

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA ENERGÍA – GEOTERMIA

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS.

> TESIS QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE: MAESTRO EN INGENIERÍA

> > PRESENTA: I.Q. JOAQUIN TORRES SALAS

TUTOR PRINCIPAL DR. EDGAR R. SANTOYO GUTIERREZ – IER COMITÉ TUTORAL M.C. MIRNA GUEVARA GARCÍA– IER DR. PANDARINATH KAILASA – IER

MÉXICO, D. F. JUNIO 2014



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

JURADO ASIGNADO:

| Presidente: | DR. EDUARDO GONZÁLEZ PARTIDA |
|-----------------------------|---|
| Secretario: | DR. EDGAR ROLANDO SANTOYO GUTIÉRREZ |
| Vocal: | DR. ALFONSO ARAGÓN AGUILAR |
| ₁ er. Suplente: | DR. LOIC MARIE JEAN CLAUDE JOSE GHISLAIN PEIFFER |
| ₂ d o. Suplente: | M.C. MIRNA GUEVARA GARCÍA |

Lugar o lugares donde se realizó la tesis: IER-UNAM

TUTOR DE TESIS:

DR. EDGAR ROLANDO SANTOYO GUTIÉRREZ

FIRMA



Universidad Nacional Autónoma de México

UNAM



INSTITUTO DE ENERGÍAS RENOVABLES

IER

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS.

TESIS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE

MAESTRO EN INGENIERÍA

- P R E S E N T A E L:
- I. Q. JOAQUIN TORRES SALAS

ASESOR: DR. EDGAR R. SANTOYO GUTIÉRREZ

DEDICATORIA:

DEDICO ESTE ÚLTIMO TRABAJO MAESTRÍA DE MI PRIMERAMENTE A MI ESPOSA LAURA MONDRAGÓN REYNA, POR SU APOYO Y COMPRENSIÓN, A MI HIJA LAURA MELISSA TORRES MONDRAGÓN QUE VIENE EN CAMINO, PARA QUE LE SIRVA DE EJEMPLO EN UN FUTURO PARA COMPRENDER QUE EL ESTUDIO SIEMPRE RENDIRÁ BUENOS FRUTOS; POSTERIORMENTE, A MI HERMANO PARA QUE DE IGUAL MANERA LE SIRVA DE EJEMPLO Y COMPRENDA ASÍ QUE MI PADRE SIEMPRE HA TENIDO RAZÓN EN QUE CON ESFUERZO Y DEDICACIÓN TODO SE PUEDE LOGRAR, Y QUE COMO DICE EL, TODO PUEDE MEJORAR; LO DEDICO TAMBIÉN A MIS PADRES YA QUE NUNCA DUDARON NI UN MOMENTO EN QUE LOGRARÍA EL OBJETIVO QUE ME FIJÉ DESDE QUE EGRESÉ DE LA CARRERA, GRACIAS POR SU APOYO INCONDICIONAL.

AGRADECIMIENTOS:

AGRADEZCO PRIMERAMENTE A DIOS POR AYUDARME A ALCANZAR UNA META MÁS EN MI CAMINO;

AGRADEZCO TAMBIÉN A MIS AMIGOS Y COMPAÑEROS DE LA MAESTRÍA QUE CONTRIBUYERON DE DIVERSOS MODOS PARA PODER CONCLUIR ESTE TRABAJO,

CABEN DESTACAR ALEX Y JUAN CARLOS, ALIAS "LOS ZACATECAS", CARLOS ERNESTO, JAMES, RODOLFO, ENTRE OTROS;

DE UN MODO MUY ESPECIAL AGRADEZCO A MI ESPOSA POR COMPRENDERME Y APOYARME CUANDO LO NECESITABA;

DOY GRACIAS A MI COMITÉ TUTORAL Y JURADO, POR SU APOYO PARA EL DESARROLLO DE ESTE TRABAJO A PESAR DE SUS MÚLTIPLES COMPROMISOS Y LABORES,

A MI ASESOR EL DOCTOR EDGAR SANTOYO, POR ACEPTAR EL TRABAJAR CONMIGO Y APOYARME EN ESTE PROYECTO;

SE AGRADECE AL PROYECTO UNAM-DGAPA-PAPIIT IN115611 "ESTUDIOS TEÓRICOS Y EXPERIMENTALES DE INTERACCIÓN FLUIDO-ROCA EN CONDICIONES DE SISTEMAS GEOTÉRMICOS – FASE 2" POR EL APOYO BRINDADO.

AGRADEZCO TAMBIÉN A MI HERMANO ÁNGEL POR SOPORTAR MIS NOCHES DE ESTUDIO EN LAS QUE NO LO DEJABA DORMIR Y POR HACERME REÍR CUANDO MÁS TENSO ESTABA;

Y FINALMENTE, PERO POR NADA MENOS IMPORTANTES, A MIS PADRES YA QUE SIN SU APOYO INCONDICIONAL, CARIÑO Y BUEN CONSEJO NO SERÍA QUIEN SOY EL DÍA DE HOY.

ÍNDICE

PÁGINA

| INTRODUCCIÓ | N | | 1 |
|-------------------------|--|-------|-----|
| | Objetivos | | 2 |
| | Estructura de Tesis | | 3 |
| 1. Genef | ALIDADES | | 6 |
| 1.1 | CLASIFICACIÓN DE LOS SISTEMAS GEOTÉRMICOS | | 6 |
| 1.1.1 | HIDROTERMALES (CONVECTIVOS) | | 6 |
| 1.1.2 | HDR | | 7 |
| 1.1.3 | SEDIMENTARIOS (CONDUCTIVOS) | | 8 |
| 114 | GEOTÉRMICOS ACOPI ADOS A SISTEMAS DE HIDROCARBUROS | | 8 |
| 115 | GEOPRESURIZADOS | | 8 |
| 116 | Magmáticos | | q |
| 1.1.0 | Estado Actual de la Geotermia en el Mundo (2013) | ••••• | a |
| 1.2.1 | PRINCIPAL ES PROPIEMAS | ••••• | 13 |
| 1.2.1 | I RINCIFALES I RODLEMAS | ••••• | 15 |
| 1.2.2 | TRECIPITACIÓN DE MINERALES EN POZOS, | | 1 / |
| 1 2 2 1 | | | 14 |
| 1.2.2.1 | | ••••• | 10 |
| 1.2.2.2 | SILICE (SIO ₂) | ••••• | 18 |
| 2. SIO ₂ (\$ | Sílice) | | 20 |
| 2.1 | Introducción | | 20 |
| 2.2 | Fases | | 21 |
| 2.2.1 | Sílice Cristalina Anhidra SiO_2 | | 21 |
| 2.2.2 | SÍLICE AMORFA | | 23 |
| 2.3 | Propiedades | | 25 |
| 2.3.1 | Solubilidad | | 25 |
| 2.3.2 | Entropía | | 35 |
| 2.3.3 | Entalpía | | 36 |
| 2.3.4 | Densidad | | 36 |
| 2.4 | MECANISMO DE DISOLUCIÓN DE SÍLICE | | 37 |
| 2.5 | MECANISMOS DE PRECIPITACIÓN | | 40 |
| 251 | | | 40 |
| 252 | | ••••• | 47 |
| 2.6 | MECANISMOS DE POLIMERIZACIÓN | ••••• | 56 |
| 2.0 | | ••••• | 68 |
| 2.7 | | ••••• | 60 |
| 2.7.1 | | ••••• | 72 |
| 2.7.2 | | | 75 |
| 2.7.5 | | ••••• | // |
| 2.0 | MECANISMOS DE DEPOSICION | ••••• | 03 |
| 2.8.1 | MONOMERICA | ••••• | 83 |
| 2.8.2 | MOLECULAR | | 84 |
| 2.8.3 | COLOIDAL | | 85 |
| 3. Estad | O DEL ARTE EN MATERIA DE PREVENCIÓN | | _ |
| Y COR | RECCIÓN DE INCRUSTACIONES | | 88 |
| 3.1 | INHIBIDORES | | 89 |
| 3.1.1 | TIPOS DE INHIBIDORES | | 91 |
| 3.1.1.1 | INHIBIDORES DE BASE POLIACRILATO | | 91 |
| 3.1.1.2 | GEO 901 | | 92 |
| 3.1.1.3 | GEO 903 | | 92 |
| 3.1.1.4 | GEO 980 | | 92 |

| 3.1.1.5 3.1.1.6 3.1.1.7 3.1.1.8 | PHREEdom 5200M Scale-Guard 84614 NaOH o KOH HCl o H2SO4 | | 93 94 94 94 |
|--|--|-------------------------|---|
| 4. Modelar 4.1 | DO DE SÍLICE NANOKIN | | 95 95 |
| 4.2 | SILNUC | | 96 |
| 4.2.1 | ESTRUCTURA Y FUNCIONAMIENTO | | 97 |
| 4.2.2 | FUNDAMENTOS QUÍMICOS | | 00 |
| 400 | Y TERMODINAMICOS DEL PROGRAMA SILNUC | ••••• | 99 |
| 4.2.3 1 2 3 1 | PRINCIPALES ALGORITMOS UTILIZADOS DENTRO DE SILINUC | ••••• | 100 |
| 4.2.3.1 1232 | $\frac{\Delta I}{\Omega} = \frac{1}{\Omega}$ | ••••• | 101 |
| 4233 | ALGORITMO -3 | ••••• | 104 |
| 4.3 | NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA | | 101 |
| | DE LA SÍLICE AMORFA COLOIDAL | | 105 |
| 4.4 | El Tiempo de espera o inducción | | |
| | Y LA TENSIÓN SUPERFICIAL | | 106 |
| 4.5 | SENTIDO PRÁCTICO DEL FENÓMENO DE NUCLEACIÓN | | 108 |
| 4.6 | La Teoría Lothe-Pound | | 108 |
| | | | |
| 5. RENOVAC | TAFORMA DE PROGRAMACIÓN MATLAR | | 111 |
| 5.1 | ACTUALIZACIÓN DE SIL NUC A FORTRAN 77 | ••••• | 111 |
| 5.2 | ACTUALIZACIÓN DE SIL NUC A MATLAB 7 | | 114 |
| 5.3 | DATOS TÉCNICOS | | 118 |
| | | | |
| 6. MODELAC | JÓN TEÓRICA | | 119 |
| 6.1 | APLICACIÓN DEL PROGRAMA SILNUC | | 119 |
| 6.2 | DATOS PARA LA SIMULACION | | 120 |
| 6.2.1 | CONCENTRACION INICIAL DE SIO2 MONOMERICA DISUELTA | | 120 |
| 6.2.2 | CONCENTRACIÓN INICIAL DE SALES PRESENTES EN LA SALMUERA | ••••• | 120 |
| 0.2.3 | CONCENTRACION INICIAL DE FLUORUROS | | 122 |
| 63 | I EMPERATURA | ••••• | 124 |
| 631 | PARAMETROS EVALUADOS EN LAS SIMULACIONES | ••••• | 124 |
| 0.5.1 | | | 107 |
| 632 | CONCENTRACIÓN INICIAL DE SÍLICE COLOIDAI | | 124 |
| 6.3.2 | CONCENTRACIÓN INICIAL DE SÍLICE COLOIDAL Radio de partícula | ····· | 124 124 124 |
| 6.3.2 6.3.3 6.4 | CONCENTRACIÓN INICIAL DE SÍLICE COLOIDAL RADIO DE PARTÍCULA METODOLOGÍA | | 124 124 124 124 |
| 6.3.2 6.3.3 6.4 6.4.1 | Concentración inicial de sílice coloidal Radio de partícula Metodología Grupo No. 1 de simulaciones – Evaluación del efecto | | 124 124 124 124 |
| 6.3.2 6.3.3 6.4 6.4.1 | Concentración inicial de sílice coloidal Radio de partícula Metodología Grupo No. 1 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del radio de partícula, | | 124 124 124 124 |
| 6.3.2 6.3.3 6.4 6.4.1 | Concentración inicial de sílice coloidal Radio de partícula Metodología Grupo No. 1 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del radio de partícula, MATLAB vs FORTRAN | ····· ····· | 124 124 124 124 125 |
| 6.3.2 6.3.3 6.4 6.4.1 6.4.2 | CONCENTRACIÓN INICIAL DE SÍLICE COLOIDAL RADIO DE PARTÍCULA METODOLOGÍA GRUPO NO. 1 DE SIMULACIONES – EVALUACIÓN DEL EFECTO DE LA ALTERACIÓN DEL RADIO DE PARTÍCULA, MATLAB VS FORTRAN GRUPO NO. 2 DE SIMULACIONES – EVALUACIÓN DEL EFECTO | | 124 124 124 124 124 |
| 6.3.2 6.3.3 6.4 6.4.1 6.4.2 | Concentración inicial de sílice coloidal Radio de partícula Metodología Grupo No. 1 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del radio de partícula, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 2 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración de la concentración inicial | ····· ····· | 124 124 124 124 125 |
| 6.3.2 6.3.3 6.4 6.4.1 6.4.2 | Concentración inicial de sílice coloidal Radio de partícula Metodología Grupo No. 1 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del radio de partícula, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 2 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración de la concentración inicial de sílice coloidal, MATLAB vs FORTRAN | ····· ····· | 124 124 124 124 125 135 |
| 6.3.2 6.3.3 6.4 6.4.1 6.4.2 6.4.3 | Concentración inicial de sílice coloidal Radio de partícula Metodología Grupo No. 1 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del radio de partícula, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 2 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración de la concentración inicial de sílice coloidal, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 3 de simulaciones – Evaluación del efecto | ····· ····· | 124 124 124 124 125 135 |
| 6.3.2 6.3.3 6.4 6.4.1 6.4.2 6.4.3 | Concentración inicial de sílice coloidal Radio de partícula Metodología Grupo No. 1 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del radio de partícula, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 2 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración de la concentración inicial de sílice coloidal, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 3 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del pH, MATLAB vs FORTRAN | ····· ····· | 124 124 124 124 125 135 |
| 6.3.2 6.3.3 6.4 6.4.1 6.4.2 6.4.3 6.4.3 | Concentración inicial de sílice coloidal Radio de partícula Metodología Grupo No. 1 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del radio de partícula, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 2 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración de la concentración inicial de sílice coloidal, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 3 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del pH, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 4 de simulaciones – Evaluación estadística | ····· ····· | 124 124 124 124 125 135 |
| 6.3.2 6.3.3 6.4 6.4.1 6.4.2 6.4.3 6.4.4 | Concentración inicial de sílice coloidal Radio de partícula Metodología Grupo No. 1 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del radio de partícula, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 2 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración de la concentración inicial de sílice coloidal, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 3 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del pH, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 4 de simulaciones – Evaluación estadística del efecto de la precisión en los resultados obtenidos. | ····· ····· ····· | 124 124 124 124 125 135 |
| 6.3.2 6.3.3 6.4 6.4.1 6.4.2 6.4.3 6.4.4 | Concentración inicial de sílice coloidal Radio de partícula Metodología Grupo No. 1 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del radio de partícula, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 2 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración de la concentración inicial de sílice coloidal, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 3 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del pH, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 4 de simulaciones – Evaluación estadística del efecto de la precisión en los resultados obtenidos, validación de la implementación del código | ····· ····· | 124 124 124 125 135 139 |
| 6.3.2 6.3.3 6.4 6.4.1 6.4.2 6.4.3 6.4.4 | Concentración inicial de sílice coloidal Radio de partícula Metodología Grupo No. 1 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del radio de partícula, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 2 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración de la concentración inicial de sílice coloidal, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 3 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del pH, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 4 de simulaciones – Evaluación estadística del efecto de la precisión en los resultados obtenidos, validación de la implementación del código MATLAB vs FORTRAN | ····· ····· ····· | 124 124 124 125 135 139 |
| 6.3.2 6.3.3 6.4 6.4.1 6.4.2 6.4.3 6.4.4 | Concentración inicial de sílice coloidal Radio de partícula Metodología Grupo No. 1 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del radio de partícula, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 2 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración de la concentración inicial de sílice coloidal, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 3 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del pH, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 3 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del pH, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 4 de simulaciones – Evaluación estadística del efecto de la precisión en los resultados obtenidos, validación de la implementación del código MATLAB vs FORTRAN Detección de valores desviados o aberrantes | ····· ····· ····· | 124 124 124 125 135 139 143 |
| 6.3.2 6.3.3 6.4 6.4.1 6.4.2 6.4.2 6.4.3 6.4.4 | Concentración inicial de sílice coloidal Radio de partícula Metodología Grupo No. 1 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del radio de partícula, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 2 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración de la concentración inicial de sílice coloidal, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 3 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del pH, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 3 de simulaciones – Evaluación del efecto de la alteración del pH, MATLAB vs FORTRAN Grupo No. 4 de simulaciones – Evaluación estadística del efecto de la precisión en los resultados obtenidos, validación de la implementación del código MATLAB vs FORTRAN Detección de valores desviados o aberrantes (outliers) | ····· ····· ····· | 124 124 124 125 135 135 139 143 147 |

| 6.4.4.1.2 NALIMOV TEST | | |
|---|-------------------------|--|
| | | 148 |
| 6.4.4.1.3 PEARSON AND HARTLEY TEST | | 148 |
| 6.4.4.1.4 Grubb test (ESD) | | 149 |
| 6.4.4.2 VALIDACIÓN DE LA IMPLEMENTACIÓN DEL CÓDIGO | | |
| MATLAB VS FORTRAN MEDIANTE LA COMPARACIÓN | | |
| ESTADÍSTICA DE LOS RESULTADOS | | 151 |
| 6.4.4.2.1 Prueba F (Fisher) | | 151 |
| 6.4.4.2.2 Resultados | | 151 |
| 6.4.4.2.2.1 Número de Partículas | | 151 |
| 6.4.4.2.2.2 Radio de Partícula | | 151 |
| 6.4.4.2.2.3 Masa Total | | 152 |
| 6.4.4.2.3 Pruebat (Student) | | 152 |
| 6.4.4.2.4 Resultados | | 154 |
| 6.4.4.2.4.1 Número de Partículas | | 154 |
| 6.4.4.2.4.2 Radio de Partícula | | 154 |
| 6.4.4.2.4.3 Masa Total | | 154 |
| | | |
| | | 150 |
| 7. CONCLUSIONES | | 156 |
| 7. CONCLUSIONES8. RECOMENDACIONES | | 156 159 |
| 7. CONCLUSIONES8. RECOMENDACIONES | | 156 159 |
| 7. CONCLUSIONES 8. RECOMENDACIONES REFERENCIAS BIBLIOCRÁEICAS | ····· ····· | 156 159 160 |
| 7. CONCLUSIONES 8. RECOMENDACIONES REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS WEB | ····· ····· | 156 159 160 160 |
| 7. CONCLUSIONES 8. RECOMENDACIONES REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS WEB | ····· ····· | 156 159 160 160 176 |
| 7. CONCLUSIONES 8. RECOMENDACIONES REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS WEB ÍNDICE DE FIGURAS, IMÁGENES Y TABLAS | ····· ····· ····· | 156 159 160 160 176 |
| 7. CONCLUSIONES 8. RECOMENDACIONES REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS WEB ÍNDICE DE FIGURAS, IMÁGENES Y TABLAS FIGURAS | ····· ····· ····· | 156 159 160 160 176 177 |
| 7. CONCLUSIONES 8. RECOMENDACIONES REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS WEB ÍNDICE DE FIGURAS, IMÁGENES Y TABLAS FIGURAS IMÁGENES | ····· ····· ····· | 156 159 160 160 176 177 177 179 |
| 7. CONCLUSIONES 8. RECOMENDACIONES REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS WEB ÍNDICE DE FIGURAS, IMÁGENES Y TABLAS FIGURAS IMÁGENES TABLAS | ····· ····· ····· | 156 159 160 160 176 177 177 179 179 |
| 7. CONCLUSIONES 8. RECOMENDACIONES REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS WEB ÍNDICE DE FIGURAS, IMÁGENES Y TABLAS FIGURAS IMÁGENES TABLAS | ····· ····· ····· | 156 159 160 160 176 177 177 179 179 |
| 7. CONCLUSIONES 8. RECOMENDACIONES REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS WEB ÍNDICE DE FIGURAS, IMÁGENES Y TABLAS FIGURAS IMÁGENES TABLAS ÍNDICE DE ECUACIONES Y REACCIONES QUÍMICAS | | 156 159 160 160 176 177 177 179 179 181 |

ANEXO (CD)

INTRODUCCIÓN

Como es bien sabido, en los últimos años, las reservas energéticas fósiles han ido disminuyendo poco a poco por lo cual la tendencia de esta es la de agotarse por completo en un plazo relativamente próximo; debido a esta tendencia, los gobiernos de varios países se han desplazado hacia el uso de nuevas tecnologías y métodos de producción de energía para el sustento de sus naciones.

Otro aspecto no menos importante es el impacto ambiental que ha tenido en el planeta el uso de los combustibles fósiles, las consecuencias de estos pueden verse reflejadas claramente en el calentamiento global, asi como también en la contaminación de mares, océanos, aire, entre otros tantos.

Dicho lo anterior, las principales opciones energéticas a las cuales han recurrido las diferentes naciones son en su mayoría al uso de fuentes renovables para producción de energía, también nombradas energías renovables, entre las cuales destacan la Solar, la Eólica, la Maremotriz, la Hidroeléctrica, la Biomasa, los Biocombustibles y la Geotermia, entre otras.

La geotermia, hoy en día constituye una de las energías renovables más importantes en el mundo, pero como toda energía posee diversos retos que superar. Algunos de los retos que afronta actualmente la geotermia son, el desarrollo de métodos de exploración más precisos para la identificación de yacimientos, la disminución de los costos y tiempos de la perforación de los pozos, la creación de equipo y herramientas de uso exclusivo, y la corrosión e incrustación de las tuberías y equipos.

Las incrustaciones dentro de los ambientes geotérmicos, son producidas por la precipitación de minerales derivada de una sobresaturación de estos en las salmueras. Existen diversos tipos de minerales que pueden precipitar dentro de los ambientes geotérmicos como son la calcita, la anhidrita, la sílice y algunos sulfuros metalicos y minerales férricos.

El presente trabajo se enfoca en las incrustaciones de sílice dejando de lado las demás incrustaciones, ya que la sílice es uno de los principales minerales presentes en la mayoría de los yacimientos geotérmicos en México.

El proceso de precipitación de sílice en sistemas geotérmicos se da principalmente en 3 pasos que son: (i) nucleación, (ii) deposición molecular, (iii) precipitación.

Para el caso de la geotermia puede considerarse la nucleación únicamente como homogénea con resultados aceptables ya que a menos que se agregue deliberadamente materia coloidal a una solución supersaturada de sílice, la nucleación homogénea espontanea parece no ser afectada por las pequeñas cantidades de materia extraña (Iler, 1979).

En la actualidad, el problema de la incrustación de sílice en tuberías y equipos de superficie, dentro del proceso de explotación de sistemas geotérmicos, es uno de los más grandes retos para

dicha industria, ya que trae consigo grandes problemas económicos debidos al decremento en la producción de vapor y por consiguiente en la producción de electricidad.

Alrededor del mundo se han desarrollado diversos métodos para prevenir, mitigar, reducir o remover las incrustaciones generadas por la precipitación de sílice amorfa debida a la sobresaturación de sílice en las salmueras geotérmicas por la caída de la temperatura, presión y variación del pH.

Dentro de los métodos anteriores se encuentra la modelación anticipada y la modelación numérica de los principales fenómenos, la realización de experimentos para la reproducción de los fenómenos para encontrar su posible prevención con inhibidores, y la inyección de sustancias químicas como ácidos o bases para la corrección de las incrustaciones.

Uno de los métodos comprendidos dentro de los antes mencionados, y que puede considerarse como uno de los más factibles por ser uno de los más económicos en diversos aspectos, es la modelación numérica la cual implica el desarrollo y utilización de programas computacionales que simulan el comportamiento, es decir, la cinética de la sílice con respecto al tiempo considerando los cambios del pH, la temperatura y la relación de estos con las concentraciones de sílice.

El mayor problema que existe dentro de la modelación numérica de las incrustaciones es que involucra un gran número de variables las cuales están interrelacionadas, es decir, que dependen unas de otras, además de ser un proceso dinámico. Dentro de la literatura existe un número limitado de trabajos donde se aborda el problema de la nucleación homogénea y deposición molecular de sílice en sistemas geotérmicos por medio de simulación numérica.

Dentro de los programas encontrados destaca el código SILNUC (Weres et al., 1980). El código SILNUC es un código desarrollado en 1980 por Weres y sus colaboradores en el LBL (Lawrence Berkeley Laboratory) el cual simula numéricamente la nucleación homogénea y la deposición molecular de la sílice en sistemas geotérmicos. SILNUC es un código que aun está vigente, y es usado con resultados aceptables. Entre las limitaciones de SILNUC se ha encontrado que no modela la nucleación heterogénea, y que fue programado en FORTRAN 4.

OBJETIVOS

Los objetivos principales de este proyecto son: a) renovar, actualizar y mejorar el código de simulación de la nucleación homogénea y crecimiento de partículas coloidales por deposición molecular de sílice en ambientes geotérmicos llamado SILNUC, y b) realizar la validación de la implementación del código por medio de las pruebas estadísticas pertinentes.

También, se tienen como objetivos secundarios, realizar una revisión del estado del arte de: a) la geotermia en el mundo, sus retos, y avances, b) las incrustaciones presentes en los sistemas geotérmicos, sus métodos de prevención y corrección, c) las teorías de nucleación de la sílice, y d) los modelos utilizados en la simulación de nucleación.

ESTRUCTURA DE TESIS

El presente trabajo se estructuró en 8 capítulos. A continuación se describe brevemente el contenido de cada uno de los capítulos.

En el capítulo 1 se describe a grandes rasgos lo que es la energía geotérmica, su importancia y estatus mundial actual, y las diversas formas en que puede ser clasificada; asi mismo, se exponen las principales problemáticas que enfrenta la geotermia haciendo énfasis en las incrustaciones y los minerales causantes de tales; finalmente se describe la cinética, reacciones y consecuencias de la saturación de las salmueras geotérmicas con algunos de los minerales más comunes en ellas.

En el capítulo 2 se describen a detalle las propiedades de la sílice, sus características, clasificaciones, su cinética, sus diversos mecanismos (nucleación, deposición, coagulación), las reacciones que lleva a cabo y sus repercusiones según diversos estudios de carácter científico realizados a través del tiempo.

