITE (*,*) ' '
IF(OPC.EQ.1) CALL ALEX2
IF(OPC.EQ.2) CALL ENTALPIA
GOTO 1300
1000 WRITE (*,*) 'PROPIEDAD ELEGIDA PRESION DE VAPOR'
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' CALCULO DE PRESION DE VAPOR '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' METODO DE JACK: PRESIONES DE VAPOR PARA LIQ. PUROS '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) '1.- ECUACION DE ANTOINE '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) '2.- ECUACION DE WAGNER '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) '3.- ECUACION DE RIEDEL '
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' '
CALL JACK
WRITE (*,*) ' '
WRITE (*,*) ' '
GOTO 1300

```

```

1100 WRITE (*,*) 'PROPIEDAD ELEGIDA VISCOSIDAD'
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' CALCULO DE VISCOSIDAD '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' 1.- METODO DE WILKE: " VISCOSIDAD DE MEZCLAS GASEOSA
      CB " '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' 2.- METODO DE DEAN-STIEL: " VISCOSIDAD DE MEZCLAS GA
      CSEOSAS " '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' 3.- METODO DE YOON-THODOS: " VISCOSIDAD DE MEZCLAS G
      CASEOSAS POLARES Y NO POL ARES A PRESIONES BAJAS " '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' 4.- METODO DE LETSQU-STIEL: " VISCOSIDAD DE MEZCLAS
      C " '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' SELECCIONA EL METODO ADECUADO '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' '
      IF (OPC.EQ.1) CALL WILKEOK
      IF (OPC.EQ.2) CALL DEAN
      IF (OPC.EQ.3) CALL YT
      IF (OPC.EQ.4) CALL LETSQU
      GOTO 1300
1200 WRITE (*,*) 'PROPIEDAD ELEGIDA VOLUMEN'
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' CALCULO DE VOLUMEN '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' 1.- METODO DE RACKETT: " VOLUMEN MOLAR DE LIQUIDOS PUR
      CROS " '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' 2.- METODO DE LICKMAN: " VOLUMEN MOLAR DE MEZCLAS LIGU
      CIDAS " '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' SELECCIONA EL METODO ADECUADO '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' '
      WRITE(*,*) ' '
      IF (OPC.EQ.1) CALL RACKETT
      IF (OPC.EQ.2) CALL LICKMA2
      GOTO 1300
10  FORMAT (A)
1300 WRITE (*,*) 'DESEAS CONTINUAR CON EL METODO ? (S/N) '
      READ(*,10) SI
      IF (SI.EQ.'S') GOTO 5
      END
      SUBROUTINE LIMPIO
      DO 10, I=1,24
      WRITE(*,*) ' '
10  CONTINUE
      RETURN
      END

```

```

C
SUBROUTINA PARA EL CALCULO DE CAPACIDADES CALORIFICAS POR LOS METOD
OS SELECCIONADOS POR ROBERT C.REID Y JUAN L. SAN JOSE
C
SUBROUTINE SANJOSE
5 WRITE (*,*)'*****'
C*****'
WRITE(*,*)' *
C
WRITE(*,*)' * METODOS PARA CALCULAR CAPACIDADES CALORIFICAS
C
WRITE(*,*)' *
C
WRITE(*,*)' * DE LIQUIDOS POLARES Y NO-POLARES
C
WRITE(*,*)' *
C
WRITE(*,*)' *
C*****'
C*****'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' ELIGE EL METODO ADECUADO '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
PAUSE
WRITE(*,*)' 1.-STERNLING-BROWN LIQ. NO-POLAR ? [0.4<Tr<1.0] [SB]'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' 2.-ROWLINSON-BONDI LIQ. NO POLAR ? [0.4<Tr<1.0] [RB]'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' 3.-LYMAN-DANNER LIQ. POLAR Y NO POLAR ? [0.35<Tr<0.96]
C [LD]'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' 4.-YUAN-STIEL LIQ NO-POLARES ? [0.4<Tr<0.96] [YS]'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' 5.-LEE-KESLER LIQ POLAR Y NO POLAR ? [0.44<Tr<0.94] [L
CK]'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' QUE OPCION ELIGES ? (TECLEA LAS LETRAS EN EL RECUADRO)'
READ(*,10) SB
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
IF (SB.EQ.'SB') GOTO 50
IF (SB.EQ.'RB') GOTO 100
IF (SB.EQ.'LD') GOTO 150
IF (SB.EQ.'YS') GOTO 200
IF (SB.EQ.'LK') GOTO 250
10 FORMAT (A)
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
50 CONTINUE

```

```

WRITE(*,*) ' LA OPCION ELEGIDA ES STARLING-BROWN '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DAME EL FACTOR ACENTRICO '
READ(*,*)W
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' LA TEMPERATURA A LA CUAL DESEAS HACER EL CALCULO EN *K'
READ(*,*)T
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DAME LA TEMPERATURA CRITICA EN *K '
READ(*,*)TC
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' CAPACIDAD CALORIFICA A CONDICIONES NORM [Cal/gmol K]'
READ(*,*)CP1
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
R=1.986
TR=T/TC
CP=(((0.5+2.2*W))*(3.67+11.64*(1-TR)**4+0.634/(1-TR))))*R)+CP1)
WRITE(*,*) ' EL VALOR DE LA CAPACIDAD CALORIFICA ES = ',CP,'[cal/gmo
CI K]'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
GOTO 300
100 CONTINUE
WRITE(*,*) ' LA OPCION ELEGIDA ES ROWLINSON-BONDI '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DAME EL FACTOR ACENTRICO '
READ(*,*)W
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' LA TEMPERATURA A LA CUAL DESEAS HACER EL CALCULO EN *K'
READ(*,*)T
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DAME LA TEMPERATURA CRITICA EN *K '
READ(*,*)TC
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' CAPACIDAD CALORIFICA A CONDICIONES NORM [cal/gmol K]'
READ(*,*)CP1
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
R=1.986
TR=T/TC
CP=(((2.56+0.436/(1-TR))+0.17*W*(17.11+(25.2/TR))*(1-TR)**(1/3)+1.74
C2/(1-TR))))*R)+CP1)
WRITE(*,*) ' EL VALOR DE LA CAPACIDAD CALORIFICA ES = ',CP,'[cal/gmo
CI K]'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '

```

```

WRITE(*,*)' '
GOTO 300
150 CONTINUE
WRITE(*,*)'LA OPCION ELEGIDA ES LYMAN-DANEK'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)'DAME RADIO MOLECULAR DE GIRO '
WRITE(*,*)' (ESTOS VALORES SE ENCUENTRAN EN EL LIBRO REID & SHERWO
COD PAG. 159)'
READ(*,*)RG
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)'DAME EL FACTOR DE ASOCIACION '
WRITE(*,*)' (ESTOS VALORES SE ENCUENTRAN EN EL LIBRO REID & SHERWO
COD PAG. 159)'
READ(*,*)AK
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)'LA TEMPERATURA A LA CUAL DESEAS HACER EL CALCULO EN *K'
READ(*,*)T
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)'DAME LA TEMPERATURA CRITICA EN *K'
READ(*,*)TC
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)'CAPACIDAD CALORIFICA A CONDICIONES NORM[cal/gmol K]'
READ(*,*)CP1
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
R=1.986
TR=T/TC
CP=((((5.0968+0.15826*AK-0.03551*AK**2)+TR*(-7.7275+1.6109*RG)+TR*
C#2*(1.2756*AK+0.03656*AK**2)+TR**5*(9.9296-0.4504*RG-1.0187*AK))-0.
00749*RG**2/TR**2+0.1129*RG/TR**3-0.02185/TR**5)*R)+CP1)
WRITE(*,*)'EL VALOR DE LA CAPACIDAD CALORIFICA ES = ',CP,'[cal/gmo
c1 K]'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
GOTO 300
200 CONTINUE
WRITE(*,*)'LA OPCION ELEGIDA ES YUAN-STIEL'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)'ESTE METODO SIRVE PARA:'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)'1.-LIQUIDOS NO POLARES (0.4<Tr<0.96) [LNP]'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)'2.-LIQUIDOS POLARES (0.44<Tr<0.94) [LP]'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)'QUE OPCION ELIGES ? TECLEAR LAS LETRAS EN EL RECUADRO'
READ(*,10)INF

```

```

WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
IF (LNP.EQ.'LNP') GOTO 60
IF (LNP.EQ.'LP') GOTO 70
60 CONTINUE
WRITE(*,*) ' LA OPCION ELEGIDA ES LIQUIDOS NO POLARES'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DAME EL FACTOR ACENTRICO '
READ(*,*) W
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' CAPACIDAD CALORIFICA A CONDICIONES NORM [cal/gmol K]'
READ(*,*) CP1
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' PARAMETRO DE DESVIACION DELTA CPO (VER TABLA VII CHEMIC
CAL ENGINEERING DEC,20,1976)'
READ(*,*) DCPO
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' PARAMETRO DE DESVIACION DELTA CP1 (VER TABLA VII CHEMIC
CAL ENGINEERING DEC,20,1976)'
READ(*,*) DCP1
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
R = 1.9266
CP = (DCPO+W*DCP1)*R)+CP1
WRITE(*,*) ' EL VALOR DE LA CAPACIDAD CALORIFICA ES = ',CP,' [cal/gmo
l K]'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
GOTO 300
70 CONTINUE
WRITE(*,*) ' LA OPCION ELEGIDA ES LIQUIDOS POLARES'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DAME EL FACTOR ACENTRICO '
READ(*,*) W
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DAME LA CAPACIDAD CALORIFICA A CONDICIONES NORM [cal/g
cmol K]'
READ(*,*) CP1
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DAME LOS PARAMETROS DE DESVIACION DELTA EN EL SIGUIENT
CE ORDEN i (VER TABLA VII CHEMICAL ENGINEERING, DEC.,20,1976)'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DELTA CPOp '
READ(*,*) DCPO
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '

```

```

WRITE(*,*) DELTA CP1p '
READ(*,*)DCP1
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) DELTA CP2p '
READ(*,*)DCP2
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) DELTA CP3p '
READ(*,*)DCP3
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) DELTA CP4p '
READ(*,*)DCP4
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) DELTA CP5p '
READ(*,*)DCP5
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) DAME LA PRESION DE VAPOR A Tr = 0.6 [Ver Reid, Sherwood
C y Prausnitz pag. 328] [atm]
READ(*,*) P0
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) DAME LA PRESION CRITICA [atm] '
READ(*,*)PC
X = LOG10(PV/PC) + 1.70*W+1.552
CP = ((DCP1+W*DCP1+X*DCP2+X**2*DCP3+W**2*DCP4+W*X*DCP5)*R)+CP1
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) EL VALOR DE LA CAPACIDAD CALORIFICA ES = ',CP,'[cal/gm
Co1 K]'
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
GOTO 300
250 WRITE(*,*) 'LA OPCION ELEGIDA ES LEE-KESLER'
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) DAME EL FACTOR ACENTRICO '
READ(*,*)W
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) DAME LOS PARAMETROS DE DESVIACION DE Lee and Kesler IV
CER FIGURAS 3 Y 4 DE CHEMICAL ENGINEERING, DEC, 20, 1976]'
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) DELTA CP0 '
READ(*,*)DCP0
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) DELTA CP1'
READ(*,*)DCP1
R = 1.986

```

```
WRITE(.,.)' '  
WRITE(.,.)' '  
WRITE(.,.)' '  
WRITE(.,.)' DAME LA CAPACIDAD CALORIFICA A CONDICIONES NORM [cal/g  
Cmol K]'  
READ(.,.)CP1  
CP = ((DCPO + DCP1*W)*R)+CP1  
WRITE(.,.)' '  
WRITE(.,.)' '  
WRITE(.,.)' '  
WRITE(.,.)' EL VALOR DE LA CAPACIDAD CALORIFICA ES =',CP,'[cal/gmo  
C1 K]'  
WRITE(.,.)' '  
WRITE(.,.)' '  
WRITE(.,.)' '  
300 WRITE(.,.)' DESEAS CONTINUAR CON EL METODO ? [S/N]'  
READ(.,10) S1  
IF(S1.EQ.'S') GOTO 5  
END
```

```

C
C SUBROUTINA PARA CALCULAR CAPACIDAD CALORIFICA POR EL METODO DE LYMAN
C Y DANNER
C
SUBROUTINE LYMAN
5 WRITE(*,*)'*****'
C*****'
WRITE(*,*)'*
C *'
WRITE(*,*)'* CALCULO DE CAPACIDAD CALORIFICA POR EL METODO DE LYMA
CN Y DANNER *'
WRITE(*,*)'* APLICABLE A LIQUIDOS PUROS EN LA SATURACION
C *'
WRITE(*,*)'*
C *'
WRITE(*,*)'*****
C*****'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' CUAL ES EL VALOR DE LA Tc (*K) ?'
READ(*,*) TEMPC
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' DAME EL VALOR DE LA TEMP. EBULLICION (*K) ?'
READ(*,*) TEMPB
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' DAME LA PRESION CRITICA (atm) ?'
READ(*,*) PCRIT
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' DAME PESO MOLECULAR ?'
READ(*,*) PMOLEC
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' CUAL ES EL VALOR DE LA TEMP. DEL SISTEMA [*K] ?'
READ(*,*) TESIS
TREDUC=TESIS/TEMPC
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' LOS SIGUIENTES VALORES DE MOMENTOS DE INERCIA SE PUEDE
CN OBTENER DE THOMPSON'
WRITE(*,*)' (1966). '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' CUAL ES EL VALOR DEL MOMENTO DE INERCIA "A" ?'
READ (*,*) A
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' CUAL ES EL VALOR DEL MOMENTO DE INERCIA "B" ?'
READ (*,*) B
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' CUAL ES EL VALOR DEL MOMENTO DE INERCIA "C" ?'
READ (*,*) C

```