En el capítulo 3 se aborda lo referente a la prevención y corrección de incrustaciones, describiendo concisamente los principales métodos existentes y algunos ejemplos de cada uno.

En el capítulo 4 se mencionan únicamente los códigos computacionales más relevantes en la literatura científica mundial relacionados con la simulación de la nucleación. Y se explica la estructura y funcionamiento del código SILNUC, asi como sus fundamentos químicos y termodinámicos.

En el capítulo 5 se explica la metodología llevada a cabo para la actualización y mejora del código SILNUC a la plataforma MATLAB. Se describe la problemática encontrada al cambiar el código de plataforma FORTRAN a MATLAB. Asi mismo se describe a brevedad la estructura y funcionamiento de los códigos generados.

En el capítulo 6 se realiza la validación del código y la modelación de 4 grupos de simulaciones para evaluar los efectos de diferentes parámetros involucrados en la cinética de la sílice, estas simulaciones se realizan con base en la geoquímica de las salmueras de dos campos geotérmicos representativos de México, Cerro Prieto y Los Azufres.

En el capítulo 7 se plasman las conclusiones obtenidas de este proyecto.

En el capítulo 8 se dan algunas recomendaciones en relación a las conclusiones obtenidas.

2. GENERALIDADES

La energía geotérmica, en general, se refiere a la energía térmica natural almacenada en el interior de la corteza de la Tierra. La energía térmica en la Tierra está distribuida entre la roca y los fluidos naturales que están contenidos en las fracturas o poros de las rocas a temperaturas por arriba de la temperatura ambiente (*ver Figura 1.1*).

Estos fluidos están constituidos principalmente por agua que contiene una gran variedad de sales disueltas; estos fluidos están presentes en fase liquida pero en ocasiones pueden presentarse como una mezcla saturada de liquido-vapor o un vapor supercalentado (MIT, 2006).

En la práctica, se denomina como geotermia al estudio y utilización de la energía térmica. Esta energía es transportada a través de la roca y los fluidos, desplazándose por la corteza terrestre hacia la superficie, dando origen a los sistemas geotérmicos (Arellano, 1999).



Figura 1.1-Origen de los sistemas geotérmicos [Figura tomada de (Arellano, 1999)].

A lo largo de la historia, los fluidos geotérmicos han sido usados domésticamente para cocinar y para el aseo personal; a pesar de que la energía geotérmica ha existido siempre, no fue sino hasta principios del siglo XX que la energía geotérmica comenzó a ser aprovechada con fines comerciales e industriales, siendo explotada comercialmente hasta hace apenas tres décadas.

En 1904, fue la primera vez que se generó energía eléctrica por el uso del vapor de origen geotérmico en un campo de vapor dominante en Larderello, Italia (MIT, 2006).

En la década de los setenta, debido al incremento abrupto del precio de los combustibles fósiles, se le dio importancia relevante a la energía geotérmica, mostrándose como una posible solución a los requerimientos energéticos de diversos países carentes de combustibles (Arellano, 1999).

Desde entonces han surgido otros desarrollos geotérmicos como el campo The Geysers, California; los sistemas de agua caliente en Wairakei, Nueva Zelanda; Cerro Prieto, México; Reykjavik, Islandia; Darajat, Indonesia; y, Tiwi en Filipinas.

En conjunto, las plantas anteriores, han alcanzado una capacidad eléctrica generada mundial cercana a los 10,000 MWe y un uso directo con una capacidad no eléctrica de más de 100,000 MWt, esto tan solo a principios del siglo XXI (MIT, 2006).

Actualmente los recursos geotérmicos no solamente son susceptibles de ser aprovechados en la generación de electricidad, sino también en una gran variedad de actividades agrupadas bajo el nombre genérico de usos directos, dentro de los cuales se pueden mencionar los siguientes: calefacción, procesado de alimentos, lavado y secado de lana, fermentación, industria papelera, producción de acido sulfúrico, manufactura de cemento, etc; en general cualquier proceso industrial que requiera de una fuente de calor para realizarse es candidato para el aprovechamiento de la geotermia.

En un futuro no muy lejano se piensa utilizar el calor natural de la Tierra a gran profundidad para lo cual se efectúan trabajos de investigación en diversos países del mundo, entre ellos México (Arellano, 1999).

La fuente y mecanismos de transporte del calor de origen geotérmico son únicos de esta fuente de energía. El calor fluye a través de la corteza de la tierra a una tasa promedio de casi 59 mW/m² (1.9x10⁻² Btu/h/ft²) (MIT, 2006) (*ver Figura 1.2*).

La intrusión de grandes cantidades de roca fundida puede incrementar este flujo normal de calor de manera local, pero para la mayoría de la corteza continental, el flujo de calor se debe principalmente a dos procesos: (1) La convección ascendente y la conducción de calor desde el núcleo y manto de la Tierra, y (2) El calor generado por el decaimiento de elementos radioactivos en la corteza, particularmente los isotopos de Uranio, Torio y Potasio (MIT, 2006).

| Producción de calor entre la corteza y la litosfera del manto = 7 TW | | | | |
|--|-----------------------------|--------------------------------------|---------------------------|---|
| Pérdida de calor del Manto = 39 TW | | | | |
| | Calentamiento del nucleo | Fuentes de calor dentro del manto | Enfriamiento del Manto | |
| | 8 TW | 13 TW | 18 TW | 1 |

Pérdida total de calor = 46 TW

Figura 1.2-Fuentes de calor y pérdidas en el núcleo y manto de la tierra [Datos de (Jaupart, Labrosse, and Mareschal, 2007)].

La geología local y regional asi como los fenómenos tectónicos juegan un rol importante en la determinación de la locación (profundidad y posición) y calidad (química del fluido y temperatura) de una fuente en particular. Por ejemplo, las zonas con un flujo de calor mayor al normal están asociadas con límites de placas tectónicas, o con regiones de actividad ígnea o eventos volcánicos geológicamente recientes (menores a 1 millón de años). Esta es la razón técnica por la cual se asocia la energía geotérmica únicamente a lugares con condiciones como las que se encuentran en Islandia, Nueva Zelanda, o en Japón (limites de placas), o con el parque nacional de Yellowstone (vulcanismo reciente) (MIT, 2006).

Existen algunas formas de identificar la existencia de sistemas geotérmicos, siendo las más comunes a través de manifestaciones superficiales, tales como fumarolas, sulfataras, manantiales de lodo en ebullición, aguas termales, geiseres y volcanes.

1.1 CLASIFICACIÓN DE LOS SISTEMAS GEOTÉRMICOS

Los sistemas geotérmicos pueden clasificarse de diversas maneras: (i) Por su entalpia: Baja Entalpia o Alta Entalpia; (ii) Por el tipo de fluido de trabajo: Líquido o Vapor; (iii) Por su medio de transporte de calor: Petrotermales- Roca o Hidrotermales-Fluidos.

Una de las clasificaciones más comunes en la literatura incluye: (a) Hidrotermales (Convectivos), (b) HDR (Hot Dry Rock – Roca Seca Caliente), (c) Sedimentarios (Conductivos), (d) Geotérmicos acoplados a sistemas de hidrocarburos, (e) Geopresurizados, (f) Magmáticos (Santoyo y Torres, 2010).

1.1.1 HIDROTERMALES (CONVECTIVOS)

Los sistemas hidrotermales, como su nombre lo dice, son aquellos en los que el fluido se localiza de manera natural en el subsuelo y está en contacto continuo con la roca que se encuentra a temperaturas elevadas (mayores a la temperatura ambiente) y fracturada naturalmente, lo cual forma celdas convectivas, transfiriéndole de esta manera calor al fluido. La recarga del yacimiento es comunmente de origen meteórico, es decir de lluvia. La roca en estos sistemas, para poder ser

explotables, debe poseer un flujo de calor adecuado; también deben producirse flujos de vapor o agua caliente a flujos adecuados para procurar la sustentabilidad del yacimiento y asi justificar la inversión; dependiendo de esto pueden clasificarse como yacimientos de: (1) líquido dominante o (2) vapor dominante.

En la actualidad este tipo de sistemas son los más comunmente explotados para la producción de energía eléctrica y algunos cuantos usos directos.

Los sistemas hidrotermales por su origen pueden clasificarse en: a) volcánicos (>200 °C) y b) no volcánicos (<200 °C).

La extracción del fluido de este tipo de yacimientos se hace por medio de la perforación de pozos a profundidades que interceptan el reservorio donde se encuentra el fluido. Posteriormente este fluido es transportado hacia la superficie por el pozo, donde comunmente ocurre el fenómeno de flasheo por los cambios en la presión del fluido; el fluido ahora en 2 fases (liquido y vapor) sigue su camino circulando por las tuberías hasta los separadores donde se separan la fase liquida de la fase vapor; la fase vapor pasa a las turbinas para mover los generadores y producir electricidad, mientras que la fase liquida es reinyectada al yacimiento por medio de pozos inyectores con el fin de asegurar la sustentabilidad del reservorio.

Un ejemplo de yacimientos de vapor dominante de alta entalpia, de origen hidrotermal son los Geysers en California - USA, y Larderello en Italia, entre otros; de liquido dominante de alta entalpia son los de Cerro Prieto - México, Wairakei - Nueva Zelanda y Tiwi - Filipinas entre otros, con temperaturas entre 200 y 350 °C; de liquido dominante de baja entalpia se encuentran en Mammoth Pacific - USA y Langju - China entre otros, con temperaturas menores a 200 °C.

Uno de los principales problemas que afrontan estos sistemas son las incrustaciones de minerales en las tuberías, cambiadores de calor y pozos; este problema aun es estudiado con la finalidad de dar una solución contundente a este fenómeno que afecta de manera importante la geotermia.

1.1.2 HDR

Por sus siglas en ingles HDR (Hot Dry Rock), también llamados sistemas de roca seca caliente; se refiere a los sistemas geotérmicos que tienen su fuente de energía primaria en yacimientos de gran profundidad alojados en la corteza terrestre, es decir entre 3-10 km de profundidad, con temperaturas de entre 200 y 300 °C.

Esta clase de sistemas no cuentan con fluidos confinados debido a su naturaleza geológica la cual es la roca impermeable; a pesar de esto, estos sistemas poseen un alto contenido calorífico, ya que la energía almacenada en este tipo de yacimientos equivale aproximadamente a 500 veces toda la energía acumulada en todos los yacimientos de gas y petróleo del mundo (MIT, 2006).

La extracción de energía en este tipo de sistemas es por medio de inyección de un fluido de trabajo (agua o un gas de bajo punto de ebullición como el CO₂) a través de un pozo inyector, la circulación de este fluido a través de la roca fracturada artificialmente, y la extracción del fluido

caliente o vapor a través de un pozo de extracción o productor; por este motivo se les conoce también como EGS (Engineered Geothermal Systems, o bien, Enhanced Geothermal Systems).

El vapor producido es llevado a las turbinas o bien a una planta de ciclo binario para la producción de energía eléctrica.

Ya que estos sistemas están distribuidos prácticamente en toda la superficie de la tierra, pues solo basta perforar a profundidad en la corteza para encontrar temperaturas adecuadas, estos podrían proporcionar un medio de extracción de calor muy viable para cualquier nación (MIT, 2006).

Unas de las principales limitantes en estos yacimientos son la tecnología adecuada para la perforación a grandes profundidades, la fracturación artificial controlada del reservorio, el registro de datos, y como en toda tecnología geotérmica, las incrustaciones. La mayoría de este tipo de yacimientos se encuentra en etapas exploratorias (Santoyo y Torres, 2010).

1.1.3 SEDIMENTARIOS (CONDUCTIVOS)

Este tipo de sistemas se encuentran localizados en cuencas sedimentarias con altos flujos de calor, como en la cuenca europea central. Para su explotación se requieren pozos muy profundos. Actualmente se están haciendo investigaciones en Europa relacionadas con este tipo de sistemas, con el fin de evaluar su posible explotación, los costos que esto implicaría, y las tecnologías necesarias para llevarse a cabo (Holl et al., 2005).

1.1.4 GEOTÉRMICOS ACOPLADOS A SISTEMAS DE HIDROCARBUROS

Dentro de esta clasificación podemos considerar todos aquellos recursos geoenergéticos almacenados en pozos de petróleo y gas localizados a grandes profundidades. Comunmente en los pozos de petróleo o gas se extrae también agua caliente o salmuera a temperaturas elevadas (90 a 200 °C), esto sucede también en pozos abandonados o han llegado al agotamiento en su producción (Davis & Michaelides, 2009).

En Texas, producto de la explotación petrolera, se extraen cerca de 100 barriles de agua caliente por cada barril de petróleo, los cuales son reinyectados al subsuelo sin su aprovechamiento, esto dado que su costo de aprovechamiento no es atractivo en este momento. A pesar de lo anterior, en la actualidad existen ya diversos estudios que reportan resultados favorables para su aprovechamiento (MIT, 2006).

1.1.5 GEOPRESURIZADOS

Son yacimientos situados a grandes profundidades comunmente en rocas de tipo sedimentarias, estos poseen H_2O y CH_4 disueltos a presiones altas de aproximadamente 700 Bar y temperaturas entre 90 y 200 °C (MIT, 2006; Sanyal, 2010).

Su ventaja es que ofrece el posible aprovechamiento de diversas clases de energía como térmica (agua caliente), química (metano), mecánica (alta presión), con la desventaja que su existencia es limitada (Lund et al., 2010).

Este tipo de sistemas siguen siendo estudiados pero aun no son explotados comercialmente, ejemplo de estos sistemas podemos encontrar en Texas y Louisiana, USA.

Resultado de diversos estudios, se estima un potencial energético de aproximadamente unos 400 MWt tan solo en las costas de Texas. Se desconoce el potencial de estos sistemas en México.

1.1.6 MAGMÁTICOS

También llamados sistemas geotérmicos supercríticos, asociados con aparatos volcánicos activos o detectados a gran profundidad, entre 4 y 6 Km, o en zonas de debilidad cortical (Santoyo y Torres, 2010).

Recientemente en Islandia se tuvo contacto directo con una intrusión de magma en un pozo de 2.1 km de profundidad. El atractivo más importante de este tipo de recursos son las altas temperaturas disponibles >800 °C (Iglesias et al., 2005).

Este tipo de fluidos pueden proveer hasta 10 veces más energía que la que posee un fluido de un sistema hidrotermal convencional. En la actualidad existe un proyecto geotérmico que se encuentra en desarrollo en Islandia; de ser explotable, proporcionaría una fuente energética geotérmica de ultra alta eficiencia (Elders et al., 2014).

1.2 ESTADO ACTUAL DE LA GEOTERMIA EN EL MUNDO (2013)

En la actualidad, según diversos trabajos, el total de las pérdidas de calor conductivo de la Tierra se estima en 25-32 GWT. (MIT, 2006).

En los congresos mundiales de geotermia (WGC-World Geothermal Congress) organizados por la IGA (International Geothermal Association) en Japón (2000), Turquía (2005) e Indonesia (2010) se presentaron trabajos que señalan que la utilización de la energía geotérmica será la dirección principal de energía en el tercer milenio. En el siglo 21, la proporción de recursos geotérmicos en el balance energético de la economía mundial probablemente aumentará al menos al 30% e incluso el 80%, según las previsiones más optimistas (Huttrer, 2000; Lund, Freeston y Boyd, 2010; Chamorro et al., 2011)

En términos generales, existen actualmente 3 principales tecnologías que son usadas para la producción de electricidad de origen geotérmico. Estas tecnologías bien establecidas son las plantas de Vapor Seco, de Flasheo y las plantas de Ciclo Binario. Cada tecnología está relacionada con el estado del fluido y la temperatura que presentan justo al salir del reservorio geotérmico. Diversos análisis muestran que las plantas de energía de vapor seco son los más eficientes. Las centrales eléctricas de Flasheo de vapor incrementan su eficiencia exergética con el aumento de la temperatura del yacimiento. La tecnología de Doble Flasheo eleva la energía producida con respecto a la de Flasheo individual entre 17 y 25%. Un proceso adicional, es decir un tercer flasheo, aumenta la producción de energía en un 10% (Chamorro et al., 2011).

Las centrales geotérmicas basadas en las tecnologías antes mencionadas se están usando en al menos 24 países del mundo. Hoy en día, la capacidad instalada de energía es superior a 11.772 MW, y la energía anual producida está cerca de 70 000 GWh (AGM, 2014).

La *Tabla-1.1* muestra la capacidad instalada y la electricidad generada anualmente por país y el total a nivel mundial en el 2010 (IGA, 2011). La *Tabla-1.2* muestra la capacidad instalada de cada país y la capacidad instalada mundial total hasta el año 2013 (AGM, 2014). La *Tabla-1.3* y la *Figura 1.3* muestran la evolución mundial de la geotermia con respecto a la capacidad instalada desde 1975 hasta 2010 y la capacidad planeada para 2015 (Bertrani, 2010; IGA, 2010).

| País | Unidades | Capacidad Instalada | Energia Producida |
|--------------------|----------|---------------------|-------------------|
| F dIS | Uniudues | MW | GWh/año |
| Alemania | 4 | 7.1 | 50.2 |
| Australia | 2 | 1.1 | 0.5 |
| Austria | 3 | 1.4 | 3.8 |
| China | 8 | 24.2 | 150.0 |
| Costa Rica | 6 | 165.5 | 1131.0 |
| El Salvador | 7 | 204.4 | 1422.0 |
| Estados Unidos | 210 | 3098.0 | 16603.4 |
| Etiopía | 2 | 7.3 | 10.0 |
| Filipinas | 3 | 1904.1 | 10311.0 |
| Francia | 3 | 16.2 | 95.0 |
| Guatemala | 8 | 52.0 | 289.2 |
| Indonesia | 22 | 1197.3 | 9600.0 |
| Islandia | 25 | 574.6 | 4597.0 |
| Italia | 33 | 842.5 | 5520.0 |
| Japón | 20 | 532.2 | 3063.5 |
| Kenia | 14 | 202.0 | 1430.0 |
| México | 37 | 958.0 | 7047.4 |
| Nicaragua | 5 | 87.5 | 310.0 |
| Nueva Zelanda | 43 | 761.6 | 4055.0 |
| Papua Nueva Guinea | 6 | 56.0 | 450.0 |
| Portugal | 5 | 28.5 | 175.0 |
| Rusia | 11 | 81.9 | 440.7 |
| Tailandia | 1 | 0.3 | 2.0 |
| Turquía | 5 | 91.1 | 489.7 |
| Mundial Total | 536 | 10897.8 | 67246.4 |

Tabla-1.1 Plantas Geotérmicas en operación, capacidad instalada y electricidad generada anualmente por país y mundial total en 2011 [Datos (IGA, 2011)].

| País | Capacidad Instalada MW | |
|------------------------------------|------------------------|--|
| Estados Unidos | 3389.0 | |
| Filipinas | 1848.0 | |
| Indonesia | 1341.0 | |
| México | 1017.4 | |
| Italia | 875.5 | |
| Nueva Zelanda | 842.6 | |
| Islandia | 664.4 | |
| Japón | 537.0 | |
| Kenia | 248.5 | |
| Costa Rica | 207.1 | |
| El Salvador | 204.4 | |
| Turquía | 166.6 | |
| Nicaragua | 149.5 | |
| Rusia | 81.9 | |
| Papúa-Nueva Guinea (Isla Lihir) | 56.0 | |
| Guatemala | 48.0 | |
| Portugal (Islas Azores) | 28.5 | |
| China (incluye Tibet) | 27.0 | |
| Francia (Isla Guadalupe y Alsacia) | 17.0 | |
| Alemania | 11.9 | |
| Etiopía | 8.0 | |
| Austria | 1.4 | |
| Australia | 1.0 | |
| Tailandia | 0.3 | |
| Mundial Total | 11772 | |

Tabla-1.2 Capacidad instalada por país y mundial total hasta el 2013 [Datos (AGM, 2014)].

Tabla-1.3 Evolución de la capacidad total energética geotérmica instalada en el mundo desde 1975 al 2010 y pronóstico para el 2015 [Datos (Chamorro et al., 2011)].

| Año | Capacidad Instalada MW | Incremento desde 5 años atrás MW |
|------|------------------------|-------------------------------------|
| 1975 | 1300.0 | |
| 1980 | 3887.0 | 2587.0 |
| 1985 | 4764.0 | 877.0 |
| 1990 | 5831.1 | 1067.1 |
| 1995 | 6866.1 | 1035.0 |
| 2000 | 7972.9 | 1106.8 |
| 2005 | 8932.6 | 959.7 |
| 2010 | 10897.0 | 1964.4 |
| 2015 | 18500.0 | 7603.0 |



Figura 1.3-Evolución de la capacidad energética geotérmica instalada desde 1975 al 2010 y capacidad planeada para 2015 [Datos (Chamorro et al., 2011)].

Se observa claramente un incremento constante de aproximadamente 1000 MW cada 5 años de 1980 a 2005; además, en 2 periodos existe un incremento mayor de aproximadamente 2000 MW en 5 años. El primero que va de 1975 a 1980 puede deberse muy probablemente al efecto de la crisis del petróleo en el mercado en 1973, y el segundo de 2005 a 2010 se debe al reciente y creciente interés en las energías renovables en general, y en particular en la energía geotérmica.

Por su parte, la *Tabla-1.4* muestra la distribución de cada planta de acuerdo al número de unidades instaladas de su tipo, la capacidad total instalada y el tamaño energético promedio para cada tipo de tecnología (IGA, 2010).

| Planta | Unidades | Capacidad Instalada MW | Tamaño promedio MW | capacidad total instalada |
|----------------------------------|----------|---------------------------|-----------------------|------------------------------|
| Vapor Seco | 61 | 2822.0 | 46.3 | 25.9 |
| Flasheo Simple | 145 | 4551.6 | 31.4 | 41.8 |
| Doble Flasheo | 64 | 2182.7 | 34.1 | 20.0 |
| Otra (Principalmente binaria) | 266 | 1341.5 | 5.1 | 12.3 |
| Total | 536 | 10897.8 | 20.3 | 100.0 |

Tabla-1.4 Distribución mundial de las centrales eléctricas por tipo de planta [Datos (Chamorro et al., 2011)].

En Rusia y otros países se llevaron a cabo trabajos de investigación a escala regional con particular intensidad en el siglo 20, los resultados obtenidos hicieron posible crear numerosos y diversos mapas geotérmicos publicados en diferentes años (Smirnov, 1980; Podgornykh y Khutorskoy,

1997; Smyslov, 2000;, entre otros). Bases de datos de temperaturas a profundidad recogidas durante las investigaciones promovieron la creación de modelos geotérmicos en 2-D y 3-D para regiones separadas (Khutorskoy et al., 2004).

Como puede verse, la geotermia en una fuente de energía en continuo crecimiento, estudio y mejora; sin embargo, existen aun ciertos retos que deben ser mejor estudiados para encontrar soluciones más viables. A continuación se describen brevemente algunos de estos problemas.

1.2.1 PRINCIPALES PROBLEMAS

Como toda fuente de energía, la geotermia tiene pros y contras; algunos de los principales problemas que afronta la geotermia son: la identificación y descripción de zonas geotérmicas de modo certero, la falta de tecnologías (en general) adecuadas y de diseño exclusivo, la falta de modelos matemáticos descriptivos de comportamiento de los fluidos y gradientes térmicos que sean aplicables a cualquier yacimiento, los costos de un proyecto de este tipo, procurar la sustentabilidad de un yacimiento, y no menos importante, las incrustaciones.

En relación a la identificación y descripción de las zonas geotérmicas de modo certero se necesitan de técnicas más eficientes para la localización y exploración de lugares promisorios para el desarrollo geotérmico, asi como el desarrollo de nuevas herramientas que contribuyan a elaborar mapas geológicos y estructurales tridimensionales de las zonas ya identificadas para vislumbrar el potencial energético y tamaño de los yacimientos (Bruhn et al., 2010; Blöcher et al., 2010; Sausse et al., 2010; Place et al., 2011).

Con respecto a las tecnologías de diseño exclusivo, se requiere del diseño de nuevos equipos y herramientas con fines específicos para sistemas geotérmicos, ya que la mayoría de la tecnología que se utiliza en la geotermia procede de la que se maneja en la industria de los hidrocarburos. Algunas de las diferencias son que se trabaja a mayores profundidades, en ocasiones nos enfrentamos a mayores presiones, y la principal es que se perforan rocas de mucho mayor dureza a temperaturas muy por encima de las que se ven comunmente en la industria del gas y del petróleo. Por estas razones es de suma importancia el desarrollo de nuevas tecnologías de perforación y registro de datos que soporten las condiciones que se presentan en los yacimientos geotérmicos (Elders et al., 2014).

La falta de modelos, que describan el comportamiento de los fluidos geotérmicos, contribuye al desconocimiento del cambio en las composiciones de los fluidos dentro de una planta geotérmica y por ende el desconocimiento de donde y cuando ocurrirán incrustaciones. Los modelos de gradientes térmicos contribuyen a poder realizar el cálculo de los flujos de calor y poder saber cuáles son los flujos adecuados y de esta manera garantizar una buena producción energética sin agotar un yacimiento. Diversos modelos han sido desarrollados pero comunmente no se ajustan de igual manera a todos los yacimientos, de aquí la necesidad de un modelo universal. Un ejemplo de estos modelos es el programa de simulación TOUGHREACT (Xu et al., 2006).

La inversión necesaria para desarrollar una planta de producción de energía geotérmica es elevada, sin embargo, las ganancias son mucho mayores a esta y la recuperación es relativamente rápida una vez comenzando la producción. Generalmente, en todos los desarrollos geotérmicos el mayor consumo de recursos lo constituyen los gastos de perforación del pozo y la instalación de la planta de generación (~120-150 mdd ~40MW en plantas de un solo flasheo); por este motivo los proyectos geotérmicos no han recibido suficiente apoyo en la actualidad, y también debido a que en estos momentos es mucho más atractiva y redituable la explotación de los hidrocarburos (Enel, 2007).

Procurar la sustentabilidad de un yacimiento parece relativamente fácil pero está relacionado con varias cuestiones, como el conocimiento estructural del yacimiento, el cual consiste en evaluar donde se encuentra y cuantas fallas posee, el tamaño de las fallas, el tamaño del reservorio, el tipo de roca en el que se encuentra, la composición de los fluidos, los gradientes de calor, etc.