```

WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) ' DAME EL VALOR DE LA CAPACIDAD CALORIFICA A COND. NORMA
CLEB [cal/gmol *K] ?'
READ (*,*) CP
A1=10.1273
A2=-15.3516
A3=3.2008
A4=10.7302
A5=-0.8949
A6=-0.01489
A7=0.2241
A8=-0.04342
B1=0.31446
B2=2.5346
B3=-2.0242
B4=0.07055
B5=0.07264
IF (TREDUC.LE.0.35) GOTO 100
IF (TREDUC.GE.0.95) GOTO 100
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) ' EL COMPUESTO ES DE ESTRUCTURA PLANA ? [S/N]'
READ (*,10) BI
10 FORMAT (A)
IF (BI.EQ.'N') GOTO 50
RGIRO=SQRT(((A*B)**0.5)/PMOLEC)
GOTO 55
50 RGIRO = SQRT ((2*3.1416*(A*B*C)**0.5)/PMOLEC)
55 X=TEMPC/TEMPB
Y=1/PCRIT
BN = 4.6773+1.8324*RGIRO-0.03501*RGIRO**2
CN=0.7751*BN-2.6354
FACTK=(LOG(Y)-BN*(1-X)-CN*LOG(X)-0.4218*(Y**2-1))/(1-X+LOG(X))
CSAT=A1*TREDUC*(A2+A3*RGIRO)+(TREDUC**5)*(A4+A5*RGIRO)+A6*(RGIRO**
C2)/(TREDUC**2)+A7*RGIRO/(TREDUC**3)+A8/TREDUC**5+FACTK*(B1+B2*TRED
CUC**2+B3*TREDUC**5)+(FACTK**2)*(B4+B5*TREDUC**2)+CP
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) ' EL VALOR DE LA CAPACIDAD CALORIFICA ES= ',CSAT,' cal/
Cgmol.*K'
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
GOTO 110
100 WRITE(*,*) ' @@@ TEMPERATURA REDUCIDA FUERA DE RANGO @@@'
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) ' SOLO APLICABLE EN 0.35 < TR < 0.95'
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
110 WRITE(*,*) ' DESEAS CONTINUAR CON EL METODO ? [S/N]'
READ(*,10) BI
IF (BI.EQ.'S') GOTO 5
END

```



```

WRITE(*,*) 'DAME EL VOLUMEN CRITICO DEL COMPONENTE', I, ' LL/MULJ'
READ(*,*) VC(I)
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
65 CONTINUE
DO 70 I=1,NCOMP
WRITE(*,*) ' DAME EL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD CRITICO DEL COMPONEN
CTE', I
READ(*,*) ZC(I)
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
70 CONTINUE
DO 75 I=1,NCOMP
WRITE(*,*) 'DAME LA PRESION CRITICA DEL COMPONENTE', I, ' [ATM]'
READ(*,*) PC(I)
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
75 CONTINUE
TCM = 0
VCM = 0
ZCM = 0
WTM = 0
PCM = 0
DO 200 I=1,NCOMP
VCM = VCM + X(I)*VC(I)
TCM = TCM + X(I)*TC(I)
ZCM = ZCM + X(I)*ZC(I)
WTM = WTM + X(I)*WT(I)
PCM = PCM + X(I)*PC(I)
200 CONTINUE
205 D=0.4278*TCM**(2.5)/(PCM*WT**(2.5))
NI=1.0
E=0.0867*TCM/PCM/T
J=E*P/NI
ND=1.0/(1-J)-(J*D/E)/(1+J)
ND=ABS(ND-NI)
IF(ND-0.0001)220,220,210
210 NI=ND
GOTO 205
220 RHD=P/(ND*0.08207*T)
RHDR=RHD*VCM
IF(RHDR-0.5)280,250,250
250 IF(RHDR-2.0)300,260,260
260 IF(RHDR-2.8)350,500,500
280 LAMDA=(14E-B*(EXP(0.535*RHDR)-1))
GOTO 400
300 LAMDA=(13.1E-B*(EXP(0.67*RHDR)-1.069))
GOTO 400
350 LAMDA=(2.976E-B*(EXP(1.155*RHDR)+2.016))
GOTO 400
400 TE=(TCM*(0.1666)*WTM*(0.5))/(PCM*(0.6666))
XL=(LAMDA/(TE*ZCM*(5.0)))*XLO
WRITE(*,*) 'EL VALOR DE LA CONDUCTIVIDAD TERMICA ES =', XL, ' [cal/seg
C-cm-K]'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
GOTO 510
500 WRITE(*,*) ' LA DENSIDAD REDUCIDA ESTA FUERA DE RANGO'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
510 WRITE(*,*) ' DESEAS CONTINUAR CON EL METODO ? [S/N]'

```

```
READ(*,*)S1  
IF (S1.EQ."S") GOTO 5  
END
```

FALLA DE ORIGEN

C
 C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA CONDUCTIVIDAD ELECTRICA POR EL METODO DE
 C RICHARD G. CROOKS Y THOMAS E. DAUBERT
 C

```

SUBROUTINE THOMAS
5 WRITE(*,*)'*****'
C*****'
WRITE(*,*)' * METODO DE THOMAS PARA CALCULAR LA CONDUCTIVIDAD
TERMINICA DE *
WRITE(*,*)' * HIDROCARBUROS A PRESION ALTA Y TEMPERATURA
C ALTA *
WRITE(*,*)' * SOLO APLICA CON: 1.0<Tr<3.4
C4.0 *
WRITE(*,*)'*****'
C*****'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' REQUIERO DE LOS SIGUIENTES DATOS: '
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' LA TEMPERATURA A LA CUAL DESEAS HACER EL CALCULO, 'F'
READ(*,*) T
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' LA TEMPERATURA CRITICA DEL COMPONENTE A CALCULAR, 'F'
READ(*,*) TC
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' LA PRESION A LA CUAL DESEAS HACER EL CALCULO, ATM.'
READ(*,*) P
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' LA PRESION CRITICA DEL COMPONENTE A CALCULAR , ATM.'
READ(*,*) PC
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' LA CONDUCTIVIDAD TERMICA DEL COMPONENTE A CALCULAR A P
C. ATM. [BTU/h-ft-'F]'
READ(*,*) CTA
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' HAY DOS TIPOS DE CALCULO PARA ESTE METODO'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' 1.- HIDROCARBUROS CICLICOS ? [HCl]'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' 2.- HIDROCARBUROS NO CICLICOS ? [HNCl]'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' CUAL ELIGES ? (TECLEA LAS LETRAS EN EL RECUADRO)'
READ(*,10)HC
TR = 1/10
PR = P/10

```

FALLA DE ORIGEN

```

WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' EL VALOR DE LA TEMPERATURA REDUCIDA ES = ',TR
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
IF(TR.LE.1.0) GOTO 200
IF(TR.GE.3.4) GOTO 200
WRITE(*,*) 'EL VALOR DE PRESION REDUCIDA ES = ',PR
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
A=-0.0617*(EXP(1.91/TR**9))
WRITE(*,*) ' VALOR DE A= ',A
B=2.19*EXP(1.34/TR**16)
WRITE(*,*) ' VALOR DE B= ',B
CT1=1.0 + ((4.18/TR**4)+0.537*(PR/TR**2))*(1.0-EXP(A*PR**B)+0.51
CO*(PR/TR**3)*EXP(A*PR**B))
IF(HC.EQ.'HC') GOTO 50
IF(HC.EQ.'HNC') GOTO 80
10 FORMAT (A)
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
50 CONTINUE
WRITE(*,*) ' LA OPCION ELEGIDA ES HIDROCARBUROS CICLICOS'
CT2=1.0 + (0.520/TR**4)*(PR**5/(5.38+PR**5))+0.009*(PR/TR)
WRITE(*,*) 'CT2=' ,CT2
GOTO 150
80 CONTINUE
WRITE(*,*) ' LA OPCION ELEGIDA ES HIDROCARBUROS NO CICLICOS'
CT2 = 1.0 + (1.0/TR**5)*(PR**4/(2.44*TR**20+PR**4))+0.012*(PR/TR)
GOTO 150
150 CT = ((CT1 + CT2)*CTA)/2.0
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' EL VALOR DE LA CONDUCTIVIDAD TERMICA ES = ',CT,' [BTU/h
C-ft-'F]'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
GOTO 220
200 WRITE(*,*) '*** EL VALOR DE LA TEMPERATURA REDUCIDA ESTA FUERA DE R
CANGO ***'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
220 WRITE(*,*) 'DESEAS CONTINUAR CON EL METODO ? [S/N]'
READ(*,I0) SI
IF(SI.EQ.'S') GOTO 5
END

```

FALLA DE ORIGEN

```

C
C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA CONDUCTIVIDAD TERMICA POR EL METODO DE
C MISIC Y G. THODOS
C
C SUBROUTINE MISIC Y G. THODOS
C ESTE PROGRAMA CALCULA CONDUCTIVIDAD TERMICA DE MEZCLAS GASEOSAS
C POR EL METODO DE MISIC & THODOS
C
C REFERENCIA: AICHE J. 11.650.1965
C
C NOMENCLATURA
C
C X= FRACCION MOL
C PM= PESO MOLECULAR
C K= CONDUCTIVIDAD TERMICA, [CAL/CM S *K]
C TS= TEMPERATURA [*K]
C PS= PRESION [ATMS]
C TC= TEMPERATURA CRITICA, [*K]
C PC= PRESION CRITICA, [ATMS]
C CP= CAPACIDAD CALORIFICA, [CAL/GMOL *K]
C NCOMP=NUMERO DE COMPUESTOS
C REAL K
C DIMENSION X(10),PM(10),TC(10),PC(10),CP(10),A(10),B(10),C(10),D(10)
C)
5 WRITE (*,*)'*****'
C*****'
WRITE(*,*)'
C '
WRITE(*,*)' ESTE PROGRAMA EVALUA LA CONDUCTIVIDAD TERM
CICA ' DE MEZCLAS GASEOSAS POR EL METODO DE MISIC &
WRITE(*,*)' CTHODOS '
WRITE(*,*)'
C '
WRITE(*,*)'*****'
C*****'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' PARA EL CALCULO NECESITO LOS SIGUIENTES DATOS...'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' TEMPERATURA DEL SISTEMA [*K] ?'
READ(*,*)TS
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' PRESION DEL SISTEMA [Atm] ?'
READ(*,*)PS
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' NUMERO DE COMPONENTES EN LA MEZCLA GASEOSA ?'
READ(*,*)NCOMP
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
DO 75 I=1, NCOMP
WRITE(*,*)'DAME LA FRACCION MOL DEL COMPONENTE',I
READ(*,*) X(I)

```

FALLA DE ORIGEN

```

WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
75 CONTINUE
DO 85 I=1, NCOMP
WRITE(*,*) DAME EL PESO MOLECULAR DEL COMPONENTE', I
READ(*,*) PM(I)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
85 CONTINUE
DO 90 I=1, NCOMP
WRITE(*,*) DAME LA TEMPERATURA CRITICA [°K] DEL COMPONENTE', I
READ(*,*) TC(I)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
90 CONTINUE
DO 95 I=1, NCOMP
WRITE(*,*) DAME LA PRESION CRITICA [atm] DEL COMPONENTE', I
READ(*,*) PC(I)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
95 CONTINUE
105 FORMAT (A)
WRITE(*,*) DAME DATOS DE LAS CONSTANTES A, B, C, y D PARA CALCULA
CR EL CP
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
DO 110 I=1, NCOMP
WRITE(*,*) DAME EL VALOR DE A', I
READ(*,*) A(I)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*) DAME EL VALOR DE B', I
READ(*,*) B(I)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*) DAME EL VALOR DE C', I
READ(*,*) C(I)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*) DAME EL VALOR DE D', I
READ(*,*) D(I)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
110 CONTINUE
DO 115 I=1, NCOMP
CP(I)=A(I)+B(I)*TS+C(I)*TS**2+D(I)*TS**3
WRITE(*,*) EL VALOR DEL CP', I, '=', CP(I), ' [CAL/GMOL °K]'
115 CONTINUE
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
CPM=0.0
DO 120 I=1, NCOMP
CPM=CPM+X(I)*CP(I)
120 CONTINUE
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*) EL VALOR DEL CP DE MEZCLA ES =', CPM
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)

```

FALLA DE ORIGEN

```

WRITE(4,*)
TCM=0.0
PCM=0.0
PMM=0.0
DO 125 I=1, NCOMP
TCM=TCM+X(I)*TC(I)
PCM=PCM+X(I)*PC(I)
PMM=PMM+X(I)*PM(I)
125 CONTINUE
WRITE(*,*) 'TCM=', TCM
WRITE(*,*) 'PCM=', PCM
WRITE(*,*) 'PMM=', PMM
TRM=TS/TCM
WRITE(*,*) 'TRM=', TRM
TAD=(TCM** (0.1666)*PMM** (0.5))/(PCM** (0.6666))
WRITE(*,*) 'TAD=', TAD
IF (TRM.LE.1.0) GOTO 500
K=(1E-6)*((14.52*TRM-5.4)** (0.6666))*CPM/TAD
GOTO 550
500 K=(4.45E-6)*TRM*(CPM/TAD)
550 WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) ' EL VALOR DE LA CONDUCTIVIDAD TERMICA ES =', K, ' [CAL/CM
C S *K]'
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) ' DESEAS CONTINUAR CON ESTE METODO ? [S/N]'
READ(*,105) SI
IF (SI.EQ.'S') GOTO 5
END

```

FALLA DE ORIGEN

C
C
C

SUBROUTINA PARA CALCULAR DENSIDAD POR EL METODO DE CHUEH Y FRAUSNITZ

```

SUBROUTINE CHUEH
5 WRITE(*,*)'*****'
C*****'
  WRITE(*,*)'*
C          *
  WRITE(*,*)'*      ESTE PROGRAMA CALCULA LA DENSIDAD DE LIQUIDOS FU
CROS SATURADOS      *
  WRITE(*,*)'*
C          *
  WRITE(*,*)'*      POR EL METODO DE CHUEH & FRAUSNITZ
C          *
  WRITE(*,*)'*
C          *
  WRITE(*,*)'*****'
C*****'
91 FORMAT (A)
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' DAME EL VALOR DE LA TEMPERATURA A LA CUAL REQUIERES EV
CALUAR LA DENSIDAD [°K]'
  READ(*,*)T
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' DAME EL VALOR DE LA PRESION A LA CUAL QUIERES EVALUAR
CLA DENSIDAD [ATM]'
  READ(*,*)P
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' DAME EL VALOR DE LA TEMPERATURA CRITICA [°K] DEL COMPO
DNENTE A EVALUAR'
  READ(*,*)TC
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' DAME EL VALOR DE LA PRESION CRITICA [ATM] DEL COMPONE
CTE A EVALUAR'
  READ(*,*)PC
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' DAME EL VALOR DE LA PRESION DE VAPOR [ATM] DEL COMPONE
CNTE A EVALUAR'
  READ(*,*)PV
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' DAME EL VALOR DEL FACTOR ACENTRICO [w] DEL COMPONENTE A
C EVALUAR'
  READ(*,*)W
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' DAME EL VALOR DEL PESO MOLECULAR DEL COMPONENTE A EVALU
CAR'
  READ(*,*)PM
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' '
  WRITE(*,*)' '

```

```

WRITE(*,*)'DAME EL VALOR DEL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD [ZC] DEL CO
MPONENTE A EVALUAR'
READ(*,*)ZC
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' DAME EL VALOR DEL VOLUMEN CRITICO [ML/G-MOL] DEL COMPO
NENTE A EVALUAR'
READ(*,*)VC
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
TR=T/TC
DC=((1/VC))*PM
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
AO=0.11917
A1=0.98465
A2=-0.55314
B0=0.009513
B1=-1.60378
B2=-0.15793
C0=0.21091
C1=1.82484
C2=-1.01601
D0=-0.06922
D1=-0.61432
D2=0.34095
E0=0.0748
E1=-0.34546
E2=0.46795
F0=-0.084476
F1=0.087037
F2=-0.239938
VR0=A0+B0*TR+C0*TR**2+D0*TR**3+E0/TR+F0*LOG(1-TR)
VR1=A1+B1*TR+C1*TR**2+D1*TR**3+E1/TR+F1*LOG(1-TR)
VR2=A2+B2*TR+C2*TR**2+D2*TR**3+E2/TR+F2*LOG(1-TR)
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
DS=DC/(VR0+W*VR1+W**2*VR2)
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
N=(1.0-0.89*W)*(EXP(6.9547-76.2653*TR+191.3060*TR**2-203.5472*TR**
C3+B2.7631*TR**4))
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
D=DS*(1+(9*ZC*N*(P-FV)/FC))**(1/9)
WRITE(*,*)' EL VALOR DE LA DENSIDAD ES =',D,' [G-MOL/ML]'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' DESEAS CONTINUAR CON EL METODO ? [S/N]'
READ(*,91)SI
IF(SI.EQ.'S')GOTO 5
END

```

C
C
C

SUBROUTINE PARA CALCULAR LA DENSIDAD POR EL METODO DE MARTIN

```
SUBROUTINE MARTIN
5 WRITE(*,*)'*****'
C*****'
WRITE(*,*)' *
C *
WRITE(*,*)' * ESTE PROGRAMA EVALUA LA DENSIDAD DE LIQUIDOS PUROS
C SATURADOS *
WRITE(*,*)' *
C *
WRITE(*,*)' * POR EL METODO DE MARTIN
C *
WRITE(*,*)' *
C *
WRITE(*,*)' *****'
C*****'
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' * PARA EL CALCULO NECESITO DE LOS SIGUIENTES DATOS: *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' * FACTOR DE COMPRESIBILIDAD CRITICA "Zc" ? *
READ(*,*)ZC
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' * TEMPERATURA A LA CUAL DESEAS HACER EL CALCULO ? [*K]
READ(*,*)T
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' * TEMPERATURA CRITICA "Tc" ? [*K] *
READ(*,*)TC
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' * DENSIDAD CRITICA "Dc" ? [g/cm3] *
READ(*,*)DC
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
A=17.4425-714.576*ZC+987.405*ZC**2-1522.06*ZC**3
IF(ZC.GE.0.26) GOTO 20
B=-7.28257+13.6377*ZC+107.4844*ZC**2-384.211*ZC**3
GOTO 30
20 B=60.2871-402.063*ZC+501*ZC**2+641*ZC**3
30 D=0.93-B
TR = 1/TC
DR = 1+A*(1-TR)**(1/3)+B*(1-TR)**(2/3)+D*(1-TR)**(4/3)
DSAT = DR*DC
WRITE(*,*)' EL VALOR DE LA DENSIDAD ES =',DSAT,' [g/cm3]'
10 FORMAT (A)
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' * DESEAS CONTINUAR CON EL METODO ? [S/N]'
READ(*,*)SI
IF(SI.EQ.'S') GOTO 5
END
```

C
C
C

SUBROUTINA PARA CALCULAR LA DENSIDAD POR EL METODO DE YEN Y WOODS

SUBROUTINE YEN-WOOD

REAL K(4)

5 WRITE(*,*)'*****'

C*****

WRITE(*,*)'

C

WRITE(*,*)'

CIDOS PUROS

WRITE(*,*)'

CION, CUYA

WRITE(*,*)'

C

WRITE(*,*)'

C

WRITE(*,*)'

C

WRITE(*,*)'

ESTE PROGRAMA CALCULA LA DENSIDAD DE LIQU
SATURADOS A CUALQUIER TEMPERATURA Y PRES
TEMPERATURA REDUCIDA SEA < DE 1.0
POR EL METODO DE YEN & WOODS

C*****

91

FORMAT (A)

WRITE(*,*)'

DAME EL VALOR DE LA TEMPERATURA A LA CUAL REQUIERES EV
CALUAR LA DENSIDAD [°K]

READ(*,*)T

WRITE(*,*)'

DAME EL VALOR DE LA TEMPERATURA CRITICA [°K] DEL COMPO
NENTE A EVALUAR

READ(*,*)TC

WRITE(*,*)'

100

WRITE(*,*)'

DAME EL VALOR DEL VOLUMEN CRITICO [CM³/G-MOL] DEL COMPO

```

CLIENTE A L.V.O.J.R.'
READ(*,*)VC
TR=T/TC
DC=1/VC
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
F(1)=17.4415-214.578*ZC+989.625*ZC**2-1522.06*ZC**3
IF (ZC.GT.0.26) GOTO 20
K(2)=-3.28257+13.6377*ZC+107.4844*ZC**2-384.211*ZC**3
GOTO 25
20 F(2)=60.2091-492.063*ZC+501.0*ZC**2+641.0*ZC**3
25 F(3)=0.0
K(4)=0.92*F(2)
SUMF=0
DO 30 I=1,4
SUMF=SUMF+(F(I)**((1-TR)**(I/3)))
30 CONTINUE
DS=(1+SUMF)*DC
WRITE(*,*)' EL VALOR DE LA DENSIDAD'
WRITE(*,*)' A ESTA TEMPERATURA ES=',DS,' [G-MOL/ML]'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
40 WRITE(*,*)' DESEAS CONTINUAR CON EL METODO ? [S/N]'
READ(*,*)SI
IF (SI.EQ.'S')GOTO 5
END

```



```

WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
75 CONTINUE
DO 80 I=1,NCOMP
WRITE(*,*)'DAME LA TEMPERATURA CRITICA [°C] DEL COMPONENTE',I
READ(*,*)TC(I)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
80 CONTINUE
DO 85 I=1,NCOMP
WRITE(*,*)'DAME LA PRESION CRITICA [ATM] DEL COMPONENTE',I
READ(*,*)PC(I)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
85 CONTINUE
DO 90 I=1,NCOMP
WRITE(*,*)'DAME EL VOLUMEN CRITICO [LITRO/MOL] DEL COMPONENTE',I
READ(*,*)VC(I)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
90 CONTINUE
DO 95 I=1,NCOMP
WRITE(*,*)'DAME EL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD CRITICO (ZC) DEL COMP
ONENTE',I
READ(*,*)ZC(I)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
95 CONTINUE
C
C
C   CALCULO DE PROPIEDADES PSEUDOCRITICAS
TCM = 0
VCM = 0
ZCM = 0
DO 100 I=1,NCOMP
TCM = TCM + Y(I)*TC(I)
VCM = VCM + X(I)*VC(I)
100 ZCM = ZCM + X(I)*ZC(I)
FCM = ZCM*TCM*0.08205/VCM
105 FORMAT(A)
C
C
C   DENSIDAD DEL LIQUIDO SATURADO
C
C
C   CALCULO DE PROPIEDADES REDUCIDAS
TR=(TS+273.16)/(TCM+273.16)
PR=PS/FCM
AA=17.4475-214.5874*ZCM+989.625*ZCM**2-1522.66*ZCM**3
IF(ZCM<0.28)111,111,110
110 BB=69.2091-402.063*ZCM+501.0470*ZCM**2+641.0*ZCM**3
GOTO 120
111 BB=-3.2825*10**6377*ZCM+197.4044*ZCM**2-384.21*ZCM**3
120 D = 0.92*BB
IF(TR<1.0)121,122,122
122 WRITE(*,*)'LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MAYOR DE 1.0'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)'POR LO TANTO NO SE PUEDE REALIZAR EL CALCULO'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
GOTO 600

```



```

B3=.1625
B4=-.2135
B5=0.08643
C1=.05626
C2=-.3518
C3=.6194
C4=-.3009
D1=-21.0
D2=55.174
D3=-33.637
D4=-28.109
D5=26.277
156 CONTINUE
EYE = W1+W2*(1-TR)**(1/3)+A3*(1-TR)**(2/3)+A4*(1-TR)
C+A5*(1-TR)**(4/3)
XJ = B1+B2*(1-TR)**(1/3)+B3*(1-TR)**(2/3)+B4*(1-TR)+B5*(1-TR)**(4/3)
C3)
XL = D1+D2*TR+D3*TR**2+D4*TR**3
XL = D1+D2*(1-TR)**(1/3)+D3*(1-TR)**(2/3)+D4*(1-TR)+D5*(1-TR)**(4/3)
C3)
IF (DELFR=0.2) 310,127,137
137 DELT=EYE+XJ*ALOG(DELFR)+XH*EXP(XL*DELFR)
GOTO 311
310 DELT1=EYE+XJ*(-1.60944)+XH*EXP(XL*0.20)
DELT=DELT1*DELFR/0.20
311 CONTINUE
EE=0.714-1.626*(1-TR)**(1/3)-0.646*(1-TR)**(2/3)+3.699*(1-TR)-2.19
C8*(1-TR)**(4/3)
FF=0.260*TR**2.09677/(1+.8*(-ALOG(TR))**0.441)
GG=0.03+4.221*(1.01-TR)**0.75*EXP(-7.848*(1.01-TR))
HH=10.6+45.22*(1-TR)**(1/3)-193.79*(1-TR)**(2/3)+114.44*(1-TR)-47.
C38*(1-TR)**(4/3)
IF (DELFR=0.20) 312,313,313
312 DELR=(EE+FF*(-1.60944)+GG*EXP(HH*0.20))*DELFR/0.20
GOTO 315
313 DELR=EE+FF*ALOG(DELFR)+GG*EXP(HH*DELFR)
315 RR=RRS+DELR*DELT
RHO=RR/VM
GOTO 150
500 CONTINUE
WRITE(*,*) ' DESEAS CONTINUAR CON ESTE METODO ? [S/N]'
READ(*,105)SI
IF (SI.EQ.'S') GOTO 5
END

```



```

C4
  GOTO 300
220 IF (TRM-1.0) 230,230,225
225 WRITE(*,*)' TEMPERATURA REDUCIDA FUERA DE RANGO PARA VR'
  WRITE(*,*)'
  WRITE(*,*)'
  WRITE(*,*)'
  GOTO 350
230 VR=1.0+1.3*(1-TRM)**(0.5)*L0610(1-TRM)-0.50879*(1-TRM)-0.91534*(1-
  CTRM)**(2.0)
300 WRITE(*,*)' EL VALOR DE Vr (0) ES =',VR
  WRITE(*,*)'
  WRITE(*,*)'
  WRITE(*,*)'
  VSC=0.08205*TCM*(0.2920-0.0967*WM)/PCM
  WRITE(*,*)' EL VALOR DE VSC ES =',VSC,' [Lt/gmol]'
  WRITE(*,*)'
  WRITE(*,*)'
  WRITE(*,*)'
  V=VSC*VR*(1-WM*TA)*1000
  RHO=PCM/V
  WRITE(*,*)' EL VALOR DE LA DENSIDAD ES =',RHO,' [g/cm3]'
  WRITE(*,*)'
  WRITE(*,*)'
  WRITE(*,*)'
350 WRITE(*,*)' DESEAS CONTINUAR CON EL METODO ? [S/N]'
  READ(*,10) SI
  IF(SI.EQ.'S') GOTO 5
  END

```

C
C
C

SUBROUTINE PARA CALCULAR LA DIFUSIVIDAD POR EL METODO DE G. F. BATHUR
Y GEORGE THODOS