Y por último, uno de los principales problemas con que se enfrenta la geotermia en diversas partes del mundo son, las incrustaciones. Las incrustaciones son las causantes del abandono de pozos por su taponamiento, también provocan la reducción y obstrucción de tuberías, disminuye la taza de flujo de calor en los sistemas intercambiadores de calor en las plantas de ciclo binario, también traen consigo problemas de corrosión los cambios de pH en las salmueras. El estudio de las incrustaciones en la actualidad se basa en la búsqueda de soluciones a este fenómeno y el desarrollo de modelos para entender su comportamiento.

En este último contexto, se han llevado a cabo investigaciones recientes para entender la cinética y mecanismos de precipitación (Mroczek et al., 2000; Efendiev and Zachariah, 2003; Tobler et al., 2009; McIntosh, 2013; entre otros) e investigaciones enfocadas al desarrollo de: modelos computacionales para predicción de incrustación de minerales (Weres et al, 1980; Potapov et al., 2006), asi como, nuevos inhibidores para remoción de la precipitación de minerales (Badruk and Matsunaga, 2001; Gill, 2011; Stapleton and Weres, 2011; entre otros), equipos y modelos para caracterización de yacimientos en todos los aspectos (Willis-Richards and Wallroth, 1995; Geiermann and Schill, 2010; Place et al., 2011; Vogt et al., 2012; entre otros), entre otras tantas.

1.2.2 PRECIPITACIÓN DE MINERALES EN POZOS, TUBERÍAS Y EQUIPO SUPERFICIAL.

Como es sabido, los fluidos geotérmicos, por su naturaleza, contienen grandes cantidades de minerales disueltos debido a las interacciones geoquímicas que se dan en el subsuelo entre el fluido y la roca debido a las altas temperaturas y presiones existentes.

En su estado natural, los yacimientos vírgenes se encuentran en equilibrio geoquímico, un equilibrio entre la roca y el fluido debido a un largo tiempo de residencia (miles de años) y a una temperatura relativamente alta (> $150^{\circ}C - 350^{\circ}C$).

Cuando un sistema ha tenido un largo periodo de residencia, se asume que este se encuentra en equilibrio químico (Grigsby et al., 1989), el cual es perturbado en el momento en que se perfora el

reservorio y se permite la salida o entrada de fluido, provocando cambios en la presión y temperatura, siendo estos cambios los causantes principales de la ruptura del mencionado equilibrio.

Cuando el equilibrio se rompe, el sistema busca restablecer el equilibrio y una forma es precipitando minerales, es decir produciendo incrustaciones.

Las incrustaciones son el resultado de la precipitación de alguno o varios de los elementos disueltos presentes en las salmueras geotérmicas debido a una sobresaturación de estos.

La sobresaturación del fluido geotérmico es causada por cambios en la temperatura y presión, asi como por cambios en el pH, pérdida de agua (vapor), o CO2, entre otros.

Las deposiciones o incrustaciones son un verdadero obstáculo en la geotermia ya que causan bloqueos y /o reducciones en tuberías y pozos, asi como la diminución del intercambio de calor en las plantas de ciclo binario.

Lo anterior se traduce en la necesidad de cambiar o reparar las tuberías, re-perforar o taladrar los pozos o en el peor de los casos perforar nuevos pozos, lo cual acarrea 2 problemas: costos adicionales y reducción en la producción (*ver Imagen 1.1*).



Imagen 1.1 Cabeza de pozo abandonada por incrustación.

Las incrustaciones por su tipo de comportamiento, tienen zonas preferenciales para precipitar.

Por ejemplo, los sulfuros metálicos y los carbonatos de calcio tienden a incrustarse en puntos de ebullición y en pozos productores (*ver Imagen 1.2*) (Ngothai et al., 2010).



Imagen 1.2 Precipitación de Calcita en liners de los pozos productores [Imagen tomada de (Fridriksson and Thórhallsson, 2010)].

En equipos de superficie lo más común es la precipitación de sílice amorfa principalmente y carbonatos de calcio en menor grado (*ver Imagen 1.3*).



Imagen 1.3 Separador de vapor con incrustación de sílice y corrosión [Imagen tomada de (Villaseñor and Calibugan, 2011)].

Por otra parte en los pozos reinyectores y tuberías de transporte lo más común es encontrar incrustaciones de sílice amorfa (ver Imagen 1.4 a), b) y c)).



Imagen 1.4 a) y b) Tuberías de transporte con incrustación de sílice, c) Tubería de pozo reinyector [Imágenes tomada de (Villaseñor and Calibugan, 2011)].

En general, los principales minerales que precipitan en los campos geotérmicos (Ngothai et al., 2010) son: Anhidrita CaSO₄, Calcita CaCO₃, Sílice SiO₂ (Diferentes fases), Sulfuros Metálicos (ZnS) y Minerales Férricos (silicatos de fierro).

La sílice, de entre todas las incrustaciones, es la más recurrente ya que está presente en casi todos los sistemas geotérmicos, y es de esperarse, debido a que el principal componente de la mayoría de las rocas es la sílice. A continuación se describe brevemente algunos detalles de los 2 minerales formadores de incrustaciones en la mayoría de los sistemas geotérmicos.

1.2.2.1 CALCITA (CaCO₃)

La incrustación de calcita es una de las mayores causas de la disminución de la salida de fluidos en los pozos productores.

Se cree que la entrada de fluidos fríos al reservorio inhibe la incrustación de calcita en los pozos productores (Herras et al., 2000).

La solubilidad de los minerales de calcio en solución acuosa, aumenta conforme disminuye la temperatura, es decir que son menos solubles a altas temperaturas; también, su solubilidad aumenta en relación directa con la presión parcial de CO₂.

La reacción de formación de la calcita en forma general es:

$$Ca^{+2} + CO_3^{-2} = CaCO_3$$
 (1.1)

Bajo condiciones geotérmicas normales, la cantidad de carbonato acuoso (CO_3^{-2}) disponible es muy poca. Comunmente la mayoría de los iones carbonato disueltos en las salmueras se encuentran como ácido carbónico (H_2CO_3) o bicarbonato (HCO_3^{-1}) (Herras et al., 2000).

En una solución en ebullición se desprende CO_2 a la par que se van haciendo disponibles los iones carbonato (CO_3^{-2}) y de esta manera reaccionan con los iones de calcio causando la deposición de carbonato de calcio.

$$2HCO_3^{-}{}_{(aq)} = CO_3^{-2}{}_{(aq)} + H_2O + CO_2{}_{(g)} \uparrow$$
(1.2a)

$$Ca^{+2}{}_{(aq)} + 2HCO_{3}^{-}{}_{(aq)} = CaCO_{3(s)} + H_2O + CO_{2(g)} \uparrow$$
 (1.2b)

Asi, la ebullición es causa de incrustación de calcita en los pozos. La ebullición conduce a una disminución en la presión parcial de CO_2 debido a la transferencia de CO2 a la fase vapor que se forma. El CO_2 tiene una solubilidad mínima en agua a temperaturas entre 160-180 °C (Herras et al., 2000).

De acuerdo con Arnórsson (1989), la desgasificación de CO2 provoca un incremento de pH y un fuerte incremento en la concentración del ion carbonato, lo que transforma agua saturada en supersaturada con calcita por la ebullición.

Debido a que los minerales de calcio en solución acuosa son menos solubles a altas temperaturas, la incrustación de estos minerales ocurre en zonas profundas de los pozos productores o en zonas de temperaturas pico; lo anterior conlleva a una reducción en la productividad de fluido geotérmico, perdidas de presión y por ende una reducción en la producción de energía.

1.2.2.2 SÍLICE (SiO₂)

La incrustación de la sílice es un problema bien conocido en los sistemas geotérmicos hidrotermales, ocurre debido a la presencia de sílice amorfa, durante la extracción de calor o el Flasheo parcial (Robinson, 1982).

La solubilidad de la sílice crece con relación directa a la temperatura del fluido que la contiene, también depende del pH. La sílice amorfa puede contener diversos metales como Fe, Mg, Ca, etc.

El hierro enlazado a la sílice amorfa tiende a precipitar en puntos de mezclado de fluido; en estos puntos, la temperatura, la presión y el pH cambian rápidamente dando lugar a cambios en la solubilidad y el equilibrio químico haciendo precipitar la sílice.

La sílice tiene varias fases estructurales por ejemplo el cuarzo, tridimita, cristobalita, calcedonia, y la sílice amorfa (más detalles en el capitulo 2); la sílice existe en solución tanto como en forma de polímero como de monómero; esta variedad lleva a un complejo conjunto de mecanismos para la precipitación de la sílice, especialmente en ambientes de temperaturas bajas, asi como en pozos inyectores.

En el siglo pasado se han realizado diversos estudios bastante amplios en relación a la disolución de la sílice sólida en agua (Mackenzie and Gees, 1971; Owen, 1975; Robinson, 1982); se han investigado también los datos de solubilidad para varias fases de sílice (Rimstid and Barnes, 1980; Robinson, 1982); la fase más estable es el cuarzo, después α -cristobalita, seguida de β -cristobalita y finalmente la sílice amorfa.

La concentración de sílice en aguas de reservorios geotérmicos de 200-350 °C es de aproximadamente 300-700 mg/Kg (ppm) y este rango de concentraciones de SiO₂ disuelto se debe principalmente a la solubilidad del cuarzo (Gunnarsson and Arnórsson, 2005).

El contenido de sílice en las aguas geotérmicas está controlado por la solubilidad del cuarzo en el fondo y no por la solubilidad de la sílice amorfa en la superficie y cerca de la superficie de la tierra (Fournier and Rowe, 1966).

La sílice disuelta en la salmuera puede convertirse en supersaturada por el flasheo o enfriamiento de la salmuera al ascender a la superficie (Chan, 1989). Por ello es de primordial importancia la determinación de la concentración de las salmueras geotérmicas en cada punto de su recorrido por la planta de generación de energía eléctrica.

Dependiendo del grado de supersaturación, la sílice monomérica puede nuclearse y depositarse como sílice amorfa en equipos y en los cambiadores de calor.

La reacción de equilibrio de solubilidad de la sílice en forma general es:

$$SiO_{2(s)} + 2H_2O \iff H_4SiO_{4(aq)}$$

$$\underbrace{H_4SiO_{4(aq)}}_{\acute{Acido Silícico}}$$
(1.3)

La solubilidad de la sílice amorfa en solución es afectada por la presión, la temperatura, el pH y el contenido de sales.

Existen 2 procesos que involucran a la sílice acuosa y que ocurren dentro de una solución de sílice amorfa supersaturada.

-El primero es la precipitación directa de sílice amorfa directamente sobre la superficie del equipo

-El segundo es la tendencia de la sílice a polimerizarse y formar coloides que permanecen en suspensión por largos periodos de tiempo. La sílice polimérica tiene menor tendencia a precipitar que la sílice monomérica (Gunnarsson and Arnórsson, 2005).

Los factores que controlan la taza de polimerización de sílice disuelta son el pH, salinidad, grado de supersaturación, presencia de sustancias solidas y temperatura (Angcoy and Arnórsson, 2010).

Bethke (1996) compiló las constantes de velocidad de disolución para cuarzo y sílice amorfa las cuales fueron originalmente determinadas por Rimstidt y Barnes (1980), estas constantes fueron determinadas experimentalmente.

Es de primordial importancia conocer a profundidad el comportamiento de la sílice en cada una de sus fases, desde los aspectos termodinámicos y cinéticos, y sus procesos de disolución, nucleación, y deposición, para poder entonces crear modelos que nos sean útiles en la predicción de la incrustación en cualquier sistema geotérmico y poder proponer soluciones para evitarlas.

2. SiO2 (SÍLICE)

2.1 INTRODUCCIÓN

La sílice es por mucho el componente más abundante en la corteza terrestre, y aun queda mucho por aprender de su química y en particular de su de solubilidad en agua. El mecanismo de su deposición para formar cristales de cuarzo que contienen inclusiones de aceite mineral, de mercurio o de dióxido de carbono líquido sigue siendo un misterio (Dake et al., 1953).

Quizá no sea casualidad que la sílice sea soluble en agua, mucho más que en cualquier otro disolvente. Existe mucho en común entre el agua y la sílice, ambos consisten principalmente de átomos de oxigeno con uno más pequeño de hidrogeno o silicio.

Las partículas de agua y sílice son muy similares tanto que la transición entre los ácidos silícicos hidratados y la matriz acuosa es gradual (Weyl and Marboe, 1967). El agua y la sílice, ambos, poseen una temperatura de volumen mínimo.

Las moléculas de agua están dispuestas en un arreglo bastante amplio como el cuarzo, y el agua súper-enfriada (hielo) tiene una estructura aun más abierta como la tridimita (Fowler and Bernal, 1933).

Estas ideas llevan a pensar que existe una relación entre la densidad del agua y la solubilidad de varias formas de sílice. Los pequeños átomos de hidrogeno y silicio se ajustan entre los de oxígeno contribuyendo a un volumen pequeño.

No existe evidencia alguna de que la sílice sea "soluble" en un grado apreciable en otro líquido más que en agua. Sin embargo, esta declaración depende de la definición de "soluble".

La disolución de la sílice involucra una reacción química llamada hidrólisis en agua en exceso (Rimstidt and Barnes, 1980):

$$SiO_{2(s)} + 2H_2O_{(aq)} = Si(OH)_{4(aq)}$$
 (2.1)

Esta no es una simple solución como la de agua y azúcar donde la molécula de azúcar existe intacta en solución. Es más bien como una analogía a un estado de equilibrio hipotético entre la sílice y el éter, con éter en exceso:

$$SiO_2 + 2(CH_3)_2 O = Si(OCH_3)_4$$
 (2.2)

Ambos como soluciones aparentan ser fluidos claros como el agua, es decir incoloros y traslucidos. El monómero de sílice disuelta o $Si(OH)_4$, sería probablemente un liquido claro si pudiera ser aislado en condiciones anhidras. En estado puro podría incluso cristalizar (Iler, 1979). La naturaleza inusual del sistema sílice-agua había sido notada por Lyklema et al. (1971) quien señalo que la confusión sin fin en la literatura concerniente a la interface sílice-agua se debía a que las características de hidratación y solubilidad no habían sido entendidas.

La disolución y deposición de sílice en agua involucra reacciones de hidratación y deshidratación, catalizadas por iones OH^- (Rimstidt and Barnes, 1980):

$$(SiO_2)_x + 2H_2O \xleftarrow{\text{HIDRATACION}} (SiO_2)_{x-1} + Si(OH)_4$$
 (2.3a)

$$SiO_2 + 2H_2O = (SiO_2 \cdot 2H_2O) ; (SiO_2 \cdot 2H_2O) \rightarrow Si(OH)_4$$
 (2.3b)

$$Si(OH)_4 = (SiO_2 \cdot 2H_20) ; (SiO_2 \cdot 2H_20) \rightarrow SiO_2 + 2H_20$$
 (2.3c)

La sílice se está constantemente disolviendo y precipitando sobre la mayor parte de la corteza terrestre. Los ciclos sedimentarios han sido descritos en detalles complejos por Siever (1957).

La sílice soluble se deriva principalmente del desgaste de los minerales que, en algunos casos, resultan en residuos de sílice amorfa que se disuelven. Una muy pequeña parte puede venir de las arenas de las costas, o del cuarzo, el cual es soluble solo unas cuantas partes por millón en condiciones normales; además, la tasa de disolución es extremadamente lenta (Iler, 1979).

2.2 FASES

Ya que las diferentes fases de sílice exhiben un comportamiento de solubilidad diferente cada una, serán descritas brevemente. Por mucho la forma cristalina más común es el cuarzo, el cual es el principal constituyente de la arena común. Sin embargo bajo ciertas condiciones en la naturaleza y en el laboratorio, pueden producirse otras formas. Estas formas a su vez se pueden dividir en las siguientes clases: (i) Sílice Cristalina Anhidra SiO_2 , (ii) Sílice Cristalina Hidratada $SiO_2 \cdot xH_2O$, y (iii) Sílice Amorfa: a) Anhidra de forma microporosa anisotrópica como fibras u hojas, b) Anhidra o hidratada de subdivisión coloidal o forma microporosa isotrópica como los soles, los geles y los polvos finos, y c) Vítrea de densidad masiva.

2.2.1 SÍLICE CRISTALINA ANHIDRA SiO_2

Sosman (1964) clasificó la mayoría de las fases comunes como sigue (ver Tabla-2.1):

 Tabla-2.1 Clasificación de las fases comunes de sílice cristalina anhidra según su estabilidad termodinámica

 [Tabla modificada de (Iler, 1979)].

| • | ())] |
|---------------------------------------|--|
| Termodinámicamente Estables a Presión | Intervalo de Estabilidad Termodinámica |
| Atmosférica | (°C) |
| Cuarzo bajo | Hasta 573 |
| Cuarzo alto | 573-867 → Tridimita |
| Tridimita S-I | Hasta 64 |
| Tridimita S-II | 64-117 |
| Tridimita S-III | 117-163 |
| Tridimita S-IV | 163-210 |
| Tridimita S-V | 210-475 |
| Tridimita S-VI | 475-1470 → Cristobalita |
| Tridimita M-I | Hasta 117 |
| Tridimita M-II | 117-163 |
| Tridimita M-III | Arriba de 163 |
| Cristobalita baja | Hasta 272 |
| Cristobalita alta | 272-1723 |

Las diferentes formas de cuarzo, tridimita, y cristobalita son transformadas espontáneamente con temperatura de modo que desde el punto de vista de solubilidad solo hay 3 fases que deben ser consideradas.

El siguiente grupo de tres fases son las que se forman solo bajo condiciones de altas temperaturas y presiones (*ver Tabla-2.2*) (Iler, 1979).

| Termodinámicamente Estable a | Intervalo de Estabilidad Termodinámica | | |
|------------------------------|--|----------------|--|
| Alta Temperatura | Temperatura (°C) | Presion (Kbar) | |
| Keatita | 400-500 | 0.8-1.3 | |
| Coesita | De 300 | 15 | |
| | A 1700 | 40 | |
| Stishovita | 1200-1400 | 160 | |

Tabla-2.2 Fases de sílice formada a altas temperaturas y presiones [Tabla modificada de (Iler, 1979)].

Estudios de estas fases y sus propiedades han sido publicados por Frondel (1962) y Sosman (1965). Wells (1975) relaciona la estructura de las diferentes formas de sílice a varios silicatos cristalinos. El cuarzo, la fase más común encontrada en la naturaleza, varía desde grandes cristales, hasta polvos de aspecto amorfo de unas pocas micras de tamaño, y masas sin forma, de calcedonia ágata o pedernal, compuestas por cristales microscópicos interconectados densamente empaquetados. Las transformaciones entre las 3 formas comunes y la sílice vítrea son las siguientes a presión ordinaria:

$$\textit{Cuarzo} \xleftarrow{870 \ ^{\circ}\text{C}} \textit{Tridimita} \xleftarrow{1470 \ ^{\circ}\text{C}} \textit{Cristobalita} \xleftarrow{1700 \ ^{\circ}\text{C}} \textit{Vitrea}$$

La transformación a tridimita aparentemente requiere trazas de ciertas impurezas o mineralizadores.

Las tres fases meta estables a presión ordinaria fueron reconocidas recientemente. La Keatita fue descubierta por Paul Keat (1954), y su formación vía cristobalita y su trasformación a cuarzo fueron estudiadas por Carr y Fyfe (1958). Hoover (1960), en una patente presentada en 1954 describió la preparación de un material muy similar sino idéntico a partir del acido silícico, que es, el polvo de sílice amorfa hidratada, por calentamiento en agua a aproximadamente 3000 atm de presión y 500-625 °C en presencia de aproximadamente 1% de álcali en base de sílice.

La Coesita fue descubierta por Coes en 1953. Está hecho de sílice amorfa en el mismo intervalo de temperatura que la Keatita, pero a una presión 10 veces mayor y con un catalizador acido débil como el acido bórico o cloruro de amonio (Coes, 1959). Fue encontrado de manera natural en 1960 en el Crater Meteoro, en Arizona, aparentemente se formo gracias a las condiciones de temperatura y presión del impacto.

De manera similar, la Stishtovita fue primero preparada en el laboratorio en 1961 por Stishov y Popova (1961) y descubierto en el Crater Meteoro por Chao, Shoemaker, y Madsen en 1962 (Chao et al., 1960).

Existen también algunas formas cristalinas anhidras inusuales, como las siguientes: Sílice W (Weiss y Weiss, 1954); Melanoflogita (Skinner y Appleman, 1963); Sílice O (Sosman, 1965; Roy, 1959); Sílice X (Greenwood, 1967); Silicalita (Flanigen et al., 1978; Grose y Flanigen, 1977)

2.2.2 SÍLICE AMORFA

La sílice amorfa puede dividirse en 3 grandes grupos: **(1)** Sílice vítrea, preparada por fusión de cuarzo; **(2)** Sílice M, una sílice amorfa formada cuando cualquiera de las dos sílices, amorfa o cristalina, son irradiadas con neutrones de alta velocidad. La densidad de la sílice amorfa incrementa y la de la cristalina decrece. Es térmicamente inestable y se transforma a cuarzo a 930 °C en 16 horas. En realidad, las diferentes formas cristalinas de la sílice m pueden diferir ligeramente unas de otras. La densidad es de 2.26 en comparación con 2.20 para sílices vítreas o microamorfas; **(3)** Sílice microamorfa, la cual incluye los soles, geles, polvos, y vidrios porosos que generalmente consisten de partículas fundamentales menores a una micra de tamaño o tienen una área superficial especifica mayor a aproximadamente 3 m²/g (Iler, 1979); para este estudio en especifico, la sílice de interés es aquella formada bajo condiciones geotérmicas.

Frondel (1962) afirmó que la sílice amorfa no es realmente amorfa pero consiste de regiones de orden atómico local, o cristales de tamaño extremadamente pequeño, que por un estudio cuidadoso de rayos-X parecen tener la estructura de la cristobalita. No obstante, por una difracción ordinaria este material ofrece solo una banda ancha, sin múltiples picos como se obtiene ordinariamente con los cristales macroscópicos, y es referida aquí como amorfa.

En la naturaleza, las sílices microamorfas han sido también condensadas de la fase vapor expulsada por las erupciones volcánicas o depositadas de soluciones supersaturadas en aguas

naturales y en relación con organismos. Excepto por la sílice depositada en plantas y diatomeas, sílices microamorfas naturales y generalmente muy impuras para permitir un estudio de solubilidad.

Las sílices microamorfas hechas en el laboratorio pueden clasificarse en 3 clases:

1.-Hojas microscópicas, cintas, y formas como fibra obtenidas por procesos especiales (Jacobson, 1936; Weiss and Weiss, 1954; Alexander and Iler, 1957; Haller, 1961;).

2.-Formas comunes de sílice amorfa conformadas por partículas fundamentales esféricas de SiO_2 menores a 1000 Å de diámetro, la superficie que consiste de sílice anhidra o grupos SiOH.

Estas partículas pueden estar separadas o unidas en redes tridimensionales como se muestra en la figura siguiente (*ver Figura 2.1*):



Figura 2.1-Partículas elementales en formas comunes de sílice coloidal. La agregación es de hecho en 3 dimensiones pero aquí está representada solo en 2. A, Sol; B, Gel; C, Polvo (Agregado) [Figura modificada de (Iler, 1979)].

a) Partículas discretas o separadas como en un sol.

b) Agregados con coherencia tridimensional con unión de siloxano en los puntos de contacto como en un gel.

c) Redes tridimensionales voluminosas abiertas de agregados de partículas como en un aerogel, sílices pirogénicas y ciertos polvos de sílice dispersables (Carr y Fyfe, 1958; Ordway, 1964; Walton, 1967).

3.-Silice amorfa hidratada, aquí designada como una clase separada en la cual la mayoría, sino todos, de los átomos de silicio cada uno conserva uno o más grupos hidroxilo en la estructura de sílice. Este tipo de estructura polimérica es obtenida si el acido monosilícico o el acido oligosilicico en agua está concentrado y polimeriza a temperaturas bajas u ordinarias y en solución ligeramente acida. Se cree que bajo estas condiciones la sílice polimeriza a unidades esféricas extremadamente pequeñas menores a 20-30 Å de diámetro, que, cuando se concentran, se unen unas con otras en una masa de gel tridimensional, atrapando agua en los intersticios, que es de dimensiones moleculares y retiene agua la cual puede ser desorbida solo por encima de

aproximadamente 60 °C (Thiessen and Koerner, 1930, 1931; Greenberg, 1957; Boer, 1958; Huang and Vogler, 1972;).

2.3 PROPIEDADES

La sílice consta como todo material de diversas propiedades que le asignan características particulares, a continuación se enmarcan solo las que consideramos las más relevantes.

2.3.1 SOLUBILIDAD

Antes de la publicación de la investigación realizada por Van Lier (1965, 1960) en 1960, existía la especulación de que el cuarzo no podría exhibir un equilibrio de solubilidad verdadero en agua a temperaturas ordinarias, aunque Gardner (1938) ya había reportado en 1938 una solubilidad de 6 ppm para este caso.

Los datos de solubilidad eran muy confusos hasta que fueron encontrados que las trazas de ciertas impurezas metálicas y especialmente la presencia de una capa de sílice amorfa o al menos una capa perturbada en la superficie del cristal causaba resultados variables, especialmente a temperaturas por debajo de los 150 °C.

Van Lier (1965) estudió la disolución de cuarzo molido con un tamaño de partículas de 3-15 micras. El encontró que el cuarzo limpio tiene una solubilidad bien definida en agua a presión autógena, lo cual puede ser expresado por la ecuación siguiente:

$$\log c = 0.151 - 1162 T^{-1} \tag{2.4}$$

Donde c es la concentración molar de Si(OH)₄, y T es la temperatura absoluta.

La solubilidad expresada en partes por millón, calculada de la ecuación anterior, se muestra como la línea A en la *Figura 2.2*; a 25 °C es 11 ppm. De estos datos, el calor normal de disolución es +5.32 kcal/mol, la entalpia libre de disolución es +5.11 kcal/mol, y el cambio de entropía es cero de acuerdo a Van Lier.