```
SUBROUTINE MATHUR
5 WRITE(*,*)'*****'
C*****'
WRITE(*,*)'
C *
WRITE(*,*)' CALCULO DE LA DIFUSIVIDAD DE GASES Y LIQUIDOS A
C *
WRITE(*,*)' PRESION NORMAL Y PRESIONES ELEVADAS
C *
WRITE(*,*)'*****'
C*****'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' ELIGE A QUE TIPO DE PRESION DESEAS EL CALCULO '
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' 1.- PRESION NORMAL (LIQUIDOS Y GASES) ? [PN]'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' 2.- PRESION ELEVADA (GASES) ? [PE]'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' 3.- PRESION ELEVADA (LIQUIDOS) ? [PL]'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' QUE OPCION ELIGES ? (TECLEA LAS LETRAS EN EL RECUADRO)'
READ(*,10)PN
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
IF (PN.EQ.'PN') GOTO 50
IF (PN.EQ.'PE') GOTO 100
IF (PN.EQ.'PL') GOTO 150
10 FORMAT (A)
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
50 CONTINUE
WRITE(*,*)' LA OPCION ELEGIDA ES PRESION NORMAL (GASES Y LIQUIDOS)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' DAME LA PRESION A LA CUAL DESEAS EL CALCULO ? [atm]'
READ(*,*)P
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' DAME LA TEMPERATURA A LA CUAL DESEAS EL CALCULO ? [°K]'
READ(*,*)T
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' DAME LA PRESION CRITICA ? [atm]'
READ(*,*)PC
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
```

```

WRITE(*,*)'DAME LA TEMPERATURA CRITICA ? [*K]'
READ(*,*)TC
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)'DAME EL PESO MOLECULAR DEL COMPONENTE ? [g/gmol]'
READ(*,*)PM
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
PI = 3.1416
TR = T/TC
PR = P/PC
IF (TR-1.5) 200,250,250
200 CONTINUE
DE = PM**0.5 / (TC**(5/6) * PC**(2/3))
D = (2.427E-S*(7.907*TR-1.66)**1.638) / (DE*P)
WRITE(*,*)'EL VALOR DE LA DIFUSIVIDAD ES = ',D,'[cm2/seg]'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
GOTO 300
250 CONTINUE
DE = PM**0.5 / (TC**(5/6) * PC**(2/3))
D = (44E-S*TR**1.716) / (DE*P)
WRITE(*,*)'EL VALOR DE LA DIFUSIVIDAD ES = ',D,'[cm2/seg]'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
GOTO 300
100 CONTINUE
WRITE(*,*)' LA OPCION ELEGIDA ES A ALTAS PRESIONES (GASES)'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)'DAME LA TEMPERATURA A LA CUAL DESEAS EL CALCULO ? [*K]'
READ(*,*)T
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)'DAME LA DENSIDAD A LA CUAL DESEAS EL CALCULO [gr/ml]'
READ(*,*)DN
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)'DAME LA TEMPERATURA CRITICA DEL COMPONENTE ? [*K]'
READ(*,*)TC
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' DAME LA DENSIDAD CRITICA DEL COMPONENTE ? [gr/ml]'
READ(*,*)DC
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' DAME EL PESO MOLECULAR DEL COMPONENTE ? [g/gmol]'
READ(*,*)PM
TR = T/TC
DR = DN/DC
IF (DR-1.5) 350,350,400
400 WRITE(*,*)' NO SE PUEDE HACER EL CALCULO LA DR > 1.5'
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
WRITE(*,*)' '
GOTO 300
350 CONTINUE

```

```

BE = FM**0.5*PC**(1/3)/TC**(5/6)
D = 10.7E-5*TR/(BE*DR)
WRITE(*,*) ' EL VALOR DE DIFUSIVIDAD ES = ',D,' [cm2/seg]'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
GOTO 300
150 CONTINUE
WRITE(*,*) ' LA OPCION ELEGIDA ES A ALTAS PRESIONES (LIQUIDOS)'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DAME LA TEMPERATURA A LA CUAL DESEAS EL CALCULO [°K]'
READ(*,*)T
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DAME LA PRESION A LA CUAL DESEAS EL CALCULO [atm]'
READ(*,*)P
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DAME LA TEMPERATURA CRITICA DEL COMPONENTE [°K]'
READ(*,*)TC
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DAME LA PRESION CRITICA DEL COMPONENTE [atm]'
READ(*,*)PC
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DAME EL PESO MOLECULAR DEL COMPONENTE [g/gmol]'
READ(*,*)FM
TR = T/TC
PR = P/PC
BE = (FM**0.5)*(PC**(1/3))/(TC**(5/6))
D = (3.67E-5*TR**1.5)/(BE*PR**(0.1))
WRITE(*,*) ' EL VALOR DE DIFUSIVIDAD ES = ',D,' [cm2/seg]'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
300 WRITE(*,*) ' DESEAS CONTINUAR CON EL METODO ? [S/N]'
READ(*,10) SI
IF (SI.EQ.'S') GOTO 5
END

```

C
 C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA DIFUSIVIDAD POR EL METODO DE HANG CHANG
 C CHEN Y SHAW HONG CHEN
 C

```

SUBROUTINE CHEN
5 WRITE(*,*)'*****'
/*****'
WRITE(*,*)'*
/
WRITE(*,*)'*CALCULO DE LA DIFUSIVIDAD DE NO-ELECTROLITOS EN LIQUID
/OS ORGANICOS *
WRITE(*,*)'*
/
WRITE(*,*)'*****'
/*****'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' DAME LA TEMPERATURA A LA CUAL REQUIERES EL CALCULO [*K]
/'
READ(*,*)T
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' DAME LA TEMPERATURA DEL NO-ELECTROLITO [*K]
READ(*,*)TC
TR =T/TC
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' ELIGE EL TIPO DE SISTEMA PARA EL CALCULO '
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' 1.- DIFUSION DE Ar,Kr,Xe, CH4 EN CICLOHEXANO ? [LD]'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' 2.- DIFUSION DE Ar,Kr,Xe,CH4 EN N-OCTANO,N-DECANO,N-TE
CTRADECANO Y CICLOHEXANO ? [NO]'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' 3.- DIFUSION DE CARBON TETRAFLORO, TETRAMETIL EN N-OCTA
CNO,N-DECANO,N-TETRADECANO Y CICLOHEXANO ? [TE]'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' 4.- DIFUSION DE Ar,Kr,Xe,CH4,CARBON TETRAFLORO Y TETRA
CMETIL EN METANOL ? [ME]'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' 5.- DIFUSION DE Ar,Kr,Xe,CH4,CARBON TETRAFLORO Y TETRA
CMETIL EN 1-BUTANOL ? [BU]'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' 6.- DIFUSION DE Ar,Kr,Xe,CH4,CARBON TETRAFLORO Y TETRA
M ETIL EN 1-OCTANOL ? [OC]'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' QUE OPCION ELIGES ? (TECLEA LAS LETRAS DEL RECUADRO)'
READ(*,10)ZO
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
IF(ZO.EQ.'LD') GOTO 50
IF(ZO.EQ.'NO') GOTO 100

```

```

IF(ZO.EQ.'TE') GOTO 100
IF(ZO.EQ.'BU') GOTO 200
IF(ZO.EQ.'HE') GOTO 250
IF(ZO.EQ.'OC') GOTO 300
10 FORMAT (A)
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
50 CONTINUE
WRITE(*,*) ' LA OPCION ELEGIDA ES EN CICLOHEXANO '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DAME LA DIFUSIVIDAD DE REFERENCIA DEL SISTEMA ELEGIDO
C [m2/s] '
READ(*,*)DI
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
DR = (EXP(3.05*(1.01-(1/TR))))*TR
GOTO 500
100 CONTINUE
WRITE(*,*) ' LA OPCION ELEGIDA ES EN N-OCTANO,N-DECANO,N-TETRADECAN
CO Y CICLOHEXANO'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DAME LA DIFUSIVIDAD DE REFERENCIA DEL SISTEMA ELEGIDO
C [m2/s] '
READ(*,*)DI
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
DR = (EXP(2.75*(1.01-(1/TR))))*TR
GOTO 500
150 CONTINUE
WRITE(*,*) ' LA OPCION ELEGIDA ES EN N-OCTANO,N-DECANO,N-TETRADECAN
CO Y CICLOHEXANO'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DAME LA DIFUSIVIDAD DE REFERENCIA DEL SISTEMA ELEGIDO
C [m2/s] '
READ(*,*)DI
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
DR = (EXP(3.39*(1.00-(1/TR))))*TR
GOTO 500
200 CONTINUE
WRITE(*,*) ' LA OPCION ELEGIDA ES EN 1-METANOL'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DAME LA DIFUSIVIDAD DE REFERENCIA DEL SISTEMA ELEGIDO
C [m2/s] '
READ(*,*)DI
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
DR = (EXP(2.67*(1.01-(1/TR))))*TR
GOTO 500
250 CONTINUE
WRITE(*,*) ' LA OPCION ELEGIDA ES EN 1- BUTANOL'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '

```

```

WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) ' DAME LA DIFUSIVIDAD DE REFERENCIA DEL SISTEMA ELEGIDO
C [m2/s] '
READ(*,*)DI
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
DR = (EXP(4.00*(1.00-(1/TR))))*TR
GOTO 500
300 CONTINUE
WRITE(*,*) ' LA OPCION ELEGIDA ES EN 1-OCTANOL '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DAME LA DIFUSIVIDAD DE REFERENCIA DEL SISTEMA ELEGIDO
C [m2/s] '
READ(*,*)DI
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
DR = (EXP(4.19*(1.01-(1/TR))))*TR
GOTO 500
500 CONTINUE
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
DF = DR*DI
WRITE(*,*) ' EL VALOR DE LA DIUSIVIDAD ES = ',DF,' [m2/s]'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' DESEAS CONTINUAR CON EL METODO ? [S/N]'
READ(*,10)SI
IF (SI.EQ.'S') GOTO 5
END

```

```

C
C
C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA ENTALPIA POR EL METODO DE YEN Y ALEXANDER
C
C SUBROUTINE ALEX2
C
C PREDICCION DE ENTALPIA ISOTERMICA POR EL METODO DE YEN Y ALEXANDER
C REF: A.I.Ch.E. JOURNAL, VOL 11(2), P. 324-339 (1965)
C
C DATOS NECESARIOS DE ENTRADA
C *****
C TC=TEMPERATURA CRITICA, GRADOS HELVIN
C VC=VOLUMEN CRITICO, LTS/MOL
C ZC=COMPRESIBILIDAD CRITICA
C NCOMP=NUMERO DE COMPONENTES
C NDATA=NUMERO DE DATOS
C NSTAT=CODIGOS PARA EL ESTADO DE LA MEZCLA
C 1=VAPORES SATURADO
C 2=LIQUIDO SATURADO
C 3=VAPORES SOBRECALENTADO
C 4=LIQUIDO COMPRIMIDO
C
C INICIO DE PROGRAMA
C
C DIMENSION T(10),P(10),PC(10),TC(10),VC(10),ZC(10),X(10)
C REAL M
C FORMATS
C
C 5 FORMAT(2I5)
C 6 FORMAT(F10.5,F10.3,F10.3,F10.5,F10.5)
C 7 FORMAT(F10.3,F10.3)
C 10 FORMAT(5I1)
C 11 FORMAT(1H,30HPRESION REDUCIDA ABAJO DE 0.01)
C 12 FORMAT(1H,30HPRESION REDUCIDA ARRIBA DE 1.0)
C 13 FORMAT(1H,5X,F10.3,5X,F10.3,5X,F11.4,5X,F11.4)
C 14 FORMAT(1H,24HREGION DE LIQUIDO SATURADO)
C 17 FORMAT(1H,24HREGION DE VAPORES SATURADO)
C 18 FORMAT(1H,31HPRESION REDUCIDA ARRIBA DE 30.0)
C 19 FORMAT(1H,32HTEMPERATURA REDUCIDA ABAJO DE 0.0)
C 20 FORMAT(1H,34HTEMPERATURA REDUCIDA ARRIBA DE 1.7)
C 21 FORMAT(1H,34HTEMPERATURA REDUCIDA ABAJO DE 0.75)
C 22 FORMAT(1H,34HTEMPERATURA REDUCIDA ARRIBA DE 2.0)
C 23 FORMAT(1H,32HTEMPERATURA REDUCIDA ABAJO DE 0.9)
C 24 FORMAT(1H,34HTEMPERATURA REDUCIDA ARRIBA DE 4.0)
C 25 FORMAT(1H,32HTEMPERATURA REDUCIDA ABAJO DE 0.0)
C 26 FORMAT(1H,32HTEMPERATURA REDUCIDA ARRIBA DE 25.0)
C 27 FORMAT(1H,37HTEMPERATURA REDUCIDA ABAJO DE 0.0)
C 28 FORMAT(1H,42HTEMPERATURA REDUCIDA MAYOR O IGUAL QUE 1.0)
C 29 FORMAT(1H,57HDESVIACIONES DE ENTALPIA POR EL METODO DE YEN & ALEX
C IANDER)
C 30 FORMAT(1H,57H***** XX ***** XX ** *****.XX *** & ****
C 1***** )
C 31 FORMAT(1H,8X,24HREGION,7X,11HTEMPERATURA,5X,22HDESVIACION DE ENTA
C LPIA)
C 32 FORMAT(1H,8X,24H(185),5X,20H(GRADOS CENTIGRADOS),1X,11H(CAL/G-MOL
C 1),3X,12H(10/16-BOL))
C 33 FORMAT(100)
C 34 FORMAT(1H,0,30H(185) DE VAPORES SOBRECALENTADO)
C 35 FORMAT(1H,1,24HREGION DE LIQUIDO SOBRECALENTADO)
C 36 FORMAT(8E10.5)
C 3191 FORMAT(1H)
C
C 1)
C 2) ESPECIFICACION DE ENTALPIA PARA VAPORES SOBRECALENTADO
C BELPE (E(1),C(1),C(1),E(1),E(1),X(1),N) = (HEF*(1,0-PR/X)) / (EXP-C(1) * PR)

```

```
C) * (1.0 - C2 - C4 - C5) * FR + C2 * ((1.0 / 3.1416) * ATAN(C3 - C3 * FR) + 0.50) ** 2 + C4 + C5  
C * FR + C6 * FR * FR
```

C
C
C

LECTURA DE DATOS DE ENTRADA

```
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' ***** '  
C ***** '  
WRITE(*,*) ' * '  
C * '  
WRITE(*,*) *#PREDICCION DE ENTALPIA ISOTERMICA POR EL METODO DE YEN  
C Y ALEXANDER *# '  
WRITE(*,*) *# '  
C *# '  
WRITE(*,*) ***** '  
C ***** '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) 'DAME EL NUMERO DE COMPONENTES ' '  
READ(*,*) NCOMP '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' CUANTOS DATOS VAS A INTRODUCIR ? ' '  
READ(*,*) NDATA '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' ESTADO DE EL (LOS) COMPONENTE(S). PONDRAS CERO AL ESTAD  
C O QUE NO SE DESCE ' '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' Y, EL NUMERO QUE APARECE AL PRINCIPIO DE CADA ESTADO S  
C I ES EL ELEGIDO? '  
WRITE(*,*) ' 1.- VALOR SATURADO ' '  
READ(*,*) NSTAT1 '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' 2.- LIQUIDO SATURADO ' '  
READ(*,*) NSTAT2 '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' 3.- VAPOR SOBRECALENTADO ' '  
READ(*,*) NSTAT3 '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' 4.- LIQUIDO COMPRESO ' '  
READ(*,*) NSTAT4 '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' '
```



```

WRITE (3,33)
WRITE (3,31)
WRITE (3,32)
DO 301 K=1, NDATA
PR=P(K)/PCM
TR=(T(K)+273.16)/TCM1
TCM=TCM1*1.6
IF (PR-0.01) 260,265,265
260 WRITE (3,11)
GO TO 301
265 IF (PR-1.0) 275,275,270
270 WRITE (3,12)
GO TO 301
275 CONTINUE
GO TO (280,285,290,295), NZ
280 DELH=-TCM*(7.0*PR**0.65135)/(1.0+0.65727*(-ALOG(PR))**0.46108)
GO TO 300
285 DELH=-TCM*(6.5*PR**0.62252)/(1.0+0.76218*(-ALOG(PR))**0.53042)
GO TO 300
290 DELH=-TCM*(5.8*PR**0.63163)/(1.0+1.229*(-ALOG(PR))**0.55454)
GO TO 300
295 DELH=-TCM*(5.4*PR**0.6747)/(1.0+1.227*(-ALOG(PR))**0.503)
300 CONTINUE
DELH1=DELH/1.8
WRITE (3,13) P(K), T(K), DELH1, DELH
301 CONTINUE
302 CONTINUE
C
C   CALCULO PARA LIQUIDO SATURADO
C
IF (NSTA12-2) 370,305,370
305 CONTINUE
WRITE (3,33)
WRITE (3,14)
WRITE (3,33)
WRITE (3,31)
WRITE (3,32)
DO 360 K=1, NDATA
PR=P(K)/PCM
TR=(T(K)+273.16)/TCM1
TCM=TCM1*1.0
IF (PR-0.01) 310,315,315
310 WRITE (3,11)
GO TO 360
315 IF (PR-1.0) 325,325,320
320 WRITE (3,12)
GO TO 360
325 GO TO (330,335,340,345), NZ
330 DELH=-TCM*(7.0+4.5686*(-ALOG(PR))**0.333)/(1.0+0.004*ALOG(PR))
GO TO 350
335 DELH=-TCM*(6.5+4.48*(-ALOG(PR))**0.3952)/(1.0-0.00185*ALOG(PR))
GO TO 350
340 DELH=-TCM*(5.8+5.19*(-ALOG(PR))**0.4963)/(1.0-0.1*ALOG(PR))
GO TO 350
345 DELH=-TCM*(5.4+3.6485*(-ALOG(PR)))/(1.0-0.0056942*ALOG(PR))
350 CONTINUE
DELH0=DELH/1.8
WRITE (3,13) P(K), T(K), DELH0, DELH
360 CONTINUE
370 CONTINUE
C
C   CALCULOS PARA VAPOR SOBRESATURADO
C
IF (NSTA(3-3)) 555,380,555
380 CONTINUE
WRITE (3,14)

```

```

WRITE(3,32)
WRITE(3,31)
WRITE(3,32)
DU 550 K=1, NDATA
NTRACK=0
PR=P(R)/PCM
TR=(R)+273.16)/TCM)
TCM=TCM*1.8
IF(PR-0.01)385,390,395
385 WRITE(3,11)
GO TO 545
390 IF(PR-20.0)400,400,395
395 WRITE(3,18)
GO TO 545
400 CONTINUE
GO TO (405,430,455,495), NZ
405 CONTINUE
IF(TR-0.0)410,415,415
410 WRITE(3,19)
GO TO 545
415 CONTINUE
IF(TR-1.7)425,425,420
420 WRITE(3,20)
GO TO 545
425 CONTINUE
C1=TR/(0.002147*EXP(6.07059*TR))-61.12*(TR-1.0)*EXP(-19.933*(TR-1.0
1)))+1.9976*EXP(-0.9711*(16.04*(TR-0.88)))**10)
C2=EXP(17.671-17.63*TR)+0.17-1.1733*EXP(-17.193*ABS(TR-1.05))
C3=EXP(52.269-49.188*TR)+24.249*EXP(920.5*(TR-1.1)**2)
C4=0.0022456*EXP(3.2917*TR)-EXP(17.3*TR-30.6)
C5=1.9762*EXP(-2.1829*TR)
C6=0.000336*EXP(1.61*TR)-0.0000054*TR**11.5
M=1.07*(-0.323+1.0793*(TR-0.4146))**1.81031)
X0=515.0-250.0*TR
GO TO 520
430 CONTINUE
IF(TR-0.75)435,440,440
435 WRITE(3,21)
GO TO 545
440 IF(TR-2.0)450,450,445
445 WRITE(3,22)
GO TO 545
450 CONTINUE
C1=0.87*EXP(9.645*(1.0-TR))+0.023955*EXP(1.2405*TR)
C2=0.47148*EXP(29.35*(1.0-TR))+0.142
C3=2910.04*EXP(112.04*(1.0-TR))+2.0
C4=1.19384*TR-0.20726**TR-0.90649
C5=3.0*EXP(-2.52*TR)
C6=0.00427*(TR-0.895)*EXP(-0.946*(TR-0.895)**2)
X0=-20.0*TR+170.0
M=1.07(0.0985+1.5078*(TR-0.5952))**1.7336)
GO TO 520
455 CONTINUE
IF(TR-0.9)460,465,465
460 WRITE(3,23)
GO TO 545
465 IF(TR-4.0)475,475,470
470 WRITE(3,24)
GO TO 545
475 CONTINUE
C1=40.0*EXP(-5.7*TR)/(TR-0.01)+0.01
C2=0.25*EXP(-26.2*(TR-1.0))/TR+0.31
C3=17.25*EXP(-16.7*(TR-1.0))+2.75
C4=0.444*(TR-2.0)+0.0215*(TR-2.0)**2+0.0610*(TR-2.0)**3-0.0404*(TR
1-2.0)**4+0.2554
H=(16.0-30.0*BR)-418.405)

```

```

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 CONTINUE
C6=0.00301*(TR-0.8)*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 CONTINUE
IF (TR-0.8)500,500,505
500 WRITE (3,25)
GO TO 545
505 IF (TR-8.0)510,510,515
515 NTRACK=1031
GO TO 525
510 CONTINUE
C1=166.0*EXP(-5.16*TR)+0.017
C2=0.62*EXP(-10.4*(TR-1.0))+0.05
C3=EXP(38.8/TR-34.2)
C4=0.939*(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-3.0)**3
M=(1.0-0.0001499*TR**9.17*EXP(-1.297*TR))/(0.1879+1.0826*(TR-0.65)
1**1.1726)
520 CONTINUE
DELH=-TCM*DELPH(PR,C1,C2,C3,C4,C5,C6,X0,M)
DELH1=DELH/1.8
WRITE (3,13) P(R),T(F),DELH1,DELH
525 IF (NTRACK-1031)545,530,545
530 IF (TR-25)540,540,525
535 WRITE (3,26)
GO TO 545
540 CONTINUE
DELH=-TCM*(0.053*TR-0.00341*TR**2+0.13*PR-0.00176*PR**2-0.02725*TR
1*PR+0.000128*TR**2+0.000508*TR**2*PR+0.000634*TR**3+0.0000258*P
R**3-0.2078)
DELH1=DELH/1.8
WRITE (3,13) P(R),T(F),DELH1,DELH
545 CONTINUE
550 CONTINUE
C
C
C
CALCULOS DE LIQUIDO COMPRIMIDO
555 IF (NSTATA-4)635,559,635
559 CONTINUE
WRITE (3,33)
WRITE (3,35)
WRITE (3,33)
WRITE (3,31)
WRITE (3,32)
DD 630 I=1, NDATA
FR=P(I)/FCM
TR=(T(I)+27.18)/TCM1
TCM=TCM1*1.8
560 IF (FR-0.01)565,570,570
565 WRITE (3,11)
GO TO 630
570 IF (FR-30.0)580,560,575
575 WRITE (3,19)
GO TO 630
580 CONTINUE
IF (TR-0.5)585,590,590
585 WRITE (3,27)
GO TO 630
590 IF (FR-1.0)600,595,595

```

```

595 WRITE(3,20)
    GO TO 630
600 CONTINUE
    GO TO (605,610,615,620),NZ
605 CONTINUE
    DELH=TCM*(-0.00644293*(FR-4.2)-12.93889*(TR-0.77)+10.01311*(TR-0.
177)**2-0.1568074*(FR-4.2)*(TR-0.77)+0.7466842*ALOG(FR)+3.17422*
2ALOG(FR)*ALOG(TR)+1.930566*ALOG(FR)*ALOG(TR)**2+12.72429)
    GO TO 625
610 CONTINUE
    DELH=-TCM*(-0.1074635*(FR-4.2)-15.80132*(TR-0.77)-15.18611*(TR-0.7
17)**2-0.1476876*(FR-4.2)*(TR-0.77)+0.7800774*ALOG(FR)+2.154058*
2ALOG(FR)*ALOG(TR)+2.988533*ALOG(FR)*ALOG(TR)*ALOG(TR)+12.28618)
    GO TO 625
615 DELH=-TCM*(-0.1368774*(FR-4.664)-14.56975*(TR-0.79749)-7.812724*(T
1R-0.79749)**2-0.1642482*(TR-0.79749)*(FR-4.664)+1.036851*ALOG(FR)+
24.463472*ALOG(FR)*ALOG(TR)+4.525831*ALOG(FR)*(ALOG(TR)**2+10.8608
35)
    GO TO 625
620 CONTINUE
    DELH=-TCM*(-0.09572107*(FR-4.2)-9.501235*(TR-0.77)-17.30389*(TR-0.
177)**2-0.3195707*(FR-4.2)*(TR-0.77)+1.368092*ALOG(FR)+4.227096*AL
2OG(FR)*ALOG(TR)+3.181659*ALOG(FR)*ALOG(TR)*ALOG(TR)+9.707447)
625 CONTINUE
    DELH1=DELH/1.8
    WRITE(3,13) P(K),T(K),DELH1,DELH
630 CONTINUE
635 CONTINUE
    END

```

```

C
C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA ENTALPIA POR EL METODO DE CORRELACION DE
C PITZER
C
C SUBROUTINE ENTALPIA
C
C ESTE PROGRAMA CALCULA LA ENTALPIA DE VAPORIZACION USANDO LA CORRELACION DE PITZER AL PRINCIPIO DE ESTADOS CORRESPONDIENTES.
C
C REFERENCIA: J. Am. Chem Soc., 77: 3433 (1955)
C
C NOMENCLATURA
C *****
C
C H = ENTALPIA DE LIQUIDO, (Cal/gmol)
C TS = TEMPERATURA DEL SISTEMA, (GRADOS KELVIN)
C TC = TEMPERATURA CRITICA, (GRADOS KELVIN)
C W = FACTOR ACENTRICO DE PITZER
C
5 WRITE(*,*)'*****'
C*****'
WRITE(*,*)'
C *
WRITE(*,*)' ESTE PROGRAMA EVALUA LA ENTALPIA DE VAPORIZACION
CN USANDO *
WRITE(*,*)' LA CORRELACION DE PITZER AL P.E.C.
C *
WRITE(*,*)'
C *
WRITE(*,*)'*****'
C*****'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' PARA EL CALCULO NECESITO LOS SIGUIENTES DATOS...'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' TEMPERATURA (*K) A LA CUAL DESEAS EVALUAR LA ENTALPIA D
CE VAPORIZACION ?'
READ(*,*) TS
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
10 FORMAT (A)
WRITE(*,*)' DAME EL VALOR DE LA TEMPERATURA CRITICA [*K] ?'
READ(*,*) TC
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' DAME EL VALOR DEL FACTOR ACENTRICO DE PITZER ?'
READ(*,*) W
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
R=1.987
C
C CALCULO DE LA TEMPERATURA REDUCIDA
C
C TR=TS.TC
WRITE(*,*)' TEMPERATURA REDUCIDA ES =',TR,' [*K]'

```

```

WRITE (1,1) ' '
WRITE (1,2) ' '
WRITE (1,3) ' '
IF (TR-1.0) 170,170,190
170 IF (TR-0.6) 190,175,175
WRITE (1,4) ' '
WRITE (1,5) ' '
WRITE (1,6) ' '
175 GOTO 200
190 WRITE (1,7) ' TEMPERATURA REDUCIDA FUERA DE RANGO '
WRITE (1,8) ' '
WRITE (1,9) ' '
WRITE (1,10) ' '
GOTO 350
200 H=(7.08*(1-TR)**(0.354)+10.95*W*(1-TR)**(0.456))*R*TC
WRITE (1,11) ' EL VALOR DE LA ENTALPIA DE VAPORIZACION=',H,' [Cal/gmo
C1]'
WRITE (1,12) ' '
WRITE (1,13) ' '
WRITE (1,14) ' '
350 WRITE (1,15) ' DESEAS CONTINUAR CON EL METODO ? [S/N]'
READ (1,10) SI
IF (SI.EQ.'S') GOTO 5
END

```

C
C
C

SUBROUTINA PARA CALCULAR LA PRESION DE VAPOR POR LOS METODOS SELEC-
CIONADOS POR JACK Mc GARRY.