Morey, Fournier, and Rowe (1964) obtuvieron valores algo inferiores a los de Van Lier. Ellos encontraron en un caso que si el polvo de cuarzo era vertido en agua a 25 °C, la concentración de sílice se incrementaba a 80 ppm después de un año, y asi permanecía altamente supersaturada y luego caía a 6 ppm, la solubilidad verdadera. No se sabe porque la superficie de cuarzo ya existente no podía aceptar la sílice, pero un nuevo núcleo tenía que ser creado para alcanzar el equilibrio.


Figura 2.2-Solubilidad en ppm de diversas formas de sílice en soluciones de agua y sal de 0-500 °C a presión autógena a menos que se indique lo contrario. Cuarzo: A, Ecuación de Van Lier (línea discontinua); B, Morey; C, Morey, Fournier, y Rowe. Cristobalita: G, Fournier y Rowe. Amorfa: H, Stöber; I, Elmer y Nordberg; J, Lagerström, en 0.5 M NaClO₄; K, Willey; L, Jones and Pytkowicz; M, Goto; N, Okkerse; O, Jørgensen, en 1.0 M NaClO₄ [Figura tomada de (Iler, 1979)].

Siever (1962) también investigo la solubilidad del cuarzo con resultados semejantes a los de Van Lier.

Es imposible revisar todas las investigaciones en este campo tan especializado que es la solubilidad del cuarzo bajo condiciones hidrotermales, pero algunas de las investigaciones son las siguientes.

Kennedy y sus asociados desarrollaron datos a través de los cuales los trabajos subsecuentes fueron comparados (Kennedy, 1950, 1951; Kennedy et al., 1960).

En 1954, se realizaron estudios extensivos por Wyart y Sabatier (1954), quienes midieron la solubilidad del cuarzo, tridimita, cristobalita, y sílice vítrea, todos en agua y fase vapor hasta 480 bar y 470 °C.

El incremento de la solubilidad del cuarzo con la presión había sido examinado anteriormente hasta 600 °C por Morey (1953), y más recientemente por Heitmann (1964); Anderson y Burnham (1967) examinaron la solubilidad en soluciones de agua y sal y álcali hasta 900 °C y kbar. La solubilidad fue solo ligeramente reducida por la presencia de sal, pero se incremento en proporción directa a la base agregada.

La solubilidad del cuarzo bajo condiciones hidrotermales está descrita en 3 artículos publicados por Kitahara (1960) con especial atención a las condiciones supercriticas hasta 500 °C y 900 bar. El calor de disolución de cuarzo calculado de los datos de solubilidad fue 7.8 kcal/mol.

En 1965, Heitmann (1964) analizo la solubilidad de la sílice en agua y corriente y armo una base de datos basada en más de 1000 experimentos hasta 650 °C y 300 kg/cm², en base a estos construyo un diagrama de solubilidad completo.

La verificación de los trabajos anteriores nos expone que la solubilidad de la sílice muestra un incremento directo en relación al incremento de la densidad del vapor o agua, y alcanza un máximo cerca del punto crítico del agua.

Las propiedades termodinámicas y la solubilidad del cuarzo hasta 600 °C y 5 kbar de presión fueron resumidas por Hegelson (Walther and Hegelson, 1977).

Hay ciertas preguntas acerca de si puede establecerse un equilibrio verdadero para cristobalita y tridimita. No parece haber ninguna instancia donde estos cristales hayan estado creciendo bajo condiciones hidrotermales en preferencia al cuarzo. Fournier y Rowe (1962) creían que la precipitación de sílice cristalina bajo condiciones hidrotermales generalmente resultaría en cuarzo.

Por esta razón, en su estudio de la solubilidad de la cristobalita, ellos dejan agua en contracto con el sólido por un largo tiempo sin cambios de temperatura, a fin de no saturar la solución más de lo necesario, y entonces repentinamente enfriaron el sistema y midieron la concentración de sílice monomérica, la cual era el único tipo de sílice en el agua. En la *Figura 2.2*, la línea G muestra los resultados de solubilidad obtenidos por Fournier y Rowe (1962).

La solubilidad de diversas formas cristalinas en el sentido de un equilibrio dinámico entre la sílice en solución y en la fase solida aparentemente existe solo con el cuarzo cristalino, y la sílice vítrea o amorfa (Iler, 1979).

La disolución de otras fases cristalinas, cristobalita, coesita, tridimita, y stishovita, con incrementos de concentración de Si(OH)₄ está acompañada por la absorción de Si(OH)₄ en la superficie del cristal, lo que inhibe la disolución adicional. Asi la concentración final de la sílice soluble depende de las tasas relativas de disolución y absorción, y puede llegar a limitar la solubilidad de la sílice amorfa.

Una muestra dada de sílice amorfa exhibe un equilibrio de solubilidad reproducible en agua. Sin embargo, los valores de solubilidad reportados para las sílices amorfas van desde 70 hasta 150 ppm a 25 °C. Tales variaciones se deben aparentemente a la diferencias en los tamaños de las partículas, el estado de hidratación interna, y la presencia de trazas de impurezas en la sílice o absorbidas en su superficie durante las mediciones (Iler, 1979).

En diferentes trabajos de diferentes autores se hace hincapié en la importancia del pH de las soluciones en la solubilidad de la sílice. Algunos de los trabajos más relevantes se mencionan a continuación.

Stöber (1967) encontró que la solubilidad de la sílice amorfa a un pH de 8.4 en una solución Ringer (0.9% NaCl, 0.1% NaHCO₃) a 25 °C era de aproximadamente 100 ppm.

Elmer y Nordberg (1958) estudiaron la solubilidad de la sílice vítrea altamente porosa en acido nítrico y encontraron que para pH de 3 era de 160 ppm a 36 °C, de 260 ppm a 65 °C, y 400 ppm a 95 °C.

En 1955 Baumann (1955) concluyo que la sílice amorfa tiene una solubilidad uniforme en la región de pH neutro, que las especies disueltas son en su mayoría enteramente monoméricas, y que a pH entre 3-6 la tasa de disolución se incrementa linealmente con el incremento del pH. En el mismo año Krauskopf (1956) presento un excelente sumario de los estudios previos de la disolución y precipitación de la sílice a temperaturas moderadas, y enfatizo el reconocimiento de las diferencias entre la sílice, soluble, iónica, y coloidal, relacionando estas al comportamiento de solubilidad de la sílice en aguas naturales.

El equilibrio de solubilidad es establecido solo muy lentamente, a menos de que la sílice sea muy finamente dividida o microporosa como para proporcionar un área de cientos o miles de metros cuadrados de superficie por litro de agua.

Stöber (1967) demostró que el Si(OH)₄ es absorbido en la superficie de la sílice amorfa, retardando su disolución, tal como ha sido descrito para el caso del cuarzo.

De acuerdo con Baumann (1955) a 25 °C, con un pH debajo de 7, la concentración de la sílice soluble se incrementa lentamente; mientras que para un pH por arriba de 7, la concentración de sílice se incrementa rápidamente para formar una solución súper saturada, por ejemplo a pH 9 es de 155 ppm. Luego la concentración cae en un periodo de 3-4 días a la solubilidad característica de 125 ppm.

Alexander, Heston, e Iler (1954) reportaron solubilidades de la sílice microamorfa a pH 7-8 de alrededor de 100 y 130 ppm respectivamente, para gel de sílice de 200 ppm a 25 °C; en sus experimentos se comprobó por métodos físicos y químicos que la sílice disuelta era monomérica.

Baumann (1955) realizo una recolección de datos y los comparo con los de Alexander et al., y confirmo que la solubilidad de la sílice alcanza un mínimo a pH 7-8, y que existe una solubilidad ligeramente mayor a pH menores pero desconocía la razón de este fenómeno.

Cherkinskii y Knyaz'kova (1971) propusieron que la sílice es anfótera y catiónica debajo de pH 7. Formularon ecuaciones asumiendo que toda la sílice soluble es en realidad polimérica y catiónica a pH bajo. Elmer y Nordberg (1958) aportaron datos de solubilidad en acido nítrico hasta 9 N:

| $\log C = -0.168N - 0.332$ | a 95 °C | (2.5a) |
|----------------------------|---------|--------|
|----------------------------|---------|--------|

| $\log C = -0.167N - 0.584$ | a 65 °C | (2.5b) |
|----------------------------|---------|---------|
| 0 | | · · · · |

$$\log C = -0.184N - 0.796 \quad a \ 36 \ ^{\circ}\text{C} \tag{2.5c}$$

Donde:

C = concentración de SiO₂ (mg/ml) N= normalidad del acido nítrico

Por ejemplo en 7N de acido nítrico a 95 °C la solubilidad fue de solo 30 ppm contra 400 ppm en agua, y a 36 °C fue 8 contra 160 ppm.

Un cuidadoso estudio realizado por Jørgensen (1968) mostro que existen todavía misterios por ser explicados en relación a la solubilidad de la sílice amorfa. El sugirió que en presencia de sal una uniforme, reproducible, y ordenada capa de hidrato de sílica se forma sobre la superficie solida, y esta es menos soluble que otras formas de sílice microamorfa. Sin embargo, la baja solubilidad puede ser explicada también por el mayor radio de curvatura de la superficie de la última sílice amorfa formada.

El efecto de los electrolitos en la solubilidad de la sílice amorfa (750 m²/g a pH 7-11) fue examinado por Greenberg y Price (1957). Hasta una concentración de 0.1N el NaCl o Na₂SO₄ no tienen ningún efecto en la solubilidad o en la constante de ionización del acido silícico a un pH de 10. Incluso el uso de soluciones de Ca(OH)₂ hasta 0.4N no produce ningún cambio en la solubilidad en pH de 8 a10.

La solubilidad de la sílice amorfa a 40 °C en varias soluciones fuertes de Na₂CO₃, K₃CO₃, NaOH, y KOH que van desde 0.1 a 2.0 N fue publicada por Dmitrevskii et al. (1971). Azaroual, Fouillac y Matray (1997) estudiaron la solubilidad de la sílice en soluciones electrolíticas por medio de la obtención de los valores de los coeficientes de actividad en un rango de temperaturas de 25 a 250 °C.

Willey (1974) midió el efecto de la presión en la solubilidad de la sílice amorfa a 0 $^{\circ}$ C en agua de mar. La solubilidad se incrementaba de 65 a 71 ppm cuando la presión se incrementaba de 1 a 150 atm y entonces linealmente de 94 ppm a 1200 atm.

La presión también tiene un marcado efecto en la tasa de la cristalización (Oehler, 1976). Debido al rápido decremento en la solubilidad bajo enfriamiento, el muestreo ha sido un problema. Fournier y Rowe (1977) idearon mejores medios de enfriamiento y dilución de muestras que habían sido equilibradas con sílice a altas temperaturas y presión en el autoclave. Sus datos son expresados por la ecuación:

$$\log C = \frac{-731}{T} + 4.52 \tag{2.6}$$

Donde C = mg SiO₂/kg (o ppm) y T es la temperatura absoluta. De acuerdo a esta ecuación, la solubilidad se incrementa en proporción directa a la temperatura, y las solubilidades a la presión de vapor de la solución son (*ver Tabla-2.3*):

Tabla-2.3 Solubilidad de sílice a 2 diferentes temperaturas según Fournier y Rowe [Tabla tomada de (ller, 1979)].

| Temperatura (°C) | Solubilidad (mg/kg) |
|------------------|---------------------|
| 25 | 117 |
| 100 | 321 |

La solubilidad bajo una presión constante de 1039 bar es:

$$\log C = \frac{-810}{T} + 4.82 \tag{2.7}$$

El calor diferencial de solución, $\Delta \overline{H}$, es 3.71±0.05 kcal/mol y la entropía diferencial, $\Delta \overline{S}$, es 13.9±0.05 kcal/mol.

Entre los pH de 9 a 10.7, existe un aparente incremento de la solubilidad de la sílice amorfa debido a la formación del ion silicato además del monómero que está en equilibrio con la fase solida. Ya que el ión silicato se convierte instantáneamente a monómero en solución ácida, tanto el monómero y el ion silicato se incluyen en la determinación como sílice soluble.

La sílice amorfa esta en equilibrio de solubilidad con el monómero neutral asi como con los iones silicato:

$$(SiO_2)_x + 2H_2O = Si(OH)_4 + (SiO_2)_{x-1}$$
(2.8a)

$$Si(OH)_4 + OH^- = Si(OH)_5^- (OHSiO_3^-)$$
 (2.8b)

Por encima del pH 7, toda la fase solida de la sílice amorfa se disuelve para formar silicato soluble.

Las mediciones de solubilidad realizadas por Alexander, Heston, e Iler (1954) de una muy pura sílice amorfa (Linde sílice) en agua a diferentes valores de pH (ajustados con HCl o NaOH) mostraron las siguientes variaciones (*ver Tabla-2.4*):

| pН | Solubilidad de la Silice Amorfa (25 °C) |
|-------|--|
| 6 - 8 | 120 |
| 9 | 138 |
| 9.5 | 180 |
| 10 | 310 |
| 10.6 | 876 |

Tabla-2.4 Solubilidad de la sílice amorfa a 25 °C a diferentes pH [Tabla tomada de (Iler, 1979)].

El incremento de la sílice total soluble puede ser explicado en base al siguiente equilibrio, asumiendo que la concentración del $Si(OH)_4$ en solución no cambia con el pH:

$$Si(OH)_4 + OH^- = H_3 SiO_4^- + H_2 O$$
 (2.9a)

$$[H_3 SiO_4] = 1.85 \times 10^4 [Si(OH)_4] [OH^-]$$
(2.9b)

La constante de equilibrio calculada de estos datos de solubilidad concuerda razonablemente bien con los encontrados por Roller y Ervin (1940) en un estudio de asociación de los iones silicato en un sistema CaO-SiO₂-H₂O. Estos autores encontraron a 30 °C un valor de 1.5 X10⁴. Asi está claro que la solubilidad de la sílice se incrementa a mayor pH debido a la formación del ion silicato además del Si(OH)₄ en solución.

El efecto del pH en la solubilidad de la sílice a temperaturas de 0 a 200 °C fue medido por Goto (1955) y se muestra en la *Figura 2.3*.



Figura 2.3-Solubilidad de la sílice amorfa en ppm contra pH a diferentes temperaturas [Figura tomada de (Goto, 1955)].

El comportamiento de los ácidos polisilícicos, sílices coloidales y geles de sílice no pueden ser entendidos sin tomar en cuenta el hecho de que la solubilidad es mayor cuando la superficie de la sílice es convexa y menor cuando es cóncava. Se trata de una cuestión del radio de curvatura de la superficie; la menor el radio la mayor el efecto en la solubilidad (Hulett, 1926).

Tal como se muestra en la *Figura 2.4* las partículas más pequeñas con un radio positivo menor tienen una mayor solubilidad. Por otra parte, en una hendedura, como la que se forma cuando dos partículas están en contacto, el radio de curvatura es negativo y la solubilidad es menor.



Figura 2.4-Variación en la solubilidad de la sílice con respecto al radio de curvatura de la superficie. Los radios positivos de curvatura se muestran en corte transversal como partículas y proyecciones de una superficie de sílice. Los radios negativos se muestran como depresiones o agujeros en la superficie de la sílice, y en la grieta entre dos partículas [Figura modificada de (Iler, 1979)].

Existen dos consecuencias prácticas importantes:

1.-Cuando muy pequeñas partículas individuales de sílice son llevadas dentro de la misma solución que otras más grandes, especialmente a pH 9-10 donde los iones hidroxilo catalizan la solución y la deposición de sílice, las más pequeñas se disuelven y las más grandes crecen.

2.-Si se ha producido una agregación o floculación o partículas coloidales de sílice, de modo que 2 o más partículas son transportadas juntas, entonces en el punto de contacto el radio de curvatura es negativo y extremadamente pequeño, la solubilidad de la sílice en esta región es muy baja, y la sílice es disuelta de las superficies de las partículas y depositada alrededor del punto de contacto para minimizar el radio de curvatura negativo, formando asi una unión o cuello entre partículas.

La unión entre partículas de sílice adyacentes en una estructura de gel agregado por este proceso espontaneo o por la adición de sílice soluble para ser depositada en los puntos de contacto entre partículas es descrita por Alexander, Broge e Iler (1956).

Kitahara (1960) mostro que el efecto del pH, sal y temperatura tienen el mismo efecto en las tasas de polimerización del acido monosilícico y la tasa de disolución y deposición de la sílice monomérica.

Greenberg (1957) concluyo que en teoría la solubilidad es función del tamaño de la partícula. Alexander (1957) fue el primero en obtener datos que mostraban que la solubilidad se incrementaba con el decremento el tamaño de las partículas.

La sílice monomérica disuelta polimeriza rápidamente a acido polisilícico, pero este desaparece después tan pronto como la supersaturación se pierde por la deposición de sílice en las partículas amorfas más grandes en suspensión.

Un problema en el cálculo de la solubilidad de partículas pequeñas es que la energía superficial no es conocida con precisión.

Para propósitos de cálculos, Iler (1973) utilizo tanto 80 erg/cm², basado en algunos datos experimentales preliminares, y 133 erg/cm², basado en la tensión superficial del vidrio extrapolado a un contenido de cero álcali, 275 erg/cm², menos la energía de humectación de la superficie del siloxano por el agua, 142 erg/cm² (Shartsis and Skinner, 1951).

Hay muy pocas sustancias de las que la solubilidad de partículas de tamaño uniforme y menor a 100 Å haya sido medida.

Algunos otros experimentos preliminares de ller han dado los resultados que se muestran en la *Figura 2.5* y *Figura 2.6*



Figura 2.5-Relación entre solubilidad de la sílice amorfa en ppm a 25 °C en agua y tamaño de partícula en nm a pH=8: A, partículas hechas entre 80-100 °C; B, partículas hechas entre 25-50 °C [Figura tomada de (Iler, 1979)].



Figura 2.6-Relación entre el log de la solubilidad de la sílice amorfa en ppm a 25 °C en agua y el reciproco del tamaño de partícula a pH=8: A, partículas hechas de 80-100 °C; B, partículas hechas de 25-50 °C [Figura tomada de (Iler, 1979)].

La ecuación de Ostwald-Freundlich, aplicada a solubilidad (conocida como el efecto de Thompson-Gibbs) fue usada por Iler (1979) para calcular la energía interfacial de las pendientes de las líneas A y B, y es la siguiente:

$$\frac{S_r}{S_i} = e^{\left(\frac{2 E V}{R T r}\right)}$$
(2.10a)

Donde:

Si = solubilidad de una superficie plana o una partícula de radio infinito (nm)

E = energía superficial interfacial (erg/cm²) = $104.6(10^7)(r)\log S_r/S_i$) a 25 °C

V = volumen molar =
$$27.2 \text{ cm}^3$$
 para sílice amorfa

R = constante de los gases = 8.3 erg/mol
$$\cdot^{\circ}$$
abs

- T = temperatura en grados absolutos
- r = radio de curvatura (cm)
- d = diámetro de la partícula (nm)

Así

$$log_{10} \frac{S_r}{S_i} = 2.85 \times 10^{-7} \frac{E}{T r} = 5.7 \frac{E}{T d}$$
 (2.10b)

Los valores de E, la energía interfacial calculada de las pendientes de las líneas A y B, usando la ecuación

$$E = 0.1754 T d \log \frac{S_r}{S_i}$$
 (2.10c)

Son 54 y 46 erg/cm^2 .

Un valor confiable para la energía interfacial sigue siendo determinado tanto para cuarzo como para sílice amorfa.

Ciertas impurezas como el aluminio en pequeñas cantidades no solo reducen la tasa de disolución de la sílice, sino que por quimisorción en la superficie de sílice, aun en cantidades menores a una capa monomolecular, reduce la solubilidad de la sílice en equilibrio.

La cantidad de aluminio requerida en la superficie de sílice para reducir la solubilidad de la sílice ha sido medida por Iler (1973).

El efecto de concentraciones extremadamente bajas del ion aluminio en la solubilidad del cuarzo fue reportado por Baumann (1955).

Un estudio realizado por Nishida et al. (2009) sugiere que la presencia de aluminio en soluciones de sílice juega un rol importante en la formación de incrustaciones de sílice en tuberías y equipos.

Los efectos de impurezas como el Al⁺³, Ca⁺², Mg⁺², SO₄⁻², y F⁻ en la solubilidad de la gel de sílice en agua y en soluciones 0.1-2.0 N de Na₂CO₃, K₂CO₃, NaOH, y KOH también han sido estudiados. Los iones F⁻ y SO₄⁻² no tienen efecto en la solubilidad, pero los cationes polivalentes disminuyen la solubilidad o llevan a la formación de silicatos insolubles (Dmitrevskii, 1971).

El ion Magnesio insolubiliza la sílice amorfa solo en la medida en que la sílice se convierte a silicato de magnesio. En el caso del cuarzo el ion Magnesio se combina con la sílice amorfa asociada con la superficie, y asi disminuye la solubilidad al menos a la del cuarzo puro (Hast, 1956).

El ion Calcio no tiene efecto sobre la solubilidad de la sílice hasta un pH de aproximadamente 9.5, donde el silicato de calcio comienza a formarse (Greenberg and Chang, 1965).

El efecto del acido fosfórico (H_3PO_4) en la sílice también ha sido estudiado y se encontró que forma fosfato de silicio, y aun en pequeñas cantidades, el H_3PO_4 reduce considerablemente la tasa de disolución de la sílice en agua (Mitsyuk, 1972). Por otro lado la adición de H_2SO_4 acelera la disolución, es decir aumenta la solubilidad de la sílice.

El NaOH, el LiOH, y el KOH en soluciones 1N disuelven la sílice microamorfa, pero en soluciones 2.2 N el LiOH no reacciona; la adición de LiOH a soluciones fuertes de otros álcalis retarda la tasa de disolución de la sílice, aparentemente por la formación de una película insoluble de silicato de litio en la superficie de la sílice.

El ion flúor afecta la solubilidad pero solo a pH bajos, y su efecto se prolonga hasta convertir la sílice al ion SiF_6^- .

2.3.2 ENTROPÍA

La entropía de la sílice ha sido medida por varias personas a lo largo del tiempo, a continuación se dan algunos valores encontrados por estos. (*ver Tabla-2.5*)

Tabla-2.5 Entropía de la sílice amorfa según varios autores [Tabla tomada de (Iler, 1979)].

| Autor | ∆S (cal/mol·grado) |
|--|--------------------|
| Greenberg (1957) | -2.82 ± 0.50 |
| Walter and Helgeson (1977) sílice acuosa | 14.34 |

La diferencia en los valores anteriores radica en que, el primer dato corresponde a la entropía de la sílice en estado amorfo calculada a una temperatura de 200 K y el segundo a la sílice en estado acuoso calculado a una temperatura de 600 °C.

2.3.3 ENTALPÍA

La entalpía de la sílice ha sido medida por varias personas a lo largo del tiempo, a continuación se dan algunos valores encontrados por estos. (*ver Tabla-2.6 y Tabla 2.7*)

Para la ecuación:

$$Si_{(c)} + O_{2(g)} = SiO_{2(s)}$$
 (2.11)

Tabla-2.6 Entalpía de formación de la sílice amorfa según varios autores [Tabla tomada de (Iler, 1979)].

| Autor | ∆H (Kcal/mol) |
|----------------------------|---------------|
| Wise et al. (1962) | -215.9 ± 0.3 |
| Good (1962) | -215.9 ± 0.3 |
| Greenberg and Price (1957) | -205.57 |

Para el equilibrio global:

$$SiO_{2(s)} + mH_2O_{(l)} = H_4SiO_{4(aq)}$$
 (2.12)

Tabla-2.7 Entalpía del equilibrio de la sílice según varios autores [Tabla tomada de (Iler, 1979)].

| Autor | ∆H (Kcal/mol) |
|---|---------------|
| Greenberg (1957) | 2.65 ± 0.28 |
| Greenberg (1957) sílice sólida | -4.69 |
| Wise et al. (1963) sílice sólida | -1.78 |
| Cochran and Foster (1962) sílice sólida | 0.54 ± 0.2 |
| Morey, Fournier and Rowe (1964) | 3.35 |
| Kitahara (1960) | 3.2 |
| Walther and Helgeson (1977) sílice acuosa | -0.214568 |

2.3.4 DENSIDAD

La densidad de las diversas fases de la sílice ha sido estudiada por muchas personas a lo largo del tiempo, a continuación en la *Figura 2.7* se ilustra la relación entre la densidad y el índice refractivo de cada una de las especies (Skinner and Appleman, 1963).



Figura 2.7-Densidad (g/cm³) contra índice refractivo promedio de varias formas de sílice (Skinner and Appleman, 1963) [Figura modificada de (Iler, 1979)].

2.4 MECANISMO DE DISOLUCIÓN DE SÍLICE

La tasa de disolución de sílice en agua está influenciada por diversos factores, pero sin tomar en cuenta el tipo de sílice involucrada, el proceso de disolución requiere de la presencia de un "catalizador".

La disolución de sílice en agua es, en efecto, una despolimerización a través de hidrólisis, y la solubilidad es la concentración de Si(OH)₄ alcanzada como un estado estacionario en el equilibrio de despolimerización-polimerización.

El catalizador es un material que puede ser quimisorbido e incrementar el número de coordinación de un átomo de silicio en la superficie para más de cuatro, debilitando asi el enlace de los oxígenos con los átomos de silicio adyacentes.

El ion hidróxido es el único catalizador en soluciones alcalinas y el acido fluorhídrico en soluciones acidas. La estructura de la sílice amorfa es un arreglo aun más abierto que la cristobalita, lo cual está estrechamente relacionado. En la superficie existen espacios entre los iones oxigeno lo suficientemente grandes para alojar a los iones hidroxilo. Tal superficie entonces soporta una carga iónica y la sílice es constantemente intercambiada en un equilibrio entre la solución y la superficie como se indica.

El primer paso es la absorción del ion OH⁻, después de lo cual un átomo de silicio se disuelve como ion silicato. Si el pH está muy por debajo de 11, el ion silicato se hidroliza a sílice soluble, Si(OH)₄, y los iones OH⁻ y el proceso es repetido (*ver Figura 2.8*).



Figura 2.8-Mecanismo propuesto de disolución de sílice en agua en presencia de iones hidroxilo. La línea punteada representa la interfase entre la sílice a la izquierda y el agua a la derecha [Figura tomada de (Iler, 1979)].

El acido fluorhídrico sin duda actúa de la misma manera, siendo el primer paso la quimisorción de un ion F⁻, el cual tiene un tamaño similar al del ion OH⁻.