```
SUBROUTINE JACK
5 WRITE(*,*)'*****'
C*****'
WRITE(*,*)'*
C WRITE(*,*)'* METODOS DE PREDICION DE PRESION DE VAPOR PARA LIQUID
COS PUROS *
WRITE(*,*)'*
C WRITE(*,*)'*****'
C*****'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' ELIGE EL METODO DE PREDICION ? '
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' 1.- ECUACION DE ANTOINE ? [AN]'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' 2.- ECUACION DE WAGNER ? [WA] '
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' 3.- ECUACION DE RIEDEL ? [RI] '
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' QUE OPCION ELIGES ? (TECLEA LAS LETRAS EN EL RECUADRO)'
READ(*,10) AN
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
IF (AN.EQ.'AN') GOTO 50
IF (AN.EQ.'WA') GOTO 100
IF (AN.EQ.'RI') GOTO 200
10 FORMAT (A)
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
50 CONTINUE
WRITE(*,*)' LA OPCION ELEGIDA ES LA ECUACION DE ANTOINE '
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' LAS CONSTANTES DE ANTOINE SE ENCUENTRAN EN EL LIBRO DE
C RED, SHERWOOD & FRAUNSNITZ "PROPIEDADES DE GASES Y LIQUIDOS"
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' EL VALOR DE LA CONSTANTE A ES= '
READ(*,*)A
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' EL VALOR DE LA CONSTANTE B ES= '
READ(*,*)B
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)'
WRITE(*,*)' EL VALOR DE LA CONSTANTE C ES= '
READ(*,*)C
```

```

WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' LA TEMPERATURA A LA CUAL DESEAS LA PRESION DE VAPOR [°K]
(')
READ(*,*) T
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
P=(EXP(A-(B/(T+C))))
WRITE(*,*) ' LA PRESION DE VAPOR CALCULADA ES =',P,' [mmHg]'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
PA=P/760
WRITE(*,*) ' LA PRESION DE VAPOR CALCULADA ES =',PA,' [atm]'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
GOTO 500
100 CONTINUE
WRITE(*,*) ' LA OPCION ELEGIDA ES LA ECUACION DE WARNER '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' LAS CONSTANTES A UTILIZAR EN ESTA ECUACION SE ENCUENTR
CAN EN EL ARTICULO IND. ENG. CHEM. PROCC.DES. DEV VOL 22 NO 2 1963'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' EL VALOR DE LA CONSTANTE A ES= '
READ(*,*) A
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' EL VALOR DE LA CONSTANTE B ES= '
READ(*,*) B
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' EL VALOR DE LA CONSTANTE C ES= '
READ(*,*) C
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' EL VALOR DE LA CONSTANTE D ES= '
READ(*,*) D
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' LA TEMPERATURA A LA CUAL DESEAS LA PRESION DE VAPOR [
(')
READ(*,*) T
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' LA PRESION CRITICA DEL ELEMENTO ES [atm]'
READ(*,*) PC
PC=PC/760
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' LA TEMPERATURA CRITICA DEL ELEMENTO [°K]'
READ(*,*) TC
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '

```

```

WRITE(*,*) '
TR=T/TC
PVR=EXP((1/TR)*((A*(1-TR)+B*(1-TR)**1.5+C)*(1-TR)+D*(1-TR)**6))
PV=(PVR*PC)
WRITE(*,*) ' LA PRESION DE VAPOR ES=',PV,' [mmHg]'
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
PA=PV/760
WRITE(*,*) ' LA PRESION DE VAPOR ES=',PA,' [atm]'
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
GOTO 500
200 CONTINUE
WRITE(*,*) ' LA OPCION ELEGIDA ES LA ECUACION DE RIEDEL '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) ' DAME LA TEMPERATURA DE EBULLICION NORMAL [°K]'
READ(*,*)TEN
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) ' LA TEMPERATURA A LA CUAL DESEAS EL CALCULO EN [°K] '
READ(*,*)T
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) ' DAME LA TEMPERATURA CRITICA EN [°K] '
READ(*,*)TC
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) ' DAME LA PRESION DEL SISTEMA [atm]'
READ(*,*)P
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) ' DAME LA PRESION CRITICA DEL LIQUIDO [atm]'
READ(*,*)PC
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
PC=PC*101.325
P=P*101.325
PR=P/PC
TR=T/TC
TER=TEN/TC
FTD=-35+(76/TER)+42*LOG(TER)-TER**6
ALR=(0.3147*FTD-LOG(101.325/PC))/(0.0838*FTD-LOG(TER))
Q=0.0838*(3.750-ALR)
D=-Q
C=42*Q+ALR
B=-36*Q
A=-35*Q
PVR=EXP(A-(B/TR)*(C*LOG(TR)+D*TR**6))
PV=(PVR*PC)
PV=PV/101.325
WRITE(*,*) ' LA PRESION DE VAPOR ES ',PV,' [Atm]'
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
FV=PV*760
WRITE(*,*) ' LA PRESION DE VAPOR ES ',FV,' [mmHg]'

```

```
WRITE(4,*)'  
WRITE(*,*)'  
WRITE(*,*)'  
GOTO 500  
250 CONTINUE  
500 WRITE(*,*)' DESEAS CONTINUAR CON EL METODO ? [S/N] '  
READ(*,10) S1  
IF(S1.EQ.'S') GOTO 5  
END
```

```

C
C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA VISCOSIDAD POR EL METODO DE WILKE
C
C SUBROUTINE WILKEOK
C ESTE PROGRAMA CALCULA VISCOSIDAD DE MEZCLAS GASEOSAS
C POR EL METODO DE WILKE
C
C REFERENCIA: J. CHEM. PHYS. 18,517.1950
C
C NOMENCLATURA
C
C X=FRACCION MOL
C WT=PESO MOLECULAR
C VIS=VISCOSIDAD, MICROPOISES
C TS=TEMPERATURA (C)
C PS= PRESION (ATM)
C NCOMP=NUMERO DE COMPUESTOS
C NDATA=NUMERO DE DATOS
C DIMENSION X(10),WT(10),VIS(10),PHI(10,10)
5 WRITE (*,*)'*****'
C*****
WRITE(*,*)' *
C
WRITE(*,*)' * ESTE PROGRAMA EVALUA LA VISCOSIDAD DE MEZCLAS
CGASEOSAS *
WRITE(*,*)' * POR EL METODO DE WILKE
C
WRITE(*,*)' *
C
WRITE(*,*)' *
C*****
C*****
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' * ESTE METODO REQUIERE DATOS DE VISCOSIDAD DE LOS COMPON
CENTES PUROS EN LA MEZCLA A UNA ATMOSFERA DE PRESION Y TEMPERATURA
CDEL SISTEMA.'
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' * PARA EL CALCULO NECESITO LOS SIGUIENTES DATOS...'
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' * TEMPERATURA DEL SISTEMA [*C] ?'
READ(*,*)TS
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' * PRESION DEL SISTEMA [Atm] ?'
READ(*,*)PS
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' * NUMERO DE COMPONENTES EN LA MEZCLA GASEOSA ?'
READ(*,*)NCOMP
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
DO 75 I=1, NCOMP
WRITE(*,*)' * DAME LA FRACCION MOL DEL COMPONENTE',I
READ(*,*) X(I)
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *

```

```

WRITE(*,*)
75 CONTINUE
DO 85 I=1, NCOMP
WRITE(*,*) 'DAME EL PESO MOLECULAR DEL COMPONENTE', I
READ(*,*) WT(I)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
85 CONTINUE
DO 95 I=1, NCOMP
WRITE(*,*) 'DAME EL VALOR DE LA VISCOSIDAD [uP] DEL COMPONENTE', I,
C A LA TEMPERATURA DEL SISTEMA.', TS, ' [°C]'
READ(*,*) VIS(I)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
95 CONTINUE
105 FORMAT (A)
C
C CALCULO DE LA MATRIZ PHI(I,J)
C
BB=0.
CC=0.
DO 110 I=1, NCOMP
DO 110 J=1, NCOMP
BB=(1.0+(SQRT(VIS(I)/VIS(J)))*(WT(J)/WT(I))**.25)
CC=2.8284*SQRT(1.0+WT(I)/WT(J))
110 PHI(I,J)=BB*BB/CC
C
C CALCULO DE VISCOSIDADES
C
V=0.
DO 200 I=1, NCOMP
SUM=0.
DO 210 J=1, NCOMP
IF (J-I) 201, 210, 201
201 SUM=SUM+PHI(I,J)*X(J)/X(I)
210 CONTINUE
200 V=V+VIS(I)/(1.+SUM)
VI=V*.024191
WRITE(*,*) 'PRESION DEL SISTEMA =', PG, ' [atm]'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*) 'TEMPERATURA DEL SISTEMA =', TS, ' [°C]'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*) 'VISCOSIDAD DE LA MEZCLA =', V, ' [micropoise]'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*) 'VISCOSIDAD DE LA MEZCLA =', VI, ' [lb/ft.hr]*100'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*)
WRITE(*,*) 'DESEAS CONTINUAR CON ESTE METODO ? (S/N)'
READ(*,105) SI
IF (SI.EQ.'S') GOTO 5
END

```



```

      READ(*,*) WT(I)
      WRITE(*,*)
      WRITE(*,*)
      WRITE(*,*)
85  CONTINUE
      DO 90 I=1, NCOMP
      WRITE(*,*) 'DAME LA TEMPERATURA CRITICA [°K], DEL COMPONENTE', I
      READ(*,*) TC(I)
      WRITE(*,*)
      WRITE(*,*)
      WRITE(*,*)
90  CONTINUE
      DO 95 I=1, NCOMP
      WRITE(*,*) 'DAME EL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD CRITICO (ZC), DEL COM
      PONENTE', I
      READ(*,*) ZC(I)
      WRITE(*,*)
      WRITE(*,*)
      WRITE(*,*)
95  CONTINUE
      DO 100 I=1, NCOMP
      WRITE(*,*) 'DAME EL VOLUMEN CRITICO [LTS/MOL], DEL COMPONENTE', I
      READ(*,*) VC(I)
      WRITE(*,*)
      WRITE(*,*)
      WRITE(*,*)
100 CONTINUE
105 FORMAT (A)

C
C   CALCULO DE LA TEMPERATURA CRITICA DE MEZCLA
C
      TCM=0.
      DO 110 I=1, NCOMP
      TCM=TCM+X(I)*TC(I)
110  CONTINUE
      WRITE(*,*) 'LA TEMPERATURA CRITICA DE MEZCLA ES =', TCM, ' [°K]'
      WRITE(*,*)
      WRITE(*,*)
      WRITE(*,*)

C
C   CALCULO DEL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD CRITICO DE MEZCLA
C
      ZCM=0.
      DO 115 I=1, NCOMP
      ZCM=ZCM+X(I)*ZC(I)
115  CONTINUE
      WRITE(*,*) 'EL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD CRITICO DE MEZCLA ES =', ZC
      CM
      WRITE(*,*)
      WRITE(*,*)
      WRITE(*,*)

C
C   CALCULO DEL VOLUMEN CRITICO DE MEZCLA
C
      VCM=0.
      DO 120 I=1, NCOMP
      VCM=VCM+X(I)*VC(I)
120  CONTINUE
      WRITE(*,*) 'EL VOLUMEN CRITICO DE MEZCLA ES =', VCM, ' [Lts/mol]'
      WRITE(*,*)
      WRITE(*,*)
      WRITE(*,*)