Sin embargo, los efectos catalíticos de los iones F⁻ y OH⁻ no son idénticos, como es obvio a partir del hecho de que la sílice se disuelve en solución de NaOH pero no de NaF.

El primer paso en la acción del HF en cualquier tipo de sílice es convertir los grupos superficiales SiOH en grupos SiF. Estas dos superficies son físicamente muy diferentes. La superficie del SiOH es completamente hidrofílica, mientras que la superficie del SiF es hidrofóbica, ya que no hay átomos de hidrogeno para enlazarse con el agua.

Las ecuaciones para la cinética y el equilibrio de polimerización-despolimerización han sido formuladas por Stöber (1967), Fournier y Rowe (1977), Rimstid y Barnes (1980), Marshall y Warakomski (1980), Rimstidt (1997), Gunnarsson y Arnórsson (1999), y Icenhower y Dove (2000), para explicar el comportamiento de solubilidad.

Rimstidt y Barnes (1980) reportaron la siguiente ecuación diferencial de la concentración de la sílice amorfa con respecto al tiempo:

$$\left(\partial a_{H_4SiO_4}/\partial t\right)_{P,T,M} = \left(\frac{A}{M}\right) \left(\gamma_{H_4SiO_4}\right) \left(k_+ a_{SiO_2} a_{H_2O}^2 - k_- a_{H_4SiO_4}\right)$$
(2.13a)

Donde:

$$\log k_{-} = -0.707 - \frac{2598}{T} ; (T = K)$$
 (2.13b)

$$\log k_{+} = -0.369 - 7.890 \times 10^{-4} T - \frac{3438}{T} ; (T = K)$$
 (2.13c)

 $\begin{array}{l} A = \operatorname{Relación} \, \operatorname{del} \, \operatorname{área} \, \operatorname{interfacial} = \mathrm{A}/\mathrm{A}^\circ \ ; \ \mathrm{A}^\circ = \mathrm{1m}^2 \\ M = \operatorname{Relación} \, \operatorname{del} \, \operatorname{amasa} \, \operatorname{de} \, \operatorname{agua} \, \operatorname{en} \, \operatorname{el} \, \operatorname{sistema} = \mathrm{M}/\mathrm{M}^\circ \ ; \ \mathrm{M}^\circ = \mathrm{1kg} \\ a_i = \operatorname{Actividad} \, \operatorname{del} \, \operatorname{aspecie} \, i \\ \gamma_i = \operatorname{Coeficiente} \, \operatorname{de} \, \operatorname{actividad} \, \operatorname{del} \, \operatorname{aspecie} \, i \\ \end{array}$

Las velocidades relativas de disolución de diferentes formas de sílice a un pH de 8.5 son reportadas por Stöber (1967) en la siguiente tabla (*ver Tabla-2.8*). Asi mismo se muestran los resultados obtenidos por diversos autores para este mismo fenómeno (*ver Tabla-2.9*).

| · - | |
|-------------------------|--|
| Tipo de Sílice | Tasa de Disolución (10 ⁻⁶ g ml ⁻¹ dia ⁻¹) |
| Vidrio fundido (vitrea) | 39.0 |
| Cuarzo | 2.8 |
| Cristobalita | 6.0 |
| Tridimita | 4.5 |
| Coesita | 0.7 |
| Stishovita | 11.0 |
| | |

Tabla-2.8 Tasas relativas de disolución de diferentes formas de sílice a un pH de 8.5 [Tabla tomada de (Iler, 1979)].

Tabla-2.9 Tasa relativas de disolución de sílice propuestas por varios autores [Tabla tomada de (Iler, 1979)].

| Tipo de Silice | Solvente | Temperatura | Tasa (aproximada) (mg m ⁻² hr ⁻¹) | Referencia |
|----------------|---|-------------|--|---|
| Cuarzo | Agua | 25 | 4 x 10 ⁻⁶ | Van Lier (1960) |
| | | 90 | 0.001 | |
| | 0.2 M Catecol (pH 9.6) | 25 | 0.029 | |
| | Solucion Ringer (0.9% NaCl, 0.1% NaHCO₃) | 25 | 0.006 | Stöber (1966) |
| | NaOH (0.05-0.4 N) | 25 | 0.13a | Bergman (1961) |
| | | 37 | 0.5a | Bergman (1961) |
| | 0.1 N NaOH | 25 | 0.015b | Baumann, Klosterkotter, and Robok (1967) |
| | 0.10 M HF | 25 | 2.8-3.0 | Bergman (1963) |
| | 1.00 M HF | 25 | 110 | Bergman (1962) |
| | Catecol saturado en NH ₄ OH concentrado | 90 | 550 | ller (19??) |
| | 0.8 M Catecol (pH 8.5) | 25 | 0.008 | Baumann, Klosterkotter, and Robok (1967) |
| Vitrea | Solucion Ringer | 25 | 0.08 | Stöber (1966) |
| | NaOH (0.05-0.4 N) | 25 | 0.6a | Bergman (1961) |
| | 1-5% HF | 25 | 2-10 x 10 ⁵ | Strauss and Bauer (1972) |
| | 24-14% NH ₄ F | | | |
| | 1.13 M HF 0.34 M HNO₂ | 25 | 1600 | Pliskin and Lehman (1965) |
| | 1.0 M HE | 32 | 1800 | Blumberg and Stavrinou (1960) |
| | 0.1 M HF | 32 | 180 | Blumberg and Stavrinou (1960) |
| | 0.1 M HF | 25 | 136-150 | Bergman (1963,1962) |
| | 0.8 M Catecol (pH 8.5) | 25 | 0.083 | Baumann, Klosterkotter, and Robok (1967) |
| | Catecol saturado-NH4OH | 90 | 1100 | ller (19??) |
| Cristobalita | 0.1 M HF | 25 | 24 | Bergman (1963,1962) |
| Tridimita | 0.1 M HF | 25 | 28 | Bergman (1963,1962) |
| Coesita | 0.8 M Catecol (pH 8.5) | 25 | 0.0025 | Baumann, Klosterkotter, and Robok (1967) |

a-Tasa para la capa de superficial de solubilización rápida

b-Tasa despues de removida la capa superficial

2.5 MECANISMOS DE PRECIPITACIÓN

La remoción de sílice del agua es considerada aquí desde el punto de vista de la reducción del contenido de sílice sin tener en cuenta los métodos de eliminación. Esta puede ocurrir por precipitación o absorción.

Ya que la sílice existe en agua tanto en forma soluble como en forma coloidal, los mecanismos de remoción y deposición son bastante distintos y a menudo deben ser considerados por separado.

La remoción de sílice del agua está involucrada en diversos tipos de problemas prácticos. El más importante es la remoción de sílice del agua de alimentación para las calderas de alta presión de las centrales eléctricas de vapor, donde incluso las trazas de sílice pueden llevar a la formación de depósitos en los álabes de las turbinas y la formación de escamas en las superficies de los cambiadores de calor.

Otro es la remoción de sílice del agua de refrigeración donde la sílice se deposita en los equipos como la temperatura se reduce y ocurre la evaporación.

De creciente importancia es la sílice en el vapor y agua geotérmicos, donde los altos niveles de sílice llevan a serios problemas en el desarrollo de energía de estas fuentes.

Un problema artificial, pero grave económicamente dentro de la industria se debe al decreto de que los restos de sílice coloidal deben ser retirados de las corrientes de residuos industriales, a pesar de que el nivel está por debajo de algunas aguas neutrales que no se consideran perjudiciales (White et al., 1956).

Considerando el fenómeno de la precipitación de la sílice deben ser señalados que existen dos mecanismos completamente diferentes que pueden estar involucrados: (i) Nucleación; (ii) Coagulacion.

2.5.1 NUCLEACIÓN

La mayoría de las discusiones en torno a la precipitación se concentran en la cuestión de cómo son inicialmente formadas las partículas. Los mecanismos han sido considerados en detalle, por ejemplo, por Nielsen (1964) y Walton (1967) en sus tratados en precipitación.

La formación de partículas de sílice amorfa por polimerización del Si(OH)₄ involucra algunos aspectos de la teoría de la nucleación.

La formación de cuarzo debe definitivamente involucrar nucleación. Aunque el cuarzo no es una forma coloidal de sílice.

Es de particular importancia una buena una comprensión de la nucleación y crecimiento de los coloides de sílice tanto en química de materiales con enfoque en los procesos sol-gel y en la comprensión de los fluidos geotérmicos.

La química de los silicatos ha sido, por lo tanto, el foco de atención de varios experimentos y estudios teóricos. Sin embargo, a pesar de estos esfuerzos, el poder detallar los mecanismos de crecimiento de partículas de sílice permanece alejado.

Los enfoques experimentales implementados en el estudio de diversos sistemas de silicatos, en particular Raman (Lippert et al., 1988; Bradley et al., 1990; Gout et al., 2000; Depla et al., 2011) y NMR (Cary et al., 1982; Meinhold et al., 1985; Sjöberg et al., 1985; Knight et al., 2007; Depla et al., 2011;), han sido obstaculizados por la dificultad en la mera identificación, sin hablar del monitoreo, de los productos de oligomeros como silicatos que son propensos a adoptar una amplia gama de estructuras lineales, cíclicas y ramificadas.

Las posibles estructuras que puede adoptar, hasta tetrámeros, se muestran en la *Figura 2.9* (las cargas han sido ignoradas para claridad). La sensibilidad de la química a la temperatura, la fuerza iónica, y particularmente al pH solo complica más los intentos experimentales de una elucidación mecánica.

En este aspecto, los métodos teóricos han sido usados para deducir alguna información sobre los fundamentos del crecimiento de los silicatos. Un número de trabajos anteriores se ha enfocado principalmente en la termodinámica asociados con la formación de grupos de silicatos cada vez más grandes para tratar de describir la distribución de los productos cuando se alcanza el equilibrio.

Pereira et al. (1999a,b) estudio las geometrías y las energías de una gran variedad de grupos de sílice neutrales principalmente a través de DFT (Density Functional Theory) en dos artículos seminales. Entre sus conclusiones, encontró que los trímeros lineales son más estables que las estructuras cíclicas; los tetrámeros ramificados y lineales son igualmente favorecidos en relación a las estructuras más condensadas. Ninguna observación esta a línea con experimentos diseñados en soluciones básicas donde las estructuras de anillo tienden a dominar.

Para localizar los efectos ambos del pH y solvatación, Mora-Fonz (2005) diseñó cálculos similares en un numero de grupos neutrales y aniónicos al nivel de teoría BLYP/DNP (Becke-Lee-Yang-Par/Dynamic Nuclear Polarization), empleando el enfoque de solvatación continua COSMO (COnductor like Screening Model) para la corrección del solvente. Las energías libres derivadas indicaron que la formación de silicatos condensados debería en efecto ser más favorable que los cálculos de la fase gas que habían indicado anteriormente.

Gomes et al. (2008) también diseño una exploración a través de una variedad de grupos neutros y aniónicos a un nivel de teoría DFT/B3LYP/6-311+G (2d, 2p), esta vez usando las correcciones implícitas de solvatación IEF-PCM, (Integral Ecuation Formalism/Polarizable Continuum Method) y de manera similar concluyo que las estructuras condensadas debían formarse fácilmente, particularmente a pH 7.



Figura 2.9-Todos los grupos silicatos posible, hasta e incluyendo tetrámeros [Figura tomada de (McIntosh, 2013)].

Sin embargo, estudios enfocados solamente en la termodinámica dan una visión limitada de la evolución temporal de estos sistemas. Varios estudios de la mecánica ab initio han sido realizados para una exploración más directa del crecimiento.

Los primeros estudios tratan la etapa de dimerización como un sistema prototipo para obtener información sobre los mecanismos de reacción de la pre-nucleación. Cada estudio mostró que la formación de nuevos enlaces Si-O-Si en soluciones básicas sucede en su mayor parte por un proceso de dos pasos (Xiao and Lasaga, 1996).

Como se muestra en la *Figura 2.10*, la reacción procede a través de la adición de un oxigeno desprotonado al átomo de silicio de una fracción de silicato sin carga. Esto resulta en un átomo de silicio pentacoordinado el cual es más eficientemente estabilizado energéticamente por la eliminación de H₂O (en lugar de perder OH⁻) (Xiao and Lasaga, 1996; Trinh et al., 2006; Henschel et al., 2010; McIntosh, 2012).



Figura 2.10-Mecanismo de formación de enlaces Si-O-Si en solución básica; demostrado con la reacción de dimerización como un escenario prototipo [Figura tomada de (McIntosh, 2013)].

Algunos de los primeros estudios ab initio que exploran explícitamente las características mecánicas de la pre-nucleación del silicato mas allá de la dimerización fueron llevados a cabo por Trinh et al. (2006)

Estos autores diseñaron cálculos DFT/B3LYP/6-31+G (d, p) (el Density Functional Theory/Becke 3 parameter Lee, Yang, Parr method, es un método de cálculo de la geometría molecular por medio de la función de densidad electrónica) en la formación de un numero de especies que incluía tetrámeros.

Los efectos de solvatación fueron tratados con el modelo de disolvente continuo COSMO (el Conductor-like Screening MOdel, es un método que determina la interacción electrostática de una molécula con el solvente).

Los autores confirmaron que los mecanismos aniónicos son mucho más viables energéticamente que las reacciones entre dos silicatos neutros y demostraron que el mecanismo de dos fases representado en la *Figura 2.10* es general, y aplica para todas las reacciones (incluyendo la ciclación), hasta, al menos, la formación de tetrámeros.

Encontraron que todas las reacciones proceden de un par de hidrógenos enlazados encontrados. Sin embargo, los autores abogaron por un nuevo mecanismo donde, durante la formación del enlace Si-O en el dímero y el crecimiento del trímero, la reacción procede a través del ataque de una fracción hidroxilo de un grupo neutro sobre el átomo de silicio de la especie anionica, transfiriendo su protón al radical O⁻ en un proceso concertado.

El estudio consideró importante solo la adición de monómero a los oligomeros lineales. Adicionalmente, mientras que las reacciones biomoleculares del H_4SiO_4 y el $H_3SiO_4^-$ con oligomeros neutrales y aniónicos se consideraron un intercambio de protones, durante la optimización del grupo de mayor energía invariablemente se produjo la menor energía del par H unido encontrado. Consecuentemente, las reacciones de un oligomero (o su anión) dado con H_4SiO_4 o el $H_3SiO_4^-$ ultimadamente llevaron al mismo canal de reacción.

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS

Se encontró que la ciclación posee barreras ligeramente mayores que otros procesos, y tiende a ser endotérmica, lo que sugiere que las especies lineales y ramificadas deberían dominar. Se encontró que las barreras para la formación de pequeños oligomeros (con transferencia de protones) y los pasos de ciclación están en el intervalo de 56-59 kJ/mol; los oligomeros más grandes (crecimiento vía un mecanismo análogo al ilustrado en la *Figura 2.10*) tienen barreras de 30-31 kJ/mol. Se encontró que las barreras para la perdida de agua están entre 54-56 kJ/mol.

La calidad de la descripción de la solvatación empleada, sin embargo, probablemente tiene un impacto en las conclusiones obtenidas. Otras descripciones alternativas más allá de modelos simples continuos han sido satisfactoriamente aplicadas a una variedad de diferentes sistemas químicos en los que las condiciones implícitas de solvatación se aumentan con la inclusión de varias moléculas de solvente explicitas (Pliego and Riveros, 2001; Pliego and Riveros, 2002a,b; Felipe et al., 2003; Pliego, 2004; Kelly et al. 2006; Schaffer and Thompson, 2008; Terleczky and Nyulászi, 2009; Wander et al., 2010; Wang and Cao, 2010).

Esto supone que las interacciones de corto alcance se explican en gran parte por una capa de disolvente explícita, mientras que los modelos continuos capturan términos más importantes de largo alcance.

Se han observado mejoras significantes relacionadas a las predicciones de los modelos continuos en varios estudios (Pliego and Riveros, 2002; Pliego, 2004; Kelly et al. 2006). Este enfoque de solvatación hibrida, cuando se aplica a sistemas de silicato, también conduce a considerables diferencias para las energías de reacción en sistemas de silicato relacionados a aquellos tratados solo con modelos dieléctricos continuos (Felipe et al., 2003; Schaffer and Thompson, 2008; McIntosh, 2012).

Trinh et al. (2006) también reconoció que un numero de interacciones importantes del solvente podrían haber sido modeladas inadecuadamente asumiendo un modelo continuo de solvatación.

En estudios subsecuentes Car y Parrinello (1985), utilizando simulación de dinámica molecular (MD), encontraron que las moléculas explicitas del solvente afectan significantemente los resultados y las predicciones del modelado (Trinh et al., 2009a,b).

Los mecanismos estudiados por Trinh et al. (2006, 2009a,b) están consolidados en una publicación seminal de Zhang et al. (2011) e incluye todos los caminos en solución básica que, hasta la fecha, han sido explícitamente estudiados. Estas están resumidas en la *Figura 2.11*, ignorando la transferencia de protones acido-base.



Figura 2.11-Rutas de crecimiento de los silicatos en solución básica previamente estudiadas que han sido consideradas explícitamente a través de técnicas ab-initio [Figura tomada de (McIntosh, 2013)].

Los estudios ab initio utilizando estas rutas de reacción fueron usados por Zhang et al. (2011) como la base para el desarrollo de una simulación cinética de Monte Carlo de la prenucleación de silicato en regímenes de pH neutros a elevados.

Este enfoque provee una serie de ventajas importantes sobre las simulaciones MD convencionales las cuales solo pueden describir escalas de tiempo extremadamente cortas (típicamente microsegundos, cuando más) y no da cuenta de los efectos electrónicos pertinentes al nivel alcanzable con los métodos ab initio (Feuston and Garofalini, 1990; Rustad and Hay, 1995; Rao and Gelb, 2004; Trinh et al., 2009a,b; Liu et al., 2010).

Zhang et al. (2011) amplió los tiempos de simulación a miles de segundos, y modelo una serie de observaciones experimentales, incluyendo la ausencia de anillos de 3 en zeolitas y la dependencia de la tasa de oligomerización con respecto al pH.

Las simulaciones indicaron que las especies lineales dominantes fueron los trímeros (los trímeros cíclicos están aun ausentes bajo ciertas condiciones) mientras que las estructuras de anillos de 4 fueron los tetrámeros más abundantes.

Los tetrámeros ramificados, asi como los trímeros cíclicos, fueron formados en cantidades despreciables aunque se volvieron importantes a altas temperaturas. Basados en sus observaciones, los autores concluyeron que la adición del monómero a oligómeros lineales cada vez más grandes describe el crecimiento, con cadenas de 3 y 4 miembros ciclándose a anillos de 3 y 4 miembros, respectivamente.

De este estudio se concluyó que la formación de tetrámeros ramificados por adición de monómero en el medio de una cadena de silicato es una vía minoritaria, presumiblemente en línea con los experimentos donde los tetrámeros ramificados se encuentran comunmente como un producto menor. La adición de monómeros a anillos de 3 miembros no fue considerada (McIntosh, 2013).

Sin embargo, a pesar del acuerdo con algunas observaciones experimentales, existen ciertos puntos que necesitan ser explicados de mejor modo.

El rol de las especies de anillos de 3 no fue estudiado como los tetrámeros ramificados y el rendimiento de los trímeros cíclicos (precursores de estas especies) fue bajo, y por lo tanto estas rutas son despreciables. Sin embargo, los trímeros cíclicos y los anillos de 3 ramificados son observados experimentalmente en soluciones altamente básicas como especies importantes y por ello pueden estar presentes en concentraciones no despreciables en soluciones no tan básicas y cercanas a soluciones neutras (Harris and Knight, 1983; Knight et al., 2007).

Consecuentemente, las rutas que involucran la adición del monómero a trímeros cíclicos (los cuales son cinéticamente accesibles en soluciones neutras) pueden ser operativos en soluciones básicas (Schaffer and Thompson, 2008).

Adicionalmente, las especies más condensadas tales como los grupos bicíclicos y tetraédricos aun no han sido estudiados, y pueden jugar un rol fundamental en el crecimiento o isomerización de silicatos. Asi como, un estudio ab initio completo explorando todos los mecanismos de reacción posibles seria de gran ayuda para futuros intentos de modelación de la prenucleación de silicatos.

Para este fin deben examinarse todos los mecanismos potenciales de formación de dímeros, trímeros, y tetrámeros, de todas las posibles combinaciones de reactantes (incluyendo los pares de hidrógenos enlazados encontrados) tales que los grupos posean solo una carga negativa.

2.5.2 COAGULACIÓN

En este caso, se forma un precipitado por coagulación de las partículas coloidales ya existentes. No involucra nucleación y es a menudo considerado como un tema separado.

Como se menciona en el párrafo anterior, la coagulación se forma a partir de partículas coloidales, lo que involucra un proceso de agregación de partículas. Para poder coagular, las partículas primeramente deben formar un sol, y posteriormente coagular.

En ocasiones no se reconoce que existe una diferencia básica entre gelificación, coagulación o floculación, ya que todos involucran partículas coloidales unidas unas con otras y forman redes tridimensionales. Pero cuando un sol es gelificado, primero se vuelve viscoso y entonces desarrolla rigidez. Por otro lado, cuando un sol es coagulado o floculado, se forma un precipitado. En un sol concentrado el precipitado puede ser demasiado voluminoso para separarse y permanecerá como una masa tixotrópica, pero en un sol diluido, el precipitado se sedimentará. La diferencia se muestra en la *Figura 2.12*.



Figura 2.12-Gel de sílice contra precipitado: a) sol, b) gel, c) floculación y precipitación [Figura modificada de (Brown, 2011)].

Una forma de definir la diferencia entre los términos coagulación y floculación es la siguiente.

El termino floculación se usa para un caso especial de coagulación en el cual la estructura final es promovida por puentes de moléculas orgánicas o partículas coloidales inorgánicas formando una red tridimensional suelta que tiene poros que permiten la fácil filtración. Así, se preserva el término floculación en su significado original de una estructura abierta suelta, un flóculo, como un mechón de lana.

Por otra parte, el termino coagulación viene del latín y significa "moverse conjuntamente", y por lo tanto es usado para casos donde las partículas elementales se reúnen en agregados relativamente densos o grupos que se depositan de forma compacta y por lo tanto, en contraste, son difíciles de remover por filtración (LaMer and Healy, 1963). A pesar de lo anterior, es obvio que no hay una clara distinción entre los términos.

La palabra agregación es usada para todos los caminos en los cuales las partículas coloidales se unen unas con otras. Así, la agregación incluye lo siguiente:

1. Gelificación:

Donde las partículas se unen unas con otras en cadenas ramificadas que llenan el volumen de todo el sol de manera que no hay un aumento en la concentración de sílice en cualquier región microscópica en el medio. Por el contrario, el medio completo se vuelve viscoso y entonces se solidifica por la formación de una red coherente que, por capilaridad, retiene al líquido.

La agregación y la gelificación son mecanismos de polimerización en el caso de partículas extremadamente pequeñas de ácido polisilícico, en otras palabras, es también la conversión de soles de partículas discretas relativamente uniformes a geles.

La mayoría de los geles de sílice se forman de ácidos polisilícicos o partículas coloidales de sílice muy pequeñas, por lo general menores a 5 nm de diámetro, de modo que su naturaleza y estructura no eran claras. Actualmente se pueden fabricar soles de tamaño uniforme y los mecanismos de gelificación son mucho mejor comprendidos.

Existen diversos factores involucrados en este proceso de agregación, uno de ellos es el pH; la *Figura 2.13* ilustra los efectos catalíticos de los iones OH, lo cual se relaciona directamente con el pH de la solución, asi como también la presencia de sales.

Los geles pueden formar una capa relativamente dura y adherente sobre una superficie por medio del secado de un sol. (*ver Figura 2.14*) La capa será más densa y dura si están presentes en el sol partículas de diferente tamaño. (*ver Figura 2.15*)



Figura 2.13-Efectos del pH en el sistema sílice coloidal-agua [Figura modificada de (Iler, 1979)].



Figura 2.14-Evaporación de la película de sol de sílice a gel y secado: sección transversal esquemática. a) sol; b) sol concentrado-comienza la agregación; c) gel comprimido por la tensión superficial; d) fractura del gel por encogimiento; e) fragmentos de gel seca separados. A, superficie del agua; S, sustrato sólido [Figura modificada de (Iler, 1979)].



Figura 2.15-Gel densa fuerte formada a partir de la mezcla de partículas grandes y pequeñas [Figura tomada de (Iler, 1979)].

2. Coagulación:

Donde las partículas se reúnen dentro de grupos de empaquetamiento relativamente compacto en los que la sílice está más concentrada que en el sol original, por lo que el coágulo sedimenta como un precipitado relativamente denso.

A pesar de que involucran los mismos factores, la gelificación y la coagulación, son dos fenómenos muy diferentes. En la gelificación el sol parece permanecer homogéneo y a menudo se mantiene esencialmente claro a medida que se vuelve viscoso y se forma el gel. Por otro lado, durante la coagulación, las partículas pueden concentrarse en agregados que tienen un mayor índice refractivo que el medio. Por lo tanto la coagulación puede ser seguida observando el incremento en la turbidez o el decremento en la luz transmitida (Lichtenbelt et al., 1974; Van Olphen and Mysels, 1975).

Los coloides han sido clasificados como liofílico o liofóbicos, esto es, "amantes del agua" o "con temor al agua", o, en el caso de los soles acuosos, como hidrofílico o hidrofóbico. La estabilidad de los soles hidrofóbicos depende principalmente de la carga de las partículas, mientras que con los soles hidrofílicos esto es menos importante, ya que las partículas se estabilizan por "solvatación" o "hidratación".

La sílice es hidrofílica, aunque bajo ciertas condiciones donde las sales causan la coagulación puede volverse un tanto hidrofóbica. Los términos no son de mucha importancia en relación a la sílice, excepto cuando están involucrados agentes floculantes orgánicos, donde la adsorción de estos en la superficie de la sílice la hace definitivamente hidrofóbica.

La coagulación ha sido considerada un resultado de de la atracción de Van Der Waals que atrae a dos partículas entre si hasta colisionar, a menos que una capa de barrera de hidratación o fuerzas electrostáticas de repulsión entre partículas de carga igual, o ambas, se oponga. Existen por lo tanto dos factores que retardan la coagulación de la sílice: (1) La "hidratación" de la superficie de las partículas por una capa de moléculas de agua con enlaces de hidrogeno a los grupos SiOH; (2) La carga iónica negativa en las partículas por encima de un pH de aproximadamente 3.5 y la nube circundante de contracationes positivos tal como el Na⁺, formando la "doble capa".

En un intervalo de pH de 7-10, los soles de sílice son estables si la concentración de electrolitos es baja, pero coagulan cuando se agregan sales. Se consideran generalmente dos mecanismos de agregación: (1) Atracción partícula-partícula por fuerzas de Van Der Waals, descrito matemáticamente por London y extendido a partículas coloidales por Hamaker (Hamaker, 1936, 1937); (2) Puenteo partícula-partícula por el agente coagulante o floculante.

En el primer caso, la atracción conduce a la coagulación cuando las fuerzas de repulsión entre las partículas, que poseen cargas iónicas similares, se reducen por la adición de una concentración crítica de sales coagulantes. La mayoría de las sales agregadas permanecen en solución asi que la concentración permanece sin cambios mientras que la floculación progresa. La pequeña fracción de iones salinos que son adsorbidos en las partículas floculadas y llevados fuera de la solución es usualmente ignorada. En este caso la atención se concentra comunmente en las propiedades del medio de dispersión en lugar de la posible adsorción de iones en las partículas floculadas.

Existe diferencia remarcable en los efectos coagulantes de diferentes iones monovalentes; por debajo de un pH de 7 todos los iones Na⁺, K⁺, Rb⁺ y Cs⁺ exhiben aproximadamente la misma concentración critica de sal coagulante; pero por arriba de pH 10, K, Rb, y Cs no tienen un efecto floculante, mientras que el Na, y el Li lo conservan.

Los cationes monovalentes pueden actuar como agentes enlazantes o de puenteo; tal es el caso del ion sodio que puede actuar como un puente entre dos partículas de sílice; si esta teoría es correcta, puede formarse un coagulo tan pronto como existan suficientes iones sodio intercambiados u otros cationes que se coordinen con el oxigeno en la superficie de cada partícula de sílice para proveer más de dos puntos de contacto con otras partículas.

Dos puntos de contacto podrían permitir solo la formación de cadenas de partículas pero no agregados. Con mayores cantidades de sodio en la superficie, cada partícula podría tener entre tres y seis puntos de contacto con partículas circundantes, formando progresivamente agregados más densos. (*ver Figura 2.16*)

3. Floculación:

Donde las partículas esta unidas unas con otras por puentes del agente floculante, que son lo suficientemente largos que la estructura del agregado permanece abierta y voluminosa.

Pare ser que estas diferencias se notan más claramente en soles diluidos que contienen solo un pequeño porcentaje de sílice. En mezclas concentradas uno puede distinguir un gel, que es rígido, pero no entre un coagulado y un floculado.

La floculación de un sol de sílice ocurre con la adición de un coloide polimérico o particulado, donde la micela o partícula que es adsorbida simultáneamente en las superficies de dos diferentes partículas de sílice las une entre sí. Tal adsorción ocurre ya sea porque el agente es catiónico y por lo tanto es atraído a la superficie negativamente cargada de la sílice, o porque contiene grupos donadores de electrones como el oxigeno de un polieter, y se sostiene de la superficie de la sílice por enlace de hidrogeno. El ultimo no ocurre a pH elevado donde la superficie de la sílice está altamente cargada, sino únicamente a pH bajo donde la superficie consiste de grupos silanol neutros.



Figura 2.16-Posible enlace entre las partículas de sílice a través de la coordinación con los cationes metalicos floculantes. (a) Los iones hidroxilo transfieren cargan negativa a la capa de agua enlazada al hidrogeno de los grupos silanol en la superficie de la partícula; equivalente a la adsorción de un ion hidroxilo; (b) El ion sodio hidratado es adsorbido en un sitio negativo formando un complejo neutro; (c) la colisión con un área sin carga de una segunda partícula permite al ion sodio coordinarse con los oxígenos del silanol y la superficie enlazada al agua, formando una coordinación de enlaces entre las partículas. Nota: los círculos representan a los átomos de oxigeno. Las partículas coloidales son mucho más grandes con respecto a los átomos representados aquí. Se pueden formar varios de puentes de sodio [Figura tomada de (Iler, 1979)].

Por consiguiente los agentes floculantes orgánicos son (a) surfactantes catiónicos que forman micelas, (b) polímeros orgánicos catiónicos, y (c) compuestos orgánicos no iónicos solubles en agua, o polímeros que contienen grupos donadores de electrones como éteres, hidroxilos, o amidas. Estos están sumariados en la *Tabla 2.10* y los mecanismos representados en las *Figuras 2.17-2.19* (Iler, 1979).

| Tipo de Agente | Ejemplo | Mecanismo | рН |
|------------------------------------|---|--|--------------|
| Bajo peso molecular | | | |
| Surfactante cationico | Bromuro de octadecil trimetil amonio | Atraccion ionica, formacion de micelas | 4-10.5 |
| Surfactantes no ionicos | Detergentes no ionicos | Enlace de hidrogeno, formacion de micelas | < 3(más sal) |
| Sal metalica basica | Cloruro de aluminio básico | Atraccion ionica | < 7 |
| Alto peso molecular | | | |
| Polimero cationico | Poliacrilatos sustituidos con amonio cuaternario | Atraccion ionica | 3-9 |
| Polimero no ionico | Oxido de polietileno | Enlace de hidrogeno | < 5 |
| Coloides cationicos inorganicos | Alumina coloidal | atraccion ionica | 3-7 |
| | | | |

Tabla-2.10 Clases de agentes floculantes [Tabla tomada de (Iler, 1979)].



Figura 2.17-Floculación de partículas de sílice: puenteo por a), micelas catiónicas surfactantes (por ejemplo, iones cetiltrimetilamonio); b) moléculas poliméricas catiónicas tridimensionales (por ejemplo, almidón catiónico); c) polímeros cationicos lineales (por ejemplo, polietilen imina) [Figura modificada de (Iler, 1979)].

O.



Figura 2.18-Floculación de partículas de sílice por partículas coloidales de carga iónica opuesta [Figura tomada de (Iler, 1979)].



Figura 2.19-Floculación y coacervación de partículas de sílice a pH bajo por hidrogeno enlazado a éteres, alcoholes y amidas [Figura tomada de (Iler, 1979)].

Los mecanismos por los cuales las partículas de sílice se mantienen juntas depende del tipo de agente floculante: (1) Si el agente es adsorbido en la superficie y orientado de modo que se producen áreas hidrofóbicas, estas zonas en diferentes partículas se unen para formar una micela. Las partículas se mantienen juntas por las poderosas fuerzas de tensión superficial alrededor de los radios de curvatura negativa en la zona de contacto, los llamados enlaces hidrofóbicos. Es también posible considerar esto como la adsorción de dos partículas en lados opuestos de una micela surfactante en solución. Sin embargo, la

floculación puede ocurrir cuando la concentración del surfactante catiónico es menor que la concentración critica para la formación de la micela en ausencia de partículas de sílice, sugiriendo que la micela se estabiliza por estar en el punto de contacto entre las partículas solidas; (2) El segundo y más comunmente reconocido mecanismo es donde el polímero orgánico o partícula coloidal inorgánica se une a dos partículas de sílice diferentes y actúa como un puente.

Para un sol particular bajo ciertas condiciones, la adición gradual del agente floculante primero conduce a la floculación de solo una parte de las partículas colídales, y si se agrega mas, precipitan cada vez mas hasta que no queda ni una sola partícula coloidal en solución. La floculación completa ocurre solo cuando existe suficiente floculante adsorbido para crear puentes en un promedio de 3 puntos de contacto por partícula, a fin de formar una red tridimensional. Posteriormente, más del floculante es adsorbido en el precipitado hasta que es cubierta la superficie completa. Dependiendo de la naturaleza del floculante, la agregación adicional de este puede resultar en la redispersión de las partículas, cada una de las cuales está ahora rodeada por una capa adsorbida de floculante y las partículas ahora poseen una carga positiva.

Es por lo tanto obvio que el termino floculación describa la acción del agente solo cuando una cantidad critica está presente, ya que con la adición extra, el agente se vuelve un agente estabilizante.

Para prevenir la peptización en presencia de un exceso de agente floculante, el coloide debe ser primero coagulado de modo que las partículas estén en contacto una con otra antes de que el polímero sea introducido, entonces el polímero es adsorbido alrededor de los puntos de contacto, fortaleciendo los puentes entre partículas (Ruehrwein and Ward, 1952). De modo que, el polímero no se inserta entre las partículas, y no causa re dispersión. Por otro lado, si las partículas se separan cuando el agente es agregado, todas las superficies pueden ser rodeadas y se produce un sol cuando se agrega en exceso.

Un modelo general de la estructura de un floculo ha sido propuesto por Sutherland (1967), quien asumió que la coagulación ocurre con la adición de partículas individuales a dobletes, tripletes, y agregados mayores y también que los agregados pueden colisionar y unirse. La teoría de la densidad del floculado y la facilidad de filtración han sido desarrollados por Smellie y LaMer (1958).

4. Coacervación:

Un cuarto tipo de agregación, en el cual las partículas de sílice están rodeadas por una capa de material adsorbido que hace las partículas menos hidrofóbicas, pero no forma puentes entre partículas. Las partículas se agregan como una fase liquida concentrada inmiscible con la fase acuosa.

El termino coacervación significa la formación de un liquido precipitado por la coagulación mutua de coloides. La coacervación de hecho involucra coagulación, pero con la disposición adicional de que los puentes entre partículas o unidades colídales son inestables de modo que pueden existir en equilibrio, siendo formados y reestablecidos de manera que el coagulo puede continuar contrayendo su red al mayor grado posible. La fase liquida principal es entonces excluida de la red de partículas coagulantes hasta que el coagulo está altamente concentrado, debido a que los puentes o enlaces entre las partículas coloidales no son permanentes, puede constantemente romperse y reformarse. El ejemplo clásico es la fase liquida que se separa cuando se mezclan soluciones concentradas de gelatina y goma arábiga.

Una amplia gama de coacervados de enlace de hidrogeno han sido estudiados por Iler. Uno de los mejores ejemplos de coacervados es la compleja asociación con enlaces de hidrogeno entre el dietil-eter del dietilen-glicol y acido polisilícico (Iler, 1955).

La coacervación aparentemente ocurre solo cuando la superficie de las partículas de sílice está cubierta con una capa adsorbida de moléculas orgánicas en las que los grupos polares esta orientados hacia la superficie del silanol por enlace de hidrogeno pero lo suficientemente móvil para reordenarse hasta que las porciones dispuestas al exterior de las moléculas consistan principalmente de segmentos de hidrocarburos hidrofóbicos. Como resultado, las partículas se vuelven un tanto hidrofóbicas y se separan como un coacervado de fase aceitosa.

2.6 MECANISMOS DE POLIMERIZACIÓN

Desde los tiempos de Graham (1862, 1865), quien realizo un estudio intensivo de los soles y geles, se han llevado a cabo muchos intentos para explicar el comportamiento de el acido silícico. Cuando esta recién formado por acidificación de un silicato soluble o la hidrolización de un éster, el acido silícico no es coloidal, ya que se dispersa fácilmente a través de membranas de pergamino o animales y tiene un peso molecular correspondiente al monómero por depresión del punto de congelación. Pronto las unidades moleculares se hacen más grandes y pasan a través de las membranas solo lentamente y luego nada en absoluto (Freundlich, 1962). Esto podría ser tal vez porque el monómero u otras pequeñas partículas primarias forman agregados, o quizá las partículas individuales crecen en tamaño y decrecen en número.

Freundlich (1926) aparentemente reconoció estas alternativas cuando escribió:

"Si es más bien una cuestión de ácidos polisilícicos, que dan una mayor micellae, siendo formada a partir de ácido silícico simple, o si las partículas de cristaloides originalmente presentes ya están formadas por ácidos polisilícicos, pero son amicrons extremadamente finos que continuamente aumentan de tamaño, no puede decirse aún con certeza."

En su terminología, una "micella" es una partícula coloidal en la cual sustancias extrañas (iones, agua) están presentes en su estructura, esto es, un agregado poroso, mientras que el "amicron" es una partícula discreta demasiado pequeña para ser vista con el ultramicroscopio. El reconoció que tales partículas en una solución coloidal podrían consistir de una molécula muy grande, en otras palabras, una sola unidad, no un agregado.

Debido a que el comportamiento más obvio del acido silícico en solución es el de incrementar su viscosidad y finalmente formar un gel, se asumió con generalidad que su polimerización era un proceso de agregación o una polimerización por la cual unidades moleculares pequeñas se unían unas con otras para formar otras más grandes. La nucleación y el crecimiento de partículas discretas antes de la etapa donde la agregación comienza no habían sido reconocidas por muchos investigadores, quienes mantenían la idea de que el Si(OH)₄ polimerizaba en cadenas de siloxano que después se ramificaban y reticulaban como sucede en muchos polímeros orgánicos.

Fue Carmen (1940) quien por primera vez declaro con claridad que el acido silícico polimeriza a partículas discretas que luego se agregan en cadenas y redes.

"La formación de gel de sílice debe considerarse en 2 etapas. En la primera, el Si(OH)₄ condensa para formar partículas coloidales. En solución diluida, un nuevo pero lento incremento en el tamaño de la partícula es el único cambio subsecuente, pero a una concentración de alrededor del 1 % de sílice, estas partículas primarias son capaces de condensar unas con otras para formar una muy abierta pero continua estructura, extendiéndose por todo el medio, otorgándole asi un cierto grado de rigidez. En ambas etapas de la polimerización, el mecanismo es el mismo, esto es, la condensación para formar enlaces Si-O-Si, pero en el primer paso, la condensación lleva a partículas de sílice masivas, mientras que en el segundo, ya que no es posible adaptar dos partículas con precisión sobre una superficie común, el numero de enlaces Si-O-Si entre partículas es menor que los que hay dentro de las partículas mismas. No son más que los suficientes para unirse entre las partículas adyacentes, en una posición fija en relación uno con otro, conduciendo a una rígida, altamente porosa y enredada red de cadenas ramificadas. . ."

Por lo tanto se pueden reconocer tres etapas:

1-La polimerización del monómero para formar partículas.

2-El crecimiento de las partículas.

3-El enlazamiento de las partículas unas con otras en cadenas ramificadas, luego en redes, y finalmente extendiéndose por todo el medio liquido, espesándose hasta un gel.

Desde que Carmen publico su trabajo en 1940, más datos experimentales continúan confirmando este su punto de vista. Es de acuerdo general que la polimerización, esto es, las reacciones que resultan en un incremento del peso molecular de la sílice, involucran la condensación de los grupos silanol:

$$-SiOH + HOSi - = -SiOSi - +H_2O$$
(2.14)

El termino polimerización es usado en su sentido más amplio como, la mutua condensación del Si(OH)₄ para dar unidades molecularmente coherentes de tamaño creciente, no importando si estas son partículas esféricas de diámetro creciente o agregados de un número creciente de partículas constituyentes. La formación y crecimiento de las partículas esféricas es un tipo de polimerización que tiene lugar bajo ciertas condiciones. La agregación de partículas para formar soles viscosos y geles es otro tipo de polimerización que ocurre bajo otras condiciones. Ambos tipos de polimerización pueden ocurrir al mismo tiempo.

Primero revisaremos la teoría general de la polimerización para después explorar los detalles de cada paso y finalmente discutir algunos trabajos importantes. Los pasos exitosos de la polimerización desde el monómero hasta partículas más grandes y geles o polvos han sido representados por Iler (1973) como se muestra en la *Figura 2.20*. Esto es aplicable a sistemas acuosos, en los que la sílice es un tanto soluble. Muy poco es conocido a cerca de la polimerización cuando el Si(OH)₄ se forma en soluciones no acuosas.



Figura 2.20-Comportamiento de polimerización de la sílice. En solución básica (B) las partículas en el sol crecen en tamaño y decrecen en número; en solución acida o en presencia de sales floculantes (A), las partículas se agregan en redes tridimensionales y forman geles [Figura modificada de (Iler, 1979)].

Los pasos individuales son los siguientes.

- (a) El acido monosilícico es soluble y estable en agua a 25 °C por largos periodos de tiempo si la concentración es menor a más o menos 100 ppm como SiO₂. Cuando se prepara una solución del monómero, Si(OH)₄, a una concentración mayor a aproximadamente 100-200 ppm como SiO₂, esto es, mayor que la solubilidad de la fase solida de la sílice amorfa, y en ausencia de la fase solida en la cual la sílice soluble podría ser depositada, entonces el monómero polimeriza por condensación para formar un dímero y especies de acido silícico con mayor peso molecular.
- (b) La polimerización por condensación involucra un mecanismo iónico. Por arriba de un pH 2 la tasa es proporcional a la concentración de iones OH⁻ y por debajo de 2 a los iones H⁺.
- (c) El acido silícico tiene una fuerte tendencia a polimerizar de tal forma que en el polímero hay un máximo de enlaces siloxano y un mínimo de grupos SiOH sin condensar. Asi, en la etapa más temprana de la polimerización, la condensación rápidamente lleva a estructuras de anillo, por ejemplo, el tetrámero cíclico, seguido por la adición de monómero a estos y el enlazamiento de unos con otros, de los polímeros cíclicos a moléculas tridimensionales más grandes. Estas condensan internamente a una forma más compacta con grupos SiOH restantes en el exterior.
- (d) Las unidades esféricas resultantes son, en efecto, los núcleos que se convertirán en partículas más grandes. La solubilidad de estas muy pequeñas partículas depende del tamaño de la partícula, esto es, el radio de curvatura de la superficie. También depende de que tan completa sea la deshidratación de la fase solida interna. Si la última se forma a temperatura ordinaria, puede contener grupos OH sin condensar, pero si es formada encima de 80 °C, y especialmente arriba de pH 7, esta es casi anhidra.
- (e) Debido a que las partículas más pequeñas son más solubles que las más grandes, y ya que no todas las pequeñas partículas tridimensionales son del mismo tamaño, las partículas crecen en tamaño promedio y disminuyen en número mientras que las más pequeñas se disuelven y la sílice se deposita sobre las más grandes (maduración de Ostwald). Sin embargo, la mayor solubilidad de las partículas más pequeñas se manifiesta solo cuando el tamaño de partícula es más pequeño que aproximadamente 5 nm y se manifiesta en mayor grado cuando es menor a 3 nm. Por lo tanto, por encima de pH 7, donde la tasa de disolución y deposición de sílice es alta, el crecimiento de las partículas continúa a temperatura ordinaria hasta que las partículas son de 5-10 nm de diámetro, después de lo cual el crecimiento es lento. Sin embargo, a bajo pH, donde la tasa de polimerización y despolimerización es baja, el crecimiento de las partículas se vuelve insignificante después de alcanzar un tamaño de 2-4 nm. A mayores temperaturas, el crecimiento continúa a tamaños más grandes, especialmente por arriba de pH 7.

La formación de partículas fue también propuesta por Vysotskii et al. (1974), quien estudió las primeras etapas de la polimerización y afirmo de manera similar que existen dos procesos básicos del crecimiento de las partículas de sílice en los sistemas acuosos: (1) El crecimiento de partículas a expensas del acido silícico en la solución desde el momento de su preparación; (2) El crecimiento adicional de partículas más grandes por deposición del

acido silícico disuelto de las partículas más pequeñas. Este es un proceso más lento y puede ser despreciable a bajo pH después de que el monómero ha sido usado.

(f) Arriba de pH 6 o 7, y hasta 10.5, donde la sílice comienza a disolverse como silicato, las partículas de sílice están cargadas negativamente y se repelen unas con otras. Por lo tanto, no colisionan, asi que el crecimiento de las partículas continúa sin agregación. Sin embargo, si hay sal presente a una concentración mayor a 0.2-0.3 N, como cuando el silicato de sodio es neutralizado con acido, la carga repulsiva se reduce y ocurre la agregación y la gelación.

Resulta paradójico que bajo determinadas condiciones, la precipitación o gelación es impedida por la elevación de la temperatura. En este intervalo de pH un sol de 2-3% de sílice con una concentración limite de sal de 0.2-0.3 N, gelifica si maduró a temperatura ordinaria. Sin embargo, si el sol es primero calentado a 80-100 °C, las partículas crecen en tamaño y decrecen en número de modo que la agregación y la gelificación son muy retardadas o incluso impedidas permanentemente.

(g) A bajos pH las partículas de sílice poseen una carga iónica muy pequeña y por lo tanto pueden colisionar y agregarse en cadenas y después en redes de gel. Si la concentración de SiO₂ es mayor a 1% tal agregación puede comenzar tan pronto como las primeras pequeñas partículas sean formadas. Sin embargo a bajas concentraciones y pH de aproximadamente 2, el monómero se convierte en gran parte en partículas discretas antes de comenzar a agregarse. Por otro lado, a pH 5-6, el monómero se convierte rápidamente a partículas las cuales simultáneamente se agregan y gelifican de modo que es imposible separar dos procesos. La tasa de agregación incrementa rápidamente con la concentración de manera que en cualquier caso por encima de 1% de sílice, la agregación implica probablemente no solo partículas sino también oligomeros (Iler, 1979).

El proceso de agregación y gelificación en los sistemas de sílice es único pues, a diferencia de otros óxidos metalicos, la fase solida permanece completamente amorfa y apreciablemente soluble en agua y está generalmente en equilibrio de solubilidad con el monómero. Es esencial comprender que mientras el sol está siendo convertido a gel, los agregados en crecimiento contienen la misma concentración de sílice y agua que las regiones circundantes al sol. Estos agregados o fase de gel no pueden verse ya que la densidad y el índice refractivo de la fase gel son iguales a los del sol restante. Por lo tanto antes de que el sol solidifique, solo puede notarse un lento aumento en la viscosidad, con pequeños cambios en otras propiedades, hasta el punto donde la viscosidad comienza a incrementarse rápidamente y ocurre la solidificación en el punto de gel. El camino más común para determinar el punto de gel es observar cuando el menisco de un sol en un contenedor ya no se mantiene en posición horizontal cuando el contenedor es inclinado.

Puede resultar complicado el visualizar como las partículas en suspensión pueden reordenarse por sí mismas en redes tridimensionales sin cambiar la concentración de sílice. En ciertas regiones microscópicas en el sol, las partículas se organizan por sí mismas en cadenas, y estas se ramifican y forman redes. Estas pueden ser aisladas en soles gelificados a pH bajo por la adición de un fluido miscible inerte como agua o alcohol. Con una doble dilución, todas las partículas no conectadas a una red tridimensional se separan, pero las rígidas redes tridimensionales mantienen su estructura y por lo tanto son más densas que el medio, y por lo tanto pueden ser separadas por centrifugación. De esta manera el porcentaje de sílice que ha sido convertido a la fase gel puede ser medido. La gelificación ocurre cuando alrededor de la mitad de la sílice ha entrado a la fase gel, que puede pensarse como regiones esféricas solidificadas en suspensión que causan un rápido incremento en la viscosidad cuando la fracción volumen alcanza un valor aproximado de 0.5.

Después de que la red del gel ha sido formada, la estructura se vuelve más fuerte y los cuellos entre las partículas se vuelven más gruesos debido a la solución y deposición de sílice.

Es necesario considerar la polimerización en solución por debajo de pH 7 por separado de la que ocurre por arriba de pH 7 por las siguientes razones: (i)Es solo a pH bajo que la polimerización es lo suficientemente lenta para permitir que las etapas tempranas se desarrollen. Los cambios que ocurren en horas a un pH 2 se completan en minutos o segundos a pH 8-9; (ii) Las unidades poliméricas o partículas que se forman a pH bajo no poseen ninguna carga y a menos que la concentración de sílice sea muy baja, la agregación comienza poco después de que se forman las partículas poliméricas, no solo debido a la falta de carga de las partículas, sino también porque las partículas son extremadamente pequeñas y paran de crecer después de que alcanzan un diámetro aproximado de 2-3 nm. Ya que la tasa de agregación depende principalmente del número de partículas por unidad de volumen y no tanto del tamaño, la agregación ocurre aun a muy bajas concentraciones de sílice; (iii) Arriba de pH 7 las partículas continúan creciendo hasta un mayor diámetro, dependiendo principalmente de la temperatura, a menos que la agregación o gelificación se dé en presencia de un electrolito en una cantidad que se aproxime a la concentración crítica de coagulación al pH del sol.

Por lo tanto, solo a pH bajo puede desarrollarse la polimerización progresiva del monómero y pueden observarse la formación inicial de polímeros tridimensionales de sílice condensada o núcleos.

La polimerización implica la formación de estructuras llamadas oligomeros; los oligomeros son ácidos polisilícicos de bajo peso molecular a partir de trímeros quizás octámeros o dodecámeros que reaccionan en un tiempo de 10-20 min con el usual reactivo acido molíbdico. Estos incluyen los ácidos polisilícicos lineales, cíclicos y policíclicos. Sus esteres completamente trimetilsililados son generalmente destilables al alto vacío y, excepto por el monómero, son sólidos. No existe una clara distinción de que algún polímero mayor se haya hecho antes. Sin embargo, puede haber buenas razones para ello. Una vez que este grado de polimerización ha sido alcanzado, el demás incremento en el tamaño de la partícula de peso molecular sucede rápidamente si el monómero esta aun disponible o si la concentración restante de sílices es suficientemente alta.
El peculiar comportamiento de polimerización en estos sistemas parece poder explicarse del siguiente modo: (1) El monómero, Si(OH)₄, tiene un pKa de 9.9 aproximadamente; (2) El pKa del dímero es reportado como mayor pero probablemente es menor que el del monómero; (3) Las especies altamente polimerizadas tienen un pKa mucho más bajo cercano a 6.7 y por lo tanto están más altamente ionizadas que el dímero o el monómero.

Esto implica que mientras mayor sea el numero de enlaces siloxano y menor el número de grupos OH sobre un átomo de silicio, mas fuerte será la acidez. A pesar de que el dímero se reporta como una excepción en la serie de acidez, parece incierto.



La tasa de polimerización del monómero y la formación de gel de sílice se llevan a cabo a un pH mínimo de 2 aproximadamente, el catalizador por debajo de un pH de 2 es el ion H^+ el cual forma un complejo catiónico activo; del miso modo, por arriba de un pH de 2 el catalizador es el ion OH^- el cual genera sílice aniónica activa.