C
C   CALCULO DE LA PRESION CRITICA DE MEZCLA
C
      PNM = PAB * VCM * TCM

```

FALLA DE ORIGEN

```

WRITE(X,X) 'LA PRESION CRITICA DE MEZCLA ES =',PCM,' (atm)'
WRITE(X,X) ' '
WRITE(X,X) ' '
WRITE(X,X) ' '
C
C
C
CALCULO DE EPSILON DE MEZCLA (EM)
SUM=0.
DO 130 I=1,NCOMP
SUM=SUM+X(I)*MW(I)
130 CONTINUE
WRITE(X,X) 'EL VALOR DEL PESO MOLECULAR DE LA MEZCLA ES =',SUM
WRITE(X,X) ' '
WRITE(X,X) ' '
WRITE(X,X) ' '
EM=(TCM**(.1666))/(SUM**(.5))*(PCM**(.6666))
WRITE(X,X) ' EL VALOR DE EPSILON DE MEZCLA ES =',EM
WRITE(X,X) ' '
WRITE(X,X) ' '
WRITE(X,X) ' '
C
C
C
CALCULO DE LA TEMPERATURA REDUCIDA
TR=T/TCM
WRITE(X,X) ' LA TEMPERATURA REDUCIDA ES =',TR
WRITE(X,X) ' '
WRITE(X,X) ' '
WRITE(X,X) ' '
IF(TR.GE.1.5) GOTO 200
GMM=(0.00034*(TR**(.0000)))/EM
GOTO 300
200 GMM=(0.001668*(0.1338*TR-0.0932)**(.5555))/EM
WRITE(X,X) ' '
WRITE(X,X) ' '
WRITE(X,X) ' '
300 WRITE(X,X) 'VISCOSIDAD DE LA MEZCLA=',GMM,' (Centipoises)'
WRITE(X,X) ' '
WRITE(X,X) ' '
WRITE(X,X) ' '
GNN=GMM*10000
WRITE(X,X) 'VISCOSIDAD DE LA MEZCLA=',GNN,' (Micropoises)'
WRITE(X,X) ' '
WRITE(X,X) ' '
WRITE(X,X) ' '
WRITE(X,X) ' DESEAS CONTINUAR CON ESTE METODO ? [B/N]'
READ(X,105) SI
IF (SI.EQ.'S') GOTO 5
END

```

```

C
C SUBROUTINA PARA CALCULAR LA VISCOSIDAD POR EL METODO DE YOON Y THODOS
C
C SUBROUTINE Y-T
C ESTE PROGRAMA CALCULA VISCOSIDAD DE MEZCLAS GASEOSAS
C POR EL METODO DE YOON-THODOS.
C
C REFERENCIA: AICHE J., VOL 16, 1970, P. 300
C
C NOMENCLATURA
C
C X=FRACCION MOL
C WT=PESEO MOLECULAR
C VIS=VISCOSIDAD, MICROPOISES
C T=TEMPERATURA (C)
C P= PRESION (ATM)
C NCOMP=NUMERO DE COMPUESTOS
C NDATA=NUMERO DE DATOS
C DIMENSION X(10),WT(10),TC(10),VC(10),ZC(10)
S WRITE (*,*)'*****'
C*****'
C WRITE(*,*)'
C
C WRITE(*,*)' ESTE PROGRAMA EVALUA LA VISCOSIDAD DE MEZCLAS
C
C WRITE(*,*)' GASEOSAS POLARES Y NO POLARES A PRESIONES BAJAS
C
C
C
C WRITE(*,*)' POR EL METODO DE YOON-THODOS
C
C
C
C WRITE(*,*)'
C
C WRITE(*,*)'*****'
C*****'
C WRITE(*,*)'
C WRITE(*,*)'
C WRITE(*,*)'
C WRITE(*,*)' PARA EL CALCULO SE NECESITAN LOS SIGUIENTES DATOS...'
C WRITE(*,*)'
C WRITE(*,*)'
C WRITE(*,*)'
C WRITE(*,*)' TEMPERATURA DEL SISTEMA [°C] ?'
C READ(*,*)T
C WRITE(*,*)'
C WRITE(*,*)'
C WRITE(*,*)'
C WRITE(*,*)' PRESION DEL SISTEMA [atm] ?'
C READ(*,*)P
C WRITE(*,*)'
C WRITE(*,*)'
C WRITE(*,*)'
C WRITE(*,*)' NUMERO DE COMPONENTES EN LA MEZCLA GASEOSA ?'
C READ(*,*)NCOMP
C WRITE(*,*)'
C WRITE(*,*)'
C WRITE(*,*)'
C DO 75 I=1, NCOMP
C WRITE(*,*)' DAME LA FRACCION MOL DEL COMPONENTE', I
C READ(*,*) X(I)
C WRITE(*,*)'
C WRITE(*,*)'
C WRITE(*,*)'
C 75 CONTINUE
C
C DO 85 I=1, NCOMP
C WRITE(*,*)' DAME EL PESO MOLECULAR DEL COMPONENTE', I

```

```

      READ(1,1) WT(I)
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' '
85  CONTINUE
      DO 95 I=1,NCOMP
      WRITE(1,1) ' DAME LA TEMPERATURA CRITICA DEL COMPONENTE [°K]',I
      READ(1,1) TC(I)
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' '
95  CONTINUE
      DO 100 I=1,NCOMP
      WRITE(1,1) ' DAME EL VOLUMEN CRITICO DEL COMPONENTE [CC/G-MOL]',I
      READ(1,1) VC(I)
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' '
100 CONTINUE
      DO 105 I=1,NCOMP
      WRITE(1,1) ' DAME EL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD CRITICO',I
      READ(1,1) ZC(I)
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' '
105 CONTINUE
C
C
C
      CALCULO DE CONSTANTES PSEUDOCRITICAS
      TCM=0.0
      VCM=0.0
      ZCM=0.0
      WTM=0.0
      DO 110 I=1,NCOMP
      VCM=VCM+X(I)*VC(I)
      TCM=TCM+X(I)*TC(I)
      ZCM=ZCM+X(I)*ZC(I)
      WTM=WTM+X(I)*WT(I)
110 CONTINUE
      PCM=TCM*ZCM*0.07/VCM
      EP=(TCM**(.1666))/(WTM**(.0.5))*(PCM**(.6666))
      TRM=T/TCM
      WRITE(1,1) ' EL VALOR DE EPSILON ES =',EP
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' EL VALOR DE TCM ES =',TCM
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' EL VALOR DE VCM ES =',VCM
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' EL VALOR DE ZCM ES =',ZCM
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' EL VALOR DE PCM ES =',PCM
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' EL VALOR DE TRM ES =',TRM
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' TIPO DE SUSTANCIAS UTILIZAS PARA EL CALCULO ?'
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' 1.- GASES NO POLARES (NF1)'
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' '
      WRITE(1,1) ' 2.- GASES POLARES (NF2)'
      WRITE(1,1) ' '

```

```

WRITE(4,*)' '
DE(17)=1.' '
WRITE(4,*)' RECUERDA LAS LETRAS DEL RECUADEO'
READ(4,10)GP
IF(GP.EQ.'GP') GOTO 250
IF(GP.EQ.'NP') GOTO 200
10 FORMAT (A)
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
200 WRITE(4,*)' LA OPCION ELEGIDA ES GASES NO POLARES'
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
W=(4.610+TRM*9.618-2.04*EXP(-0.449*TRM)+1.94*EXP(-4.058*TRM)+0.1)
C/EP
GOTO 500
250 WRITE(4,*)' LA OPCION ELEGIDA ES GASES POLARES'
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' 1.- GASES POLARES CON PUENTES DE HIDROGENO [CP]'
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' 2.- GASES POLARES SIN PUENTES DE HIDROGENO [SP]'
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' ¿QUE OPCION ELIGES ? (TECLEA LAS LETRAS DEL RECUADEO)'
READ(4,10)GP
IF(GP.EQ.'CP') GOTO 300
IF(GP.EQ.'GP') GOTO 350
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
300 WRITE(4,*)' LA OPCION ELEGIDA ES CON PUENTES DE HIDROGENO'
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
IF(TRM=210)205,210,210
305 W=(0.255*TRM-0.055)*ZCH*(-1.25)/EP
GOTO 500
310 WRITE(4,*)' LA TEMPERATURA REDUCIDA DE LA MEZCLA ES MAYOR DE 2.0 '
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' ¿POR LO TANTO ESTE METODO NO APLICA'
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
GOTO 510
350 WRITE(4,*)' LA OPCION ELEGIDA ES SIN PUENTES DE HIDROGENO'
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
IF(TRM=265)255,260,260
355 W=(11.90*TRM-0.29)**(0.8)*ZCH*(-0.6666)/EP
GOTO 500
360 WRITE(4,*)' LA TEMPERATURA REDUCIDA DE LA MEZCLA ES MENOR DE 2.5'
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' ¿POR LO TANTO ESTE METODO NO APLICA'
GOTO 510
500 WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '
WRITE(4,*)' '

```

```
WRITE(A,4) ' EL VALOR DE LA VISCOSIDAD ES =',W,' [micropoise] A ',  
C T,' [°C]'  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' '  
WRITE(*,*) ' '  
510 WRITE(*,*) ' DESEAS CONTINUAR CON EL METODO ? [S/N]'  
READ(*,10)SI  
IF(SI.EQ.'S') GOTO 5  
END
```



```

WRITE(*,*) '
DO 75 I=1, NCOMP
WRITE(*,*) 'DAME LA FRACCION MOL DEL COMPONENTE', I
READ(*,*) X(I)
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
75 CONTINUE
DO 85 I=1, NCOMP
WRITE(*,*) 'DAME LA TEMPERATURA CRITICA [*K] DEL COMPONENTE', I
READ(*,*) TC(I)
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
85 CONTINUE
C
C   CALCULO DE LA TEMPERATURA CRITICA DE MEZCLA
C
TCM=0
DO 86 I=1, NCOMP
TCM=TCM + X(I)*TC(I)
86 CONTINUE
C
C   CALCULO DE LA TEMPERATURA REDUCIDA
C
TR=TS/TCM
WRITE(*,*) 'EL VALOR DE LA TRM =', TR
IF (TR-.76)88,88,88
88 IF (TR-.98)89,89,89
87 WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) 'EL VALOR DE LA TEMPERATURA REDUCIDA ES =', TR
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) 'LA TEMPERATURA REDUCIDA NO SE ENCUENTRA DENTRO DEL RANG
CO ESPECIFICADO, POR LO TANTO NO SE PUEDE EMPLEAR ESTE METODO..'
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
GOTO 500
89 WRITE(*,*) '
DO 95 I=1, NCOMP
WRITE(*,*) 'DAME EL VALOR DE LA PRESION CRITICA [ATM] DEL COMPONENT
CE', I
READ(*,*) PC(I)
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
95 CONTINUE
DO 100 I=1, NCOMP
WRITE(*,*) 'DAME EL VALOR DEL PESO MOLECULAR DEL COMPONENTE', I
READ(*,*) PM(I)
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
100 CONTINUE
DO 105 I=1, NCOMP
WRITE(*,*) 'DAME EL VALOR DEL FACTOR ACENTRICO (w), DEL COMPONENTE'
C, I
READ(*,*) W(I)
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
WRITE(*,*) '
105 CONTINUE

```

```
C
C   CALCULO DE FRUPTURAS Y PSEUDOCIFRONS
C
```

```
PCM = 0
PMM = 0
WM = 0
DO 110 I=1, NCOMP
PCM=PCM + X(I)*FC(I)
PMM=PMM + X(I)*FM(I)
110 WM=WM + X(I)*W(I)
115 FORMAT (A)
```

```
C
C   VISCOSIDAD DE LIQUIDO
C
```

```
ANLEO = 0.015174-0.02135*TR+0.0075*TR**2
ANLE1 = 0.042552-0.07674*TR+0.0340*TR**2
ANLE = ANLEO + WM*ANLE1
P1=PCM**0.16666667
P2=PMM**0.5
P3=PCM**0.66666667
AFSIL = P1/(P2*P3)
VIS = (ANLE/AFSIL)/10
V1=VIS*0.024191
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) 'PRESION DEL SISTEMA =',PS,' [atm]'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) 'TEMPERATURA DEL SISTEMA =',TS,' [C]'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) 'VISCOSIDAD DE LA MEZCLA =',VIS,' [micropoise]'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) 'VISCOSIDAD DE LA MEZCLA =',V1,' [lb/ft.hr]*100'
WRITE(*,*) ' '
WRITE(*,*) ' '
WRITE(A,*) ' '
500 WRITE(*,*) 'DESEAS CONTINUAR CON ESTE METODO ? [S/N]'
READ(*,115) SI
IF (SI.EQ.'S') GOTO 5
END
```

```

C      SUBROUTINA PARA CALCULAR EL VOLUMEN MOLAR POR EL METODO DE
C      RACKETT.
C
SUBROUTINE RACKETT
S WRITE(*,*)'*****'
C*****
WRITE(*,*)' *
C      *
WRITE(*,*)' * ESTE PROGRAMA EVALUA EL VOLUMEN MOLAR DE LIQUIDOS PU
CROS SATURADOS *
WRITE(*,*)' *          POR EL METODO DE RACKETT
C      *
WRITE(*,*)' *
C      *
WRITE(*,*)'*****'
C*****
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' * PARA EL CALCULO NECESITO DE LOS SIGUIENTES DATOS:
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' * FACTOR DE COMPRESIBILIDAD CRITICA "Zc" ? *
READ(*,*)ZC
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' * TEMPERATURA A LA CUAL DESEAS HACER EL CALCULO ? [*K]
READ(*,*)T
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' * TEMPERATURA CRITICA "Tc" ? [*K]
READ(*,*)TC
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' * PRESION CRITICA "Pc" ? [atm]
READ(*,*)PC
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
TR = T/TC
R = 0.08205
A = (LOG10(ZC)-LOG10(PC/(R*TC)))
B = (1+(1-TR)**(0.2857))
V = A*B
VSAT = 104*(V)
WRITE(*,*)'EL VALOR DEL VOLUMEN MOLAR SATURADO ES =',VSAT,' [Lts/g
Cmol]'
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
VSA=1000*VSAT
WRITE(*,*)'EL VALOR DEL VOLUMEN MOLAR SATURADO ES =',VSA,' [cm3/gm
Cmol]'
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
10 FORMAT (A)
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *
WRITE(*,*)' *

```