Sin embargo, Iler (1952) descubrió que el pH al cual la tasa de polimerización es mínima está fuertemente influenciado por trazas de iones flúor, tan diminutas como una concentración 10^{-4} M (1.9 ppm) y con un efecto destacado. Ya que las trazas de flúor son difíciles de evitar se sospechaba que el efecto catalítico del ion H⁺ podría depender enteramente de la impureza de fluoruro. Sin embargo, en vista de las observaciones de varios investigadores sobre los sistemas de sílice altamente purificada, es ahora evidente que el efecto del flúor esta meramente superpuesto sobre el efecto del ion H⁺ solo.

La auto condensación del monómero catalizado por el ion OH⁻ es comunmente de la siguiente manera:

$$2 Si(OH)_4 \xrightarrow{OH^-} (OH)_3 SiOSi(OH)_3 + H_2O$$
(2.15)



Treadwell y Wieland (1930) realizaron la siguiente hipótesis:

"Para poder explicar el mecanismo de polimerización del acido silícico, nosotros tendríamos que comenzar con el hecho de que el silicio tetravalente esta todavía insaturado coordinativamente. Ambas valencias secundarias fuertemente definidas que son activas en los complejos del fluoruro de silicio deben también desempeñar un rol en el oxido hidratado."

Iler (1955) represento una etapa intermedia 6-covalente mostrada en la *Figura 2.21*, y A. Weyl (1951) postuló complejos aun más extensivos involucrando silicio 6-coordinado.

Parece existir una diferencia básica en los mecanismos de polimerización por debajo y por encima de pH 2. Por arriba de pH 2, la tasa de desaparición del monómero es una reacción de segundo orden; por debajo de pH 2 es de tercer orden. El orden de la reacción ha sido explicado por Okkerse (1970) en el sentido de que el silicio incrementa su número de coordinación a 6, y se forma a la vez un intermedio de silicio 3 por debajo de un pH 2, esto se muestra en **B** en la *Figura 2.21*.

Por arriba de un pH 2 se propone la alternativa **A** que involucra solo dos átomos de silicio, al igual que en **C** en la *Figura 2.21*. Otra estructura intermedia fue propuesta por Dalton (19??) y se muestra en **D**. Si uno o ambos de los átomos de silicio fueran parte de un acido polisilícico o de la superficie de una partícula de sílice, solo un número de coordinación de 5 podría estar involucrado, como en **E**.

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS



Figura 2.21-Posibles intermediarios en la polimerización de sílice: A, complejo aniónico de dos silicios participando con un ion OH^{-} ; B, complejo catiónico de 3 silicios participando con un ion H^{+} ; C y D, propuestas alternas a A; E, intermediario en la superficie de la sílice [Figura tomada de (Iler, 1979)].

En cualquier caso se supone que cuando el silicio se coordina con 5 o 6 átomos de oxígeno, todos los enlaces silicio-oxígeno están debilitados de manera que pueden producirse los reordenamientos. Esto ha sido considerado en sumo detalle por Strelko (1970), quien propuso la siguiente ecuación para el intervalo de pH de 2 a 10:

rate =
$$C^2 \left[k_1 \frac{K_D[H^+]}{(K_D + [H^+])^2} + k_2[H^+] \right]$$
 (2.16a)

Donde $K_D = M^-[H^+]/M$, $M \neq M^-$ son concentraciones de Si(OH)₄ y HSiO₃, y C es la concentración total de SiO₂.

Por lo tanto

$$M^{-} = C - M$$
 y $M = \frac{C[H^{+}]}{K_{D} + [H^{+}]}$ (2.16b)

La ecuación (2.15a) corresponde al máximo en la tasa de polimerización en algún lugar del rango medio de pH.

Como se menciono antes, la polimerización involucra la ionización intermedia a \equiv SiO⁻ o \equiv Si⁺ ya sea por debajo o por arriba de pH 2, respectivamente, pero para simplificar la discusión, solo el \equiv SiO⁻ será usado de ejemplo.

Debe entenderse que en las siguientes formulaciones los iones son representados como anhidros mientras que probablemente se asocien con agua en la forma de grupos hidroxilo y formas unidas a hidrogeno. En la ausencia del conocimiento específico se usaran las formas anhidras de los iones.

El punto clave es que la condensación involucra la reacción de un ion \equiv SiO⁻ con un grupo silanol no ionizado:

$$\equiv \text{SiO}^- + \text{HOSi} \equiv \longrightarrow \equiv \text{SiOSi} \equiv +\text{OH}^-$$
(2.17)

Por lo tanto:

- 1. A pH bajo donde el Si(OH)₄ es ionizado solo a un grado muy pequeño y no están presentes otras especies poliméricas, la dimerización es lenta.
- 2. Similarmente, si el dímero es un acido más fuerte que el monómero, la reacción principal es con el dímero ionizado:

$$(HO)_3 SiOSi(OH)_2 O^- + Si(OH)_4 = (HO)_3 SiOSi(OH)_2 OSi(OH)_3 + OH^-$$
 (2.18)

Sin embargo la existencia del trímero lineal es transitoria y su concentración probablemente permanezca baja.

- 3. Debido a la ionización del dímero puede combinarse también con su propia especia ionizada para formar tetrámeros lineales.
- 4. Debido a la proximidad de los grupos SiOH al final de un polímero lineal dado, por ejemplo, el tetrámero, y a una baja concentración del monómero, el cierre del anillo es rápido. El tetrámero cíclico se forma principalmente ya que los ángulos de enlace hacen el cierre del anillo del trímero lineal poco probable (Garzo and Hoebbel 1976;).
- 5. Una vez que predominan las especies cíclicas, el monómero y el dímero reaccionan preferencialmente con estas especies más altamente ionizadas, incrementando su peso molecular.
- 6. Al mismo tiempo, los grupos SiOH adyacentes a los polímeros condensan por doquier haciendo posible el cierre de anillos adicionales, llevando a especies tridimensionales más compactas, los precursores de las partículas coloidales.

Los ácidos polisilícicos simples pueden ser representados por formulas convencionales como en la *Figura 2.22*. Como los polímeros se vuelven tridimensionales pueden ser ilustrados ahora con esferas representando los átomos de oxigeno dispuestos tetraédricamente alrededor de los átomos de silicio los cuales no pueden ser vistos, como en la *Figuras 2.23 y Figuras 2.24*. En la *Figura 2.24* las estructuras simétricas del doble trímero cíclico y del doble tetrámero cíclico (octámero cúbico) se ilustran como modelos de las especies tridimensionales más pequeñas completamente condensadas. Sin embargo, estas nunca han sido aisladas de soluciones

polimerizadas ya que formarían solo una pequeña fracción de todas las especies tridimensionales que pueden ser formadas por combinaciones aleatorias de monómeros y diversos oligomeros menores presentes.



Figura 2.22-Pasos concebibles en la polimerización de la sílice a especies cíclicas. Sin embargo, la consideración de los ángulos de enlace hace que la formación del trímero cíclico sea mucho menos probable que la del tetrámero cíclico [Figura tomada de (Iler, 1977)].



Figura 2.23-Modelos moleculares de ácidos silícicos de la Figura 2-20. Las esferas representan a los átomos de oxígeno; los puntos negros, a los átomos de hidrogeno. Los átomos de silicio dentro del tetraedro de oxigeno no son visibles. No todos los átomos de hidrogeno y oxigeno son visibles. (1) Si(OH)₄; (2) (OH)₃OSiOSi(OH)₃; (3) (OH)₃SiOSi(OH)₂OSi(OH)₃; (4) [(OH)₂SiO]₃; (5) [(OH)₂SiO]₄ [Figura tomada de (Iler, 1977)].



Figura 2.24-Modelos de (A)ácido trisilícico cíclico, (B) ácido octasilícico cúbico, y (C) y (D) las partículas coloidales teóricas formadas por la condensación del monómero para formar anillos cerrados hasta que las especies originales estén

completamente rodeadas por una capa de sílice depositada cubriendo los grupos silanol. Cuando se forma por arriba de pH7 la sílice interna contiene pocos grupos silanol. Diferentes tipos de oligomeros sin condensar por completo pueden formar los núcleos de las partículas coloidales. No existe evidencia de que A y B estén específicamente involucrados. Las esferas son los átomos de oxigeno; los puntos negros, los átomos de hidrogeno. Los átomos de silicio no son visibles [Figura tomada de (Iler, 1977)].

Después de que se han formado las especies tridimensionales con sus grupos silanol mas altamente ionizados, el monómero restante y el dímero reaccionan preferencialmente con ellos y a través del cierre del anillo construyen partículas esféricas más grandes como en la *Figura 2.24*. Estos polímeros más o menos esféricos se condensan aun más internamente y se reordenan en un estado más compacto. Este cambio es rápido arriba de pH 7 y especialmente a temperatura elevada, formando partículas coloidales con un núcleo de SiO₂ y una superficie de grupos SiOH.

Es de conocimiento general que cuando un monómero polimeriza en soluciones alcalinas en el intervalo de pH 8-10 forma partículas coloidales de sílice rápidamente y crecen espontáneamente hasta un tamaño identificable. La posibilidad de formar polímeros tridimensionales o polímeros en partículas de tamaño subcoloidal durante la polimerización del monómero poco después de que los oligomeros cíclicos aparezcan no ha sido generalmente reconocida. Sin embargo, se demostró que partículas de aproximadamente 20 Å de diámetro correspondientes a un grado de polimerización de 100 están presentes en acido polisilícico formado y añejado a pH 2 (Iler and Pinkney, 1947). La posibilidad de polímeros esféricos más pequeños con aun menores grados de polimerización no fue reconocida hasta que se demostró que las correspondientes estructuras de siloxano eran formadas por la hidrólisis y polimerización de compuestos del tipo RSiCl₃. Scott (1946) fue el primero en aislar el compuesto $(CH_3SiO_{1.5})_n$ que sublima sin fundir, y concluyo que el peso molecular era bajo pero no determinó n. un polímero de siloxano esférico fue producido por Olsson (1958) en la forma del compuesto (C₂H₅Si)₈O₁₂ o (C₂H₅SiO_{1.5})₈. Evidentemente los grupos etilo están tan cercanamente empacados alrededor del núcleo esférico de sílice que solo el altamente inerte CH₃ está expuesto a la superficie de la molécula. Otros investigadores también han logrado obtener otros diversos compuestos poliméricos esféricos de sílice como siloxanos (Barry et al., 1955; Müller et al., 1959).

La condensación en agua del Si(OH)₄, el dímero, y el trímero con especies cíclicas, por ejemplo, el tetrámero, debe ocurrir al azar. Por lo tanto, no es probable que cualquier especie tridimensional completamente condensada internamente como el acido cubico octasilícico (HOSiO_{1.5})₈ se forme en apreciable cantidad. En su lugar, deben aparecer oligomeros tridimensionales incompletamente condensados. Posteriormente, después de que han aparecido polímeros de mayor peso molecular equivalentes a muy pequeñas partículas, los oligomeros mas solubles se despolimerizan o disuelven y la sílice disuelta se agrega a las partículas crecientes.

En este tipo de sistemas la polimerización en términos de formación de enlaces siloxano, es un proceso reversible. La concentración del ion OH⁻ que promueve la ionización y la condensación igualmente promueve la hidrólisis y la despolimerización.

Por lo tanto cada especie polimérica esta en equilibrio con una cierta concentración de monómero en solución. Las unidades poliméricas tridimensionales más grandes que los hexámeros de doble anillo de tres o especies similares pueden ser consideradas como el núcleo de una partícula. Un octámero policíclico o un decámero no es realmente una partícula de sílice ya que no tiene un núcleo de SiO₂ anhidro. Asi como el monómero condensa con los grupos SiOH en estos oligomeros ellos condensan consigo mismos hasta que el oligomero permanece como un núcleo de SiO₂ anhidro rodeado de una capa de sílice en la cual los átomos de silicio retienen grupos silanol dispuestos externamente como se muestra en la *Figura 2.24* (Iler, 1979).

En el estudio de modelos se ha encontrado que cuando el punto de partida para agregación adicional de monómeros es un oligomero como un octámero o un decámero, la geometría es tal que cuando el oligomero original está completamente condensado o cerca de formar el núcleo anhidro de SiO₂ rodeado de átomos de silicio formando la superficie hidroxilada, este ya contiene entre 40 y 50 átomos de silicio. Y es que una vez que se ha formado el núcleo, este crece por la adición de cualquier monómero que permanezca en solución y por la agregación de monómeros resultantes de la disolución de algunos oligomeros.

2.7 NUCLEACIÓN

El impulso de las teorías de nucleación inició con J.W. Gibbs (1906). Gran parte de los trabajos actuales (Antti, 2006; Benning y Waychunas, 2008) atribuyen el origen de la teoría clásica de la nucleación a Volmer and Weber (1925), Farkas (1927), Becker and Döring (1935), Zeldovich (1942), y Frenkel (1946).

La mayoría de las teorías de nucleación que existen se basan en dos puntos. El primero, la fase de transición está caracterizada por una distribución de equilibrio de clúster, dada por

$$N_n = N_1 \exp\left(-\frac{\Delta G(n)}{kT}\right) \tag{2.19}$$

Donde N_n representa el número de concentración de n-clústeres (clústeres consistentes de n moléculas), $\Delta G(n)$ es la energía libre de formación de un n-cluster, k es la constante de Boltzmann, y T es la temperatura (Band, 1939 a, b; Frenkel, 1939 b, a).

Y segundo, se considera que el sistema se encuentra en un estado pseudo estable donde la concentración de cada tamaño de clúster permanece constante.

La formulación de la teoría clásica de la nucleación depende de la termodinámica de equilibrio y el uso de determinadas propiedades macroscópicas.

La nucleación es el primer paso de una transición de fase de primer orden. Siempre surge una nueva fase en los fenómenos de nucleación. La nueva fase puede ser un gas, un líquido o un sólido. Las dos principales categorías de nucleación son la nucleación homogénea, donde se forma

una nueva fase en una sustancia uniforme, y la nucleación heterogénea, cuando se produce la nucleación sobre una superficie pre-existente (Antti, 2006).

2.7.1 NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA

La teoría de la nucleación homogénea no ha sido aparentemente aun desarrollada en una base cuantitativa, pero se han hecho algunas consideraciones entre el grado de supersaturación, la energía interfacial de la sílice con el agua, y el tamaño critico del núcleo.

El núcleo homogéneo se forma por condensación del monómero Si(OH)₄ cuando la supersaturación es suficientemente alta.

Una diferencia importante entre los sistemas de sílice-agua y otras soluciones acuosas de compuestos inorgánicos es que en el caso de la sílice ocurre una creación y rompimiento de enlaces siloxano por catalización, mientras que no existe el requisito de un catalizador para la nucleación y crecimiento de cristales iónicos o moleculares, como por ejemplo, el azúcar o BaSO₄.

La teoría clásica de la nucleación nos dice que esta ocurre generalmente con mucha más dificultad en el interior de una substancia uniforme, por un proceso llamado nucleación homogénea.

La forma más simple de nucleación homogénea es una donde solo una especie de moléculas se condensa para formar el núcleo. Este caso es llamado nucleación de un componente o nucleación homomolecular. La creación de un núcleo implica la formación de una interface en las fronteras de una nueva fase.

La nucleación depende del grado de enfriamiento de la sustancia en cuestión. Los líquidos enfriados por debajo de la temperatura máxima de nucleación heterogénea (temperatura de fusión), pero por arriba de la temperatura de nucleación homogénea (temperatura de congelación de una sustancia pura) son llamados súper-enfriados.

El súper-enfriamiento provoca la supersaturación, la fuerza motriz para la nucleación. La supersaturación ocurre cuando la presión del solido recién formado es menor que la presión del liquido, y provoca un cambio en la energía libre por unidad de volumen, ΔG_v , entre el liquido y la fase sólida creada. Este cambio en la energía libre es balanceado por la ganancia de energía de la creación de un nuevo volumen, y el costo de energía debido a la creación de una nueva interfase. Cuando el cambio global en la energía libre, ΔG , es negativo, la nucleación se favorece.

Algo de energía es consumido para formar una interfase, basado en la energía superficial de cada fase. Si un núcleo hipotético es muy pequeño (conocido como un núcleo inestable o "embrión"), la energía que sería liberada por la formación de su volumen no sería suficiente para crear su superficie, y la nucleación no procedería. El tamaño critico del núcleo puede ser indicado por su radio, y es cuando r=r* (o r critico) que la nucleación procede.

Por ejemplo en el caso clásico de un clúster esférico que libera $-\Delta G_v$ Joules por centímetro cubico durante la formación (donde ΔG_v es una cantidad negativa), pero que debe pagar el costo positivo

de o Joules por centímetro cuadrado de superficie interfacial con los alrededores, la energía libre necesario para formar un grupo esférico de radio r es (Abraham, 1974; Xu and Johnson, 2005),

$$\Delta G = \frac{4}{3}\pi r^3 \Delta G_v + 4\pi r^2 \sigma \tag{2.20}$$

Donde el primer termino muestra la ganancia de energía por la creación de un nuevo volumen y el segundo termino muestra la energía perdida debido a la tensión superficial (σ) de la nueva interfase.

Por otro lado, puede considerarse como un grupo consistente de n moléculas suspendidas en un vapor supersaturado. El grupo es considerado como una gota esférica uniforme e incompresible. Siendo ρ_l la densidad del numero de moléculas en el liquido. La energía libre de formación en la nucleación homogénea para el grupo está dada por (Yue and Hamill, 1979; Antti, 2006),

$$\Delta G_{hom} = n\Delta\mu + A\sigma_{lg} \tag{2.21}$$

Donde $\Delta \mu = \mu_l(p_g) - \mu_g(p_g)$, es la diferencia de los potenciales químicos en el líquido y el vapor, ambos tomados de la presión de vapor ambiente. $A = 4\pi r^2$ es el área superficial de la gota de radio r, y σ_{lg} es la energía libre interfacial por unidad de área, usualmente interpretado como la tensión superficial de la gota contra del vapor.

La ecuación anterior (2.21) puede entenderse como una competencia entre dos fuerzas: en el caso del vapor supersaturado el cambio del potencial químico $\Delta \mu$ es la energía liberada, p. ej., la fase liquida es energéticamente más favorable para las moléculas que la fase vapor. La energía liberada en la fase de transición del vapor al líquido está destinada a formar la interfaz de superficie entre la gota y el vapor.

Usando la ley del gas ideal, la energía libre de formación puede ser representada en una forma más convencional

$$\Delta G_{hom} = A\sigma_{lg} - \rho_l V_{hom} kT \ln S = 4\pi r^2 \sigma_{lg} - \frac{4}{3}\pi r^3 \rho_l kT \ln S$$
(2.22)

Donde T es la temperatura del vapor; r es el radio de la gota, $S = p_g/p_\infty$ es la razón de saturación, donde p_g es la presión del vapor y p_∞ es la presión de saturación del vapor sobre la superficie plana del líquido; y el número total de moléculas en un grupo es entonces $n = \rho_l V_{hom}$, donde V_{hom} es el volumen del grupo.

La energía libre de formación puede ser graficada como una función del radio o del número de moléculas en el grupo. La forma de la curva es tal que existe un punto máximo donde S > 1, como se muestra en la *Figura 2.25*.



Figura 2.25-Figura esquemática de la forma de la curva de energía libre de formación de un sistema de un componente como una función de (a) numero de moléculas en el grupo, y (b) radio del grupo [Figura modificada de (Antti, 2006)].

El costo de energía libre para agregar moléculas a un grupo (ya que dG/dr = 0) se congela hasta el punto de alcanzar un radio,

$$r^* = -\frac{2\sigma}{\Delta G_v} \tag{2.23}$$

Donde,

$$\frac{dG}{dr^*} = 0 \tag{2.24a}$$

La definición del radio critico r^* como el punto máximo de la formación de energía libre tal que

$$\frac{\partial \Delta G_{hom}^*}{\partial r^*}\Big|_S = 0 \tag{2.24b}$$

Permite el cálculo del radio critico por

$$r^* = -\frac{2\sigma_{lg}}{\rho_l kT \ln S} \tag{2.25}$$

La adición de nuevas moléculas a grupos más grandes que su radio crítico libera, en lugar de los costes, trabajo disponible. En otras palabras en ese punto el crecimiento del clúster ya no está limitado por la nucleación, pero tal vez por la difusión (p. ej. El suministro de moléculas) o por la cinética de la reacción en su lugar (Ham, 1959).

Sustituyendo el radio critico como $r^* = r$ en la expresión de la energía libre, obtenemos la definición de la teoría clásica de la energía libre critica de formación, la cual es llamada a menudo como la altura de la barrera de nucleación o la altura de la barrera energética, que no es más que la energía libre necesaria para la formación del radio critico.

$$\Delta G_{hom}^* = \frac{4}{3}\pi r^{*2}\sigma_{lg} \quad ; \quad \Delta G^* = \frac{16\pi\sigma^3}{3(\Delta G_v)^2}; \tag{2.26}$$

Esto ocurre a la máxima ΔG donde dG/dr = 0

El termino ΔG_{ν} puede relacionarse a la temperatura de equilibrio, la entalpia de fusión (ΔH_{ν}), y el grado de subenfriamiento (ΔT) de la siguiente manera

$$\Delta G_{\nu} = \Delta H_{\nu} - T \Delta S_{\nu} \tag{2.27a}$$

Evaluando esta ecuación en el punto de equilibrio ($\Delta G_v = 0$) a la temperatura de fusión T_m se obtiene

$$\Delta S_{v} = \frac{\Delta H_{v}}{T_{m}}$$
(2.27b)

Sustituyendo el valor de ΔS_v en ΔG_v

$$\Delta G_{v} = \Delta H_{v} - T\left(\frac{\Delta H_{v}}{T_{m}}\right)$$
(2.27c)

La cual usando comunes denominadores y la definición de $\Delta T = T_m - T$, resulta

$$\Delta G_{\nu} = \frac{\Delta H_{\nu}}{T_m} \Delta T \tag{2.27d}$$

Como la fase de transformación se hace más y más favorable, la formación de un volumen de núcleos dado libera suficiente energía para formar una superficie cada vez más grande, permitiendo ser viables núcleos progresivamente menores. Eventualmente, la activación térmica proveerá suficiente energía para formar núcleos estables. Estos pueden entonces crecer hasta que el equilibrio termodinámico sea restaurado.

Un mayor grado de súper-enfriamiento favorece la transformación de fase, y podemos relacionar ΔG^* al súper-enfriamiento y encontrar r^* y ΔG^* como una función de ΔT por la sustitución de ΔG_v

$$r^* = -\frac{2\sigma T_m}{\Delta H_v} \frac{1}{\Delta T}$$
(2.28)

Y

$$\Delta G^* = \frac{16\pi\sigma^3 T_m^2}{3\Delta H_v^2} \frac{1}{(\Delta T)^2}$$
(2.29)

Cuanto mayor sea el súper-enfriamiento, más pequeño será el radio critico y menor la energía necesaria para formarlo.

La tasa de nucleación espontanea en agua, por ejemplo, cambia muy rápidamente con la temperatura, asi que la temperatura de nucleación espontanea puede ser bastante bien definida.

La película de ebullición en superficies muy calientes y el efecto Leidenfrost se cree que son estabilizados por el fenómeno de nucleación espontanea.

2.7.2 NUCLEACIÓN HETEROGÉNEA

En la mayoría de los sistemas la nucleación heterogénea es difícil de evitar debido a la presencia de pequeñas impurezas en suspensión, pero este no es el caso con la sílice. Es, por supuesto, posible suministrar partículas con un área superficial más receptiva, tal como un oxido metálico finamente dividido o sílice misma a una solución de monómero y asi prevenir la auto nucleación. Sin embargo, a menos que se agregue deliberadamente material coloidal, una solución supersaturada de sílice sufre una nucleación homogénea espontanea que parece ser no afectada por las pequeñas cantidades de materia extraña.

La principal diferencia entre la nucleación homogénea y la heterogénea es la geometría del sistema, la teoría clásica de la nucleación homogénea trata la forma de la gota como un objeto esférico. En el caso de la heterogénea, la formación del embrión se considera parte de una esfera unida a la superficie del sustrato. Al igual que en el caso homogéneo, se considera el grupo como un líquido uniforme incompresible. La forma del grupo es una parte de una esfera con la base unida a la superficie insoluble. El ángulo θ entre la superficie del embrión y la superficie del sustrato es llamado ángulo de contacto. El radio crítico en la nucleación heterogénea es el mismo que en la nucleación homogénea, ya que solo depende de la supersaturación del vapor.

Según la teoría clásica de la nucleación, la nucleación heterogénea ocurre mucho más a menudo que la homogénea. Se forma en sitios preferenciales tales como los límites o fronteras de fase o impurezas como polvo y requiere menos energía que la nucleación homogénea. Esto se debe a que en tales sitios preferenciales, la energía de superficie efectiva es menor, disminuyendo asi la barrera de la energía libre y facilitando la nucleación. Las superficies promueven la nucleación debido a los ángulos de contacto-húmedo mayores a cero entre las fases estimulando a las partículas a nuclearse. La energía libre necesaria para la nucleación heterogénea es igual al producto de la nucleación homogénea y una función del ángulo de contacto:

$$\Delta G_{heterogenea} = \Delta G_{homogenea} \times f(\theta)$$
 (2.30)

Donde

$$f(\theta) = \frac{1}{2} - \frac{3}{4}\cos\theta + \frac{1}{4}\cos^{3}\theta$$
 (2.31)

De acuerdo a la teoría clásica de la nucleación, el balance de la cohesión entre los átomos de silicio en el clúster y la adhesión entre el silicio y la superficie extraña determina la forma del núcleo. Para altas energías de adhesión, el núcleo se extenderá sobre el sustrato extraño; para fuerzas de cohesión elevadas, el núcleo tendrá una forma más o menos esférica la cual se asemejara a la de la nucleación homogénea (Bloem and Giling, 1978). Vista desde otro punto, la nucleación heterogénea, es el cambio de energía libre neta de la formación de un embrión de silicio en forma de capuchón sobre el sustrato, teniendo en cuenta los términos de energía interfacial netas y el cambio de energía libre de volumen es (Sigsbee, 1969)

$$\Delta G = -\frac{4}{3}\pi r^3 \left(\frac{kT}{\nu}\ln\frac{p}{p_0}\right) \left[\frac{(2-3\cos\theta+\cos^3\theta)}{4}\right] + 4\pi r^2 \left[(1-\cos\theta)/2\right]\sigma_{gn} + \pi r^2 \sin^2\theta \left(\sigma_{sn} - \sigma_{sg}\right),$$
(2.32)

Donde r es el radio del embrión de silicio, $kT \ln p/p_0$ es la función de supersaturación, σ_{gn} , σ_{sn} y σ_{sg} son las fuerzas interfaciales entre el núcleo y la fase gaseosa, el sustrato y el núcleo, y el sustrato y la fase gaseosa, respectivamente, y θ es el ángulo de contacto (Dhanasekaran and Ramasamy, 1985). La energía libre de formación del núcleo crítico es:

$$\Delta G^* = \frac{16\pi \sigma_{g_0}^3 v^2}{3(kT \ln p/p_0)^2} \phi(\theta) ; \qquad (2.33)$$

Donde

$$\phi(\theta) = (2 - 3\cos\theta + \cos^3\theta)/4 \tag{2.34}$$

La posición epitaxial del núcleo tendrá un menor ángulo de contacto θ (Xu and Johnson, 2005) en el sustrato extraño y consecuentemente un menor valor de la energía de formación del núcleo. Esta energía de formación a su vez depende fuertemente de la supersaturación.

La siguiente sección, referente a la nucleación heterogénea fue tomada de un trabajo realizado por Antti (2006), en este trabajo se explican de manera breve pero concisa los efectos de las morfologías de las superficies de los sustratos en la energía libre.

La superficie del sustrato es comunmente considerada como homogénea, aunque existen algunos estudios en superficies no uniformes (Edwards et al., 1962; Fletcher, 1969; Lazaridis et al., 1992) Pueden considerarse 2 formas principales de superficies, plana y esférica. La *Figura 2.26* ilustra los núcleos en estas superficies.



Figura 2.26-Teoría clásica de la geometría del embrión en un sustrato de superficie (a) plana y (b) esférica [Figura modificada de (Antti, 2006)].

Para el caso de una superficie plana, el embrión liquido forma un segmento de esfera. El volumen (V_{het}) , el área de la base (A_{sl}) , y el área de la tapa (A_{lg}) del segmento están expresados como funciones del radio del embrión y el ángulo de contacto como

$$V_{het} = \frac{\pi}{3} r^3 (2 + \cos\theta) (1 - \cos\theta)^2, \qquad (2.35)$$

$$A_{lg} = 2\pi r^2 (1 - \cos\theta),$$
 (2.36)

$$A_{sl} = \pi r^2 (1 - \cos^2 \theta).$$
 (2.37)

La relación de los volúmenes de la gota en el sustrato y una gota esférica es

$$\frac{V_{het}}{V_{hom}} = f(m) = \frac{n_{het}}{n_{hom}},$$
(2.38)

Donde $f(m) = (2 + m)(1 - m)^2/4$ es llamado el parámetro de contacto, y $m = \cos \theta$.

En la teoría clásica la barrera energética para la nucleación heterogénea está dada por (Fletcher, 1962)

$$\Delta G_{het} = \rho_l \Delta \mu V_{het} + \sigma_{lg} A_{lg} + (\sigma_{sl} - \sigma_{sg}) A_{sl}, \qquad (2.39)$$

Donde μ es el potencial químico, σ es la energía libre interfacial por unidad de área, V_{het} es el volumen del grupo, y A es el área superficial del clúster. Los subíndices l, g, y s corresponden a las fases del liquido y el vapor y a la superficie del sustrato, respectivamente.

Si tomamos las ecuaciones para el volumen y áreas y las introducimos en la ecuación de la teoría clásica obtenemos

$$\Delta G_{het} = \Delta G_{hom} f(m) \tag{2.40}$$

Puede verse claramente que el factor que representa la relación entre las barreras energéticas en la nucleación homogénea y heterogénea es el mismo que el parámetro de contacto (la relación de los volúmenes) en la ecuación (2.37).

En el caso de un sustrato esférico, el volumen, el área de la base, y el área de la tapa están dados por (Fletcher, 1958)

$$V_{het} = \frac{1}{3}\pi r^3 (2 - 3\cos\psi + \cos^3\psi) - \frac{1}{3}\pi R_p^3 (2 - 3\cos\varphi + \cos^3\varphi), \quad (2.41)$$

$$A_{lg} = 2\pi r^2 (1 - \cos \psi), \, y \tag{2.42}$$

$$A_{sl} = 2\pi R_p^2 (1 - \cos \phi)$$
 (2.43)

Donde R_p es el radio de la partícula preexistente, y los cosenos de los ángulos ϕ y ψ , mostrados en la *Figura 2.26* están dados por

$$\cos\phi = (R_p - r\cos\theta)/d = (R_p - rm)/d, \, y \tag{2.44}$$

$$\cos\psi = -(r - R_p \cos\theta)/d = -(r - R_p m)/d$$
(2.45)

Donde

$$d = \left(R_p^2 + r^2 - 2rR_pm\right)^{1/2}$$
(2.46)

Donde *m* es de nuevo el coseno del ángulo de contacto θ . Siguiendo el mismo procedimiento como en el caso del sustrato plano, insertamos las ecuaciones anteriores (2.40-2.45) en la ecuación general y generamos la ecuación de energía libre para el caso de la superficie de sustrato esférico

$$\Delta G_{het} = \frac{1}{2} \Delta G_{hom} f(m, z)$$
(2.47)

Debe notarse que en el caso de la superficie de sustrato esférica, el parámetro de contacto no es igual a la relación de los volúmenes del embrión y una esfera completa del mismo radio $(f(m, z) \neq V_{het}/V_{hom})$. La energía libre de formación crítica obviamente se desprende de la ecuación anterior (2.46)

$$\Delta G_{het}^* = \frac{1}{2} \Delta G_{hom}^* f(m, z) = \frac{2}{3} \pi r^{*2} \sigma_{lg} f(m, z)$$
(2.48)

Donde f(m, z),el parámetro de contacto, es diferente comparado al del caso del sustrato plano, dependiendo de la relación de la partícula sembrada y los radios del embrión:

$$f(m,z) = 1 + \left(\frac{1-mz}{g}\right)^3 + z^3 \left[2 - 3\left(\frac{z-m}{g}\right) + \left(\frac{z-m}{g}\right)^3\right] + 3mz^2 \left(\frac{z-m}{g} - 1\right)$$
(2.49a)

Con

$$g = (1 + z^2 - 2mz)^{1/2}$$
(2.49b)

Y

$$z = \frac{R_p}{r^*} \tag{2.49c}$$

Asi, de acuerdo a la teoría clásica de la nucleación, la energía libre de formación en la nucleación homogénea y heterogénea difieren por el factor del parámetro de contacto.

La barrera energética necesaria para la nucleación heterogénea es reducida, y se requiere un menor súper-enfriamiento. El ángulo de humectación o de contacto determina la facilidad de la nucleación por la reducción de la energía necesaria. El volumen puede ser significantemente menor para la nucleación heterogénea debido al ángulo de contacto que afecta la forma del grupo.

En el caso de la nucleación heterogénea, se libera algo de energía por la destrucción parcial de la interfaz previa. Por ejemplo, si una burbuja de dióxido de carbono se forma entre el agua y el interior de una botella, la energía inherente en la interfaz agua-botella se libera siempre que una capa de gas intervenga, y esta energía va hacia la formación de las interfaces burbuja-agua y burbuja-bote. El mismo efecto puede causar la precipitación de partículas para formar granos en las fronteras de un sólido. Esto puede interferir con el fortalecimiento de la precipitación, que se basa en la nucleación homogénea para producir una distribución uniforme de las partículas de precipitado.

2.7.3 TASA DE NUCLEACIÓN

La tasa de nucleación, *I*, depende del promedio de grupos críticos, n^* y la difusión de las moléculas en el clúster, β .

$$I = n^* \beta \tag{2.50}$$

Donde el promedio de la población promedio de núcleos críticos es

$$n^* = N \exp\left(\frac{-\Delta G^*}{k_B T}\right) \tag{2.51}$$

Donde:

- ΔG^* es la energía libre critica necesaria correspondiente al radio critico.
- *N* es el numero de sitios de nucleación potenciales por unidad de volumen.
- k_B es la constante de Boltzmann.

Esto también puede entenderse como la concentración de núcleos críticos teniendo n^* átomos de silicio formados en el sustrato tal que

$$\frac{C(n^*)}{C_s} = \left(\frac{C(1)}{C_s}\right)^{n^*} \exp(-\Delta G^*/kT)$$
(2.52)

Donde C_s es el número de sitios en el sustrato y C(1) es la concentración del monómero (Dhanasekaran and Ramasamy, 1985).

Ahora bien, la expresión genérica para la tasa de nucleación J en todos los fenómenos de nucleación es (Antti, 2006)

$$J = KZN^* \tag{2.53}$$

Donde K es un prefactor cinético, Z es el factor de no equilibrio de Zeldovich, y N^* es la concentración de equilibrio de los grupos críticos. El cálculo de la concentración de equilibrio de los grupos críticos incluye la distribución de equilibrio de los grupos para dar como resultado una expresión de la tasa de nucleación en términos de la energía libre crítica de formación:

$$J = KZN_1 \exp\left(-\frac{\Delta G^*}{kT}\right)$$
(2.54)

El número de clústers formados de un tamaño determinado es una función del número total de átomos en el sistema, la energía libre para crear un clúster (de dicho tamaño), y la temperatura.

La tasa de adición de un átomo extra al núcleo critico se estima con la teoría de Volmer-Weber como

$$B = A \exp\left(\frac{-(Q + \Delta G^*)}{k_B T}\right)$$
(2.55)

Donde A es un término que incorpora el factor de forma de los átomos y el área a la cual los átomos pueden unirse, y la frecuencia de vibración de las partículas. Y Q es la energía de activación para la migración atómica.

Este término nos da la difusión de los átomos en el sitio de nucleación. Sin embargo, un problema con la teoría de Volmer-Weber es que ignora la formación de partículas de $r > r^*$ y asume que la distribución de tamaño se mantiene (las fluctuaciones son muy rápidas).

La tasa de nucleación puede ser expresada como:

$$I(T) = A \exp\left(\frac{-Q}{kT}\right) \exp\left(\frac{-16\pi\gamma_{sl}^3}{3\Delta H_s^2} \cdot \frac{1}{kT} \cdot \frac{T_m^2}{\Delta T^2} \cdot f(\theta)\right)$$
(2.56)

Donde:

| γ | es la tensión superficial |
|--------------|--|
| ΔH_s | es la entalpia por unidad de volumen |
| T_m | es la temperatura de fusión |
| θ | es el ángulo de humectación o de contacto. |

A muy bajas temperaturas la tasa de difusión es baja. Si la temperatura se incrementa, la tasa de difusión incrementa; las moléculas son capaces de llegar al sitio de nucleación a un ritmo suficientemente rápido como para promover el crecimiento del núcleo.

A temperaturas significativamente por debajo de la temperatura de fusión, la fluctuación de moléculas es muy baja; las moléculas están en un estado de baja energía y no poseen suficiente energía para moverse y nuclearse. La tasa de nucleación está dominada así por la difusión. Sin embrago, asi como la temperatura incrementa, las fluctuaciones moleculares incrementan y las moléculas tienden a escapar del núcleo, causando un decremento en la tasa de nucleación.

El tiempo requerido para un estado de nucleación estable se conoce como au y puede calcularse como (Fokin et al., 2005)

$$\tau = \frac{16h}{\pi} \frac{\sigma}{\Delta G_v^2 a^4} \exp\left(\frac{\Delta G}{k_B T}\right)$$
(2.57)

Donde:

a es el tamaño promedio de partícula.

Retomando la ecuación (2.54), el prefactor cinético K, en el caso de la nucleación homogénea, es simplemente la tasa de condensación promedio R_{av} (debe notarse que en la literatura el término prefactor cinético a menudo incluye tanto a la tasa de concentración promedio como al factor de no equilibrio de Zeldovich).

Existen 2 enfoques para modelar el crecimiento en la teoría clásica de la nucleación heterogénea. El primero es cuando las moléculas se absorben en un embrión en la superficie del sustrato por deposición directa, y el segundo es por difusión superficial (Pruppacher and Klett, 1997). En la siguiente descripción se asumirá que el mecanismo de crecimiento se da por el modelo de deposición directa (Antti, 2006).

Hamill et al. (1982) formuló una expresión para la tasa de nucleación cuando partículas solidas muy pequeñas actúan como núcleos de condensación. Entonces las partículas semilla son tratadas como monómeros, resultando en

$$J_{het}^{Ham\,ill} = R_{av} N_{par} Z \exp\left(-\frac{\Delta G_{het}^*}{kT}\right)$$
(2.58)

Donde:

$$N_{par}$$
 es la concentración de partículas semilla.

Otro enfoque incluye el mecanismo de adsorción a través del número total de moléculas adsorbidas por unidad de área en el núcleo sólido:

$$N^{ads} = \sum_{i} (\beta_i \tau_i) \tag{2.59}$$

Donde β_i es la tasa de incidencia de moléculas de *i* especies en la superficie de la partícula solida, y τ_i es el tiempo de residencia, es decir, el tiempo que una molécula de la especie *i* pasa en la superficie.

La tasa de incidencia puede ser interpretada como el coeficiente de condensación de la especie *i*, dado por

$$\beta_i = N_i \sqrt{\frac{kT}{2\pi M_i}} \tag{2.60}$$

Donde M_i es la masa molecular de la especie i.

La velocidad mínima de nucleación se calcula suponiendo que la nucleación heterogénea ocurre solo cuando toda la partícula está cubierta por los núcleos críticos:

$$J_{het}^{min} = \pi r^{*2} N^{ads} R_{av} Z N_{par} \exp\left(-\frac{\Delta G_{het}^*}{kT}\right)$$
(2.61)

Por otro lado, la tasa de nucleación máxima corresponde a la tasa de formación de un solo grupo crítico sobre la partícula.

$$J_{het}^{max} = 4\pi R_p^2 N^{ads} R_{av} Z N_{par} \exp\left(-\frac{\Delta G_{het}^*}{kT}\right)$$
(2.62)

En la nucleación heterogénea binaria de compuestos a y b, la tasa de condensación promedio R_{av} esta dada por

$$R_{a\nu} = \frac{A_{lg}\beta_a\beta_b}{\beta_a\sin^2\chi + \beta_b\cos^2\chi}$$
(2.63)

Donde A_{lg} es el área superficial del embrión enterrado en la superficie de una partícula preexistente, $\chi \approx \arctan(x/(1-x))$, y x es la fracción mol de las especies b en el núcleo (Kulmala and Laaksonen, 1990). El ángulo χ corresponde a la dirección más favorable de crecimiento del clúster en el sistema coordenado (n_a, n_b) .

La definición del tercer término en la ecuación general de la tasa de nucleación (2.58), llamado el factor de no equilibrio de Zeldovich, es (Pruppacher and Klett, 1997)

$$Z = \left[-\frac{1}{2\pi kT} \left(\frac{\partial \Delta G^*}{\partial n^{*2}} \right) \right]^{1/2}$$
(2.64)

Donde:

 n^* es el número de moléculas en el clúster critico.

En el prefactor cinético de la tasa de nucleación homogénea, el factor de Zeldovich puede ser escrito como

$$Z_{hom} = \left(\frac{\Delta G^*}{3\pi kT n^{*2}}\right)^{1/2} = \frac{v_{1l}}{2\pi r^{*2}} \left(\frac{\sigma_{lg}}{kT}\right)^{1/2}$$
(2.65)

Donde v_{1l} es el volumen molecular de un monómero en la fase liquida.

La formulación exacta de Z en la nucleación heterogénea involucra la geometría del sistema. En un sustrato de superficie esférica el factor de Zeldovich se lee como (Vehkamäki et al., 2006):

$$Z_{het} = \frac{v_{1l}}{\pi r^{*2}} \left(\frac{\sigma_{lg}}{kT}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{2 + \frac{(1-mz)[2-4mz-(m^2-3)z^2]}{(1-2mz+z^2)^{3/2}}}\right)^{1/2}$$
(2.66a)
$$= Z_{hom} \left(\frac{4}{2 + \frac{(1-mz)[2-4mz-(m^2-3)z^2]}{(1-2mz+z^2)^{3/2}}}\right)^{1/2}$$
(2.66b)

Varias parametrizaciones se han construido para obtener las velocidades de nucleación aproximadas para diversos compuestos seleccionados (Vehkamäki et al., 2002; Napari et al., 2002; Kerminen et al., 2004; Sorokin et al., 2005; Modgil et al., 2005; Yu, 2006). Usando los modelos parametrizados es posible calcular la velocidad de nucleación como una función de la temperatura y las concentraciones de los compuestos que participan en el proceso de nucleación.

Ahora bien, debido a varias suposiciones injustificadas realizadas por la teoría clásica de la nucleación, se ha limitado su aplicación a la solución de problemas prácticos cuando se comparan con datos experimentales. Las limitaciones surgen principalmente pues dicha teoría asume que las propiedades macroscópicas de las moléculas pueden ser aplicadas a las actividades microscópicas. Esto puede ser un inconveniente importante cuando tratamos con características como la densidad, tensión superficial, y presión de saturación de vapor de grupos consistentes de solo

varias decenas de moléculas. La teoría clásica de la nucleación tampoco toma en cuenta la interacción de las partículas alrededor de los núcleos, lo que conduce a la termodinámica.

En décadas recientes, debido al incremento en la exactitud de los resultados experimentales se han desarrollado modelos de nucleación más exactos; uno de ellos que ha tenido cierta aceptación es la teoría de nucleación auto consiente (Girshick and Chiu, 1990). De acuerdo a esta teoría,

$$\Delta G = (4\pi r^2)\sigma - (n-1)k_B T \ln S \tag{2.67}$$

Donde:

| ΔG | es la energía libre critica necesaria |
|-----------------|---------------------------------------|
| k_B | es la constante de Boltzmann |
| $S = p_v / p_o$ | es la supersaturación |
| S | es el área superficial de un monómero |

Bajo esta teoría, la tasa de nucleación es entonces

$$I_{SCT} = \frac{\exp\left(\sigma_s/k_BT\right)}{S}I$$
(2.68)

Donde *I* es la tasa calculada de la teoría clásica. El coeficiente exponencial en la ecuación toma en cuenta la energía superficial del monómero.

Otra teoría moderna de la nucleación que se ha vuelto popular es la de Dillmann-Meier donde el cambio de la energía libre se expresa como

$$\Delta G = k_n \sigma s n^{2/3} + \tau k_B T \ln n - k_B T \ln Q_o V - n k_B T \ln S$$
(2.69)

Donde:

 τ , k_n y Q_o son coeficientes ajustables del modelo V es el volumen del sistema.

El coeficiente k_n refleja la diferencia entre las energías de superficie del grupo y la gota liquida macroscópica y está representado en el primer término de la ecuación. El segundo y tercer términos toman en cuenta los grados de libertad traslacionales, vibracionales y rotacionales de la gota. Finalmente el cuarto término considera la relajación del estado metaestable. Varios científicos creen que esta ecuación toma en cuenta todas las contribuciones significantes a la energía de la formación del clúster (Anisimov, 2003).

2.8 MECANISMOS DE DEPOSICIÓN

2.8.1 MONOMÉRICA

La deposición de sílice monomérica involucra un mecanismo muy diferente del de la deposición de partículas coloidales. La sílice monomérica forma una película impermeable como cristal, mientras que las partículas coloidales forman una película porosa, a menudo blanca y opaca cuando seca.

En un intervalo intermedio, donde las partículas son menores a aproximadamente 50 Å de diámetro, esto es, aproximándose a las dimensiones moleculares, la capa es clara y los poros en la masa de empaquetamiento compacto de partículas pueden ser tan pequeños que solo el agua y ciertos iones pueden penetrarlos. Esta región límite ha sido poco explorada.

La sílice monomérica puede producirse de una solución supersaturada de tres maneras:

1-Como un depósito en una superficie solida:

El Si(OH)₄ condensa con cualquier superficie solida preexistente que soporte grupos OH con los cuales pueda reaccionar, es decir, SiOH, o cualquier superficie MOH, donde M es un metal que formara un silicato en el pH implicado. Una vez que la superficie receptora está cubierta por la reacción, la demás deposición es sílice sobre sílice, formándose asi una película.



2-Como partículas coloidales que permanecen en suspensión:

Si se dispone de un área solida receptora insuficiente para aceptar la sílice rápidamente, y si la concentración de $Si(OH)_4$ es mayor a 200-300 ppm (dependiendo del pH), la polimerización ocurre primero con la formación de polímeros bajos como el tetrámero cíclico; entonces estos condensan aun mas para formar pequeños polímeros tridimensionales los cuales son partículas coloidales.

3-Como sílice amorfa biogénica:

Por mecanismos aun desconocidos, organismos vivientes pueden remover sílice de soluciones extremadamente diluidas y depositar sílice solida dentro de sí mismos en estructuras controladas con precisión de intrincado diseño, perfecto casi a dimensiones moleculares.

Inicialmente debe enfatizarse el hecho de que sin tomar en cuenta el tipo de material sobre el cual la sílice es depositada, después de que haya sido adsorbida más de una capa monomolecular de sílice, la demás deposición de sílice es siempre en una superficie de sílice. Es obvio que, por lo tanto, al principio el sustrato debe ser receptivo con respecto a la sílice monomérica a pH 8-10, donde la deposición es llevada a cabo.

Las superficies hidrofóbicas no son receptivas y deben ser transformadas a hidrofílicas por adsorción de un surfactante catiónico o un polímero u otros medios. Las superficies cargadas negativamente tampoco son receptivas pero pueden hacerse por los bien conocidos métodos usados para preparar superficies para deposición de metales, como el tratamiento con solución de cloruro estanoso. Tales superficies también pueden ser tratadas con sales de metales polibásicos de fierro o aluminio, las cuales se sabe que invierten la carga de las superficies negativas.

Las superficies neutras hidrofílicas como la celulosa no son muy receptivas, pero pueden serlo si son tratadas con mordantes inorgánicos convencionales.

Todos los óxidos metalicos insolubles y los silicatos incluyendo la mayoría de los materiales refractarios y los vidrios parecen ser buenos receptores de sílice. Tan pronto como la superficie receptora es sumergida en una solución supersaturada de sílice, se forma en ella una monocapa de sílice, probablemente como iones silicato. Mientras más supersaturada la solución la tasa de deposición será mayor. Ya que la reacción de condensación es catalizada por iones hidróxido, la deposición es llevada a cabo siempre arriba de pH 8 y se acelera a mayores pH. La presencia de electrolitos monovalentes como NaCl sin duda acelerará la deposición.

Si la concentración de sílice monomérica es muy alta, polimeriza consigo misma, formando partículas de sílice o núcleos sobre los cuales la sílice también se deposita. Ya que estas partículas tienen un área superficial especifica muy alta, la mayoría de la sílice disuelta es entonces depositada en estas partículas coloidales, asi como en el sustrato.

El pH no debe pasar de aproximadamente 11 o toda la sílice será disuelta como silicato soluble, y no debe caer debajo de aproximadamente 8, ya que la tasa de deposición será lenta.

La deposición de una película impermeable de sílice en una amplia variedad de superficies ha sido estudiada en detalle por Iler (1959).

2.8.2 MOLECULAR

El mecanismo de la deposición molecular del SiO_2 de $Si(OH)_4$ es aparentemente el inverso a la disolución de sílice solida. Involucra una reacción de condensación catalizada por iones hidróxido y es acelerada por la presencia de sales. El proceso por lo tanto acurre arriba de un pH de 7, ya que es catalizado por iones hidroxilo, pero obviamente no por arriba de pH de 11 donde la sílice se disuelve como ion silicato. La deposición es más rápida y la condensación y deshidratación de la sílice son más completas en soluciones calientes.

La sílice puede ser depositada molecularmente de una solución acuosa supersaturada. La supersaturación puede alcanzarse por medio de alguno de los siguientes procesos: (1) Concentrando una solución subsaturada por evaporación del agua; (2)Enfriando una solución

caliente saturada; (3) Disminuyendo el pH de una solución acuosa de un silicato soluble por debajo de aproximadamente 10.7; (4) Generando Si(OH)₄ en agua por hidrolización de un compuesto de silicio monomérico tal como un éster, Si(OR)₄, el hidruro SiH₄, el sulfuro SiS₂, el haluro SiCl₄, o incluso silicio elemental finamente dividido.

El depósito de sílice, cuando se establece monomolecularmente, es no poroso y probablemente impermeable como sílice vítrea. El grado de supersaturación debe ser suficiente para que ocurra la deposición, pero no debe ser demasiado mayor para permitir la formación de partículas, o el proceso se vuelva muy ineficiente (Iler, 1959).

2.8.3 COLOIDAL

El termino sílice coloidal se refiere a dispersiones estables o soles de partículas discretas de sílice amorfa. Por definición arbitraria, el termino excluye las soluciones de acido silícico en las que las moléculas poliméricas o partículas son tan pequeñas que no son estables. Tales soluciones, que son usualmente obtenidas por acidificación de soluciones de silicato de sodio o por hidrólisis de esteres de silicio o haluros a temperaturas ordinarias, son precursores de partículas coloidales.

Los soles de sílice concentrados estables que no gelifican o sedimentan por varios años se hicieron disponibles en 1940, cuando se aprendió como hacer partículas coloidales uniformes mayores a 5 nm de diámetro, estabilizándolos con una cantidad optima de base. En este caso, el acido silícico polimeriza para formar partículas discretas en un intervalo de pH de 7-10, donde la agregación no ocurre si la concentración de electrolitos en menor a 0.1-0.2 N, dependiendo de la concentración de sílice.

La deposición coloidal de la sílice ocurre por un proceso enteramente diferente a otros. En este caso, los depósitos en superficies solidas se forman por alguno o todos los siguientes procesos:

1-Alternar la humectación y secado de un sol diluido puede construir una capa adherente. Una vez que las partículas secas en la superficie están irreversiblemente enlazadas, se pueden construir películas duras, especialmente si cada capa adicional de sílice es de solo unas cuantas partículas de grosor. La mayoría de los depósitos de silicio que se forman en la línea de flotación en las aguas termales son formados de esta manera.

2-La deposición de partículas