```
WRITE(*,*) ' DESEAS CONTINUAR CON EL METODO ? (S/N)'  
READ(*,10) SI  
IF(SI.EQ.'S') GOTO 5  
END
```



```

CENTE',I
  READ(*,*) TC(I)
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) 'DAME EL VALOR DEL VOLUMEN CRITICO [LTS/MOL] DEL COMPONE
CENTE',I
  READ(*,*) VC(I)
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) 'DAME EL VALOR DEL FACTOR ACENTRICO DEL COMPONENTE',I
  READ(*,*) W(I)
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) ' '
75 CONTINUE
C
C   CALCULO DE PROPIEDADES PSEUDOCRITICAS
C
  TCM=0
  VCM=0
  DO 150 I=1, NCOMP
    TCM=TCM+X(I)*TC(I)
    VCM=VCM+X(I)*VC(I)
    WM=WM+X(I)*W(I)
150 CONTINUE
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) ' '
C
C   VOLUMEN DE LIQUIDOS SATURADOS
C
C   CALCULO DE LA TEMPERATURA REDUCIDA
C
  TR=T/TCM
  WRITE(*,*) 'TEMPERATURA REDUCIDA =',TR
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) ' '
  IF (TR-1.0) 121,121,122
122 WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) 'LA TEMPERATURA REDUCIDA TIENE UN VALOR =',TR,'[K]'
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) ' COMO LA TEMPERATURA REDUCIDA ES MAYOR DE 1.0, NO DEBE
  CUSARSE ESTA CORRELACION'
10 FORMAT (A)
121 V0=.11917+.009513*TR+.21071*TR**2-.06922*TR**3+.0748/TR-.084476*AL
  COG10(1-TR)
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) ' '
  V1=.90465-1.60378*TR+1.82484*TR**2-.61432*TR**3-.34546/TR+.087037*
  IALOG10(1-TR)
  V2=-.105714-.18797*TR+1.01601*TR**2+.340954*TR**3+.467957/TR-.239928*
  IALOG10(1-TR)
  V=(V0+V1)*WM+V2*(100-W)/VCM
  WRITE(*,*) 'EL VALOR DEL VOLUMEN MOLAR ES =',V,' [Lts/gmol]'
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) ' '
  WRITE(*,*) ' '
  VC=V*1000

```

```
WRITE(*,*)'EL VALOR DEL VOLUMEN MOLAR ES =',V2,' [cm3/gmol]'  
WRITE(*,*)' '  
WRITE(*,*)' '  
WRITE(*,*)' '  
VOL1=V/28.31684659  
WRITE(*,*)'EL VALOR DEL VOLUMEN MOLAR ES =',VOL1,' [PIES CUBICOS/G  
CMOL]'  
WRITE(*,*)' '  
WRITE(*,*)' '  
WRITE(*,*)' '  
WRITE(*,*)'DESEAS CONTINUAR CON EL METODO ? [S/N]'  
READ(*,10) SI  
IF(SI.EQ.'S') GOTO 5  
END
```

BIBLIOGRAFIA

"Some state of the art problems in physical property Prediction"

T.E. Danbert and R.P. Danner
Oct. 1983

"Physical property estimation systems"

W.D. Seider
Sección 6 August. 1977

"Correlating and predicting Thermodynamic datas"

D.F. Othmer and H.T. Chen
Ind. and Eng. Chem, Vol. 60 No. 4 april 1968, p. 39-61

"Extensions of the Theorem of corresponding states:"

L.I. Stiel
Ind. and Eng. Chem, Vol. 60 No. 5, May 1968, p. 50-60

"A Third Parameter for use in Generalized Thermodynamic Correlations"

M.G. Kesler, B.I. Lee and S.I. Sandler
Ind. Eng. Chem fundam, Vol. 18, No. 1, 1979, p. 49-54

"The law of corresponding states in it's most General form"

R.W. Hakala
The journal of physical chemistry, vol. 71, No. 6, May 1967, p. 1880-1886

"Consistency conditions in the extended principle of corresponding states"

B. Canfield and A.J. Gunning
Chem. Eng. Sci 1971, Vol. 26, p. 1136-1137

"The corresponding state principle"

T.W. Leind Jr. and P.S. Chappellear
Ind. and Eng. Chem. Vol. 60, No. 7, July 1968, p. 15-43

"Correspondence Principle for transport properties of dense fluids Nonpolar Polyatomic fluids"

H.J. Tham and K.E. Gubbins

I & EC fundamentals vol. 9, No. 1, Feb. 1970, p. 63-70

"Corresponding states principle using shape factors"

G.D. Fisher and T.W. Leland Jr.

Ind. Eng. Chem. fundam. Vol. 9, No. 4, 1970, p. 573-594

"The prediction of the thermodynamics properties of fluids and fluid mixtures - I.

The principle of corresponding states and it's extensions"

J.S. Rowlinson and I.D. Watson

Chem. Eng. Sci. 1969, Vol. 24, p. 1565-1574

"Principio de estados correspondientes"

Fac. Quimica UNAM

Maestría en Ing. de proyectos, p. 82-93

"Uso del P.E.C. para mezclas que contienen componentes polares"

A.S. Teja

Ing. Eng. Chem Fundam. Vol. 18, No. 4 1979

"Estimation of vapor and Liquid enthalpies"

Lewis C. Yen and R.E. Alexander

AIChE Journal, March 1965 p. 334-339

"A comparison of enthalpy prediction methods"

Ramanathan R. Ravakati and Ronald P. Danner

AIChE Journal, March 1976, p. 409-411

"Applied Hydrocarbon Thermodynamics

Part. 27: Isothermal Pressure corrections to the

Enthalpy and Entropy" *W.F. Edmister*

Hydrocarbon Process, April 1967, Vol. 46, No. 4, p. 165-170

"Applied hydrocarbon thermodynamics

Part. 31: Ideal Gas state properties"

W.C. Edmister

Hydrocarbon process, August 1967, Vol. 46, No. 8, p.119-123

"Volumetric and thermodynamic properties of fluids - Enthalpy, Free energy and Entropy"
R.F. Carl Jr. and K.S. Pitzer
Industrial and Engineering Chemistry, vol. 50, No. 2, Feb. 1958

"Funciones generalizadas de cambios de entalpía y entropía para fluidos normales a bajas temperaturas"
Ind. Eng. Chem. process, Des, Dev
Vol. 13, No. 4, 1974

"A corresponding states equation for saturated liquid densities"
A.S. Teja
Aiche J., Vol. 26, No. 3, May 1990, p. 337-345

"A generalized equation for computer calculation of liquid densities"
L.C. Yen and S.S. Woods
Aiche J., Jun 1966, p. 95-96 Vol. 12 No. 1

"Saturated liquid densities of polar and nonpolar pure substances"
S.W. Campbell and G. Thodos
Ind. Eng. Chem. Fundam. 1984, 23, p. 500-510

"Ecuación mejorada para predecir densidad de líquidos saturados"
C.F. Spencer and R.P. Danner
Journal of Chem. and Eng. Data Vol. 17 No. 2, 1972

"Método de estados correspondientes modificado para predecir densidades de depósitos de fluidos de petróleo"
A.S. Cullick, P.N. Pebdani, A.K. Grewank
Ind. Eng. Chem. Res. 28, 1989, p. 340-347

"In P.F.C. multifluido para propiedades termodinámicas de mezclas de fluidos"

A.S. Teja and P. Rice

Chem. Eng. Sci. 1981, Vol. 36, p. 1-6

"Density of hydrocarbon gases and vapors at high temperature and pressure"

W.B. Kay

Industrial and Engineering Chemistry, Vol. 28, No. 3, sep. 1939

"Pressure-Temperature-Liquid Density Relations of pure hydrocarbons"

A.W. Francis

Ind. and Eng. Chem. Vol. 49, No. 10, Oct. 1957, p. 1779-1786

"Generalized correlation of latent heats of vaporization of coal liquid model compounds between their freezing points and critical points"

A. Sivaraman, J.W. Magee and R. Kobayashi

Ind. Eng. Chem. fundam. 1984, 23, p. 97-100

"A method for the prediction of heats of vaporization of Non-Hydrocarbon compounds based on the Clausius-Clapeyron equation"

P.A. Geyte and F.F. Daubert

Ind. Eng. Chem. Process. Des. Dev. 1985, 24, p. 761-764

"Correlation and prediction of diffusion coefficients by use of a P.F.C. generalize"

A.S. Teja

Ind. Eng. Chem. fundam. 1985, 24, p. 39-44

"Corresponding states correlation of tracer diffusion in liquids"

H. Ch. Chen and S.H. Chen

Ind. Eng. Chem fundam. 1985, 24, p. 183-187

"Calculation of the diffusion coefficient of dilute gases and of the self-diffusion coefficient of dense gases"

J.C. Slattery and R.B. Bird

Aiche J. 1958, 4, p. 137,142

"The self-diffusivity of substances in the gaseous and liquids states"

G.P. Mathur and G. Thodos

Aiche J. vol. 11, No. 4, July 1965, p. 613-616

"A corresponding states model for the thermal conductivity of gases and liquids"

P.L. Christensen and A.A. Fredenslund

Chem Eng. Science, vol. 35 (1979), p. 871-875

"Prediction of transport properties 2. Thermal conductivity of pure fluids and mixtures"

J.F. Ely and H.J.M. Hanley

Ind. Eng. Chem. Fundam 1983, 22, p. 90-97

"Prediction of Thermal conductivity for dense fluids and liquid mixtures"

S. Murad and K.E. Gubbins

Aiche Journal Vol. 227, No. 5, Sep. 1981, p. 864-866

"Prediction of the thermal conductivity of gases at high pressures"

M.R. Riazi and A. Faghri

Aiche Journal Vol. 31, No. 1 Jan 1985, p. 164-167

"Prediction of the thermal conductivity of dense hydrocarbon gases"

R.G. Crooks and F.F. Daubert

Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol. 18, No. 3, 1979

"Corresponding states correlation for thermal conductivity of dense fluids"

S. Murad and K.E. Gubbins

Chem. Eng. Sci, 1977, Vol. 32, p. 499-505

"Thermal conductivity of gases at high pressures"

E.W. Comings and M.F. Nathan

Ind. and Eng. Chem Vol. 39, No. 8 August 1947

"Thermal conductivity of liquid mixtures"

C.C. Li

Aiche J. Vol. 22, No. 5, Sep. 1976, p. 927-930

"The properties of gases and liquids"

R.C. Reid, J.M. Prausnitz and T.K. Sherwood

Tercera edición, McGraw-Hill, New York 1992

"The viscosity of pure solutants in the dense gaseous and liquid phases"

J.A. Jossi, L.I. STEEL and G. Thodos

Aiche Journal, Vol. 8, March 1962, p. 59-63

"Generalized correlation of saturated liquid densities"

Y. LI, J.A. Ruetter, C. Hsi and C.H. Chu

Department of Chemical Engineering, university of Ottawa, Canada

"Reduced Vapor Pressure Equation for hydrocarbons"

T. Zia and G. Thodos

The Chem. Eng. Journal, Vol. 16, 1978, p. 41-49

"Short communications"

Elsevier Sequora S.A. Lausanne

The Chem. Eng. Journal, Volo. 19, 1989, p. 161-166

"Characteristic viscosity as a third parameter in corresponding

State calculations of transport properties

Parte I. Defined mixtures"

B. Willman and A.S. Teja

The chem. Eng. journal, Vol. 37, 1988, p. 65-70

"Viscosities and densities of four binary liquid

systems at 25°C"

A. Fattah and A.L. Dulchen

Journal Chem. Eng. Data, 1981, Vol. 26, p. 312,316

"An analytical expression for the variation of the

vapor pressure of liquids with temperatures

up to critical conditions"

L.H. Thomas

The Chem. Eng. Journal, Vol. 11, 1976, p. 191-200

"A rapid estimation method for thermal conductivity of pure liquids"
D.S. Lakshmi and P.H.L. Prasad
The Chem. Eng. Journal, Vol. 48, 1992, p. 211-214

"Development of a four - parameter corresponding states method: vapor pressure prediction"
Ch. A. Passut and R.P. Danner
Aiche, symp. Series No. 140, Vol. 70

"Generalized vapor pressure behavior of substances between their triple points and critical points"
M. Gomez-Nieto and G. Thodos
Aiche J., Vol. 23, No. 6, Nov. 1977, p. 904-913

"A New Vapor Pressure Equation and Its Application to normal alkanes"
M. Gomez-Nieto and G. Thodos
Ind. Eng. Chem. Fundam., Vol. 16, No. 2, 1977

"Critical assessment of four vapor pressure functions over the complete vapor-liquid coexistence region"
R.A. Wilsak and G. Thodos
Ind. Eng. Chem. Fundam. 1984, 23, p. 75-82

"Two models of vapor pressure along the saturation curve"
J.D. Chase
Ind. Eng. Chem. Res 1987, 26, p. 107,112

"Correlation and prediction of the vapor pressures of pure liquids over large pressure ranges"
J. Mc Garry
Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev. 1983, 22, p. 313-322

"A reduced state vapor - pressure relationship and its application to hydrocarbons"
E.G. Reaynes and G. Thodos
Aiche J. Vol. 8, No. 3 July 1962, p. 357-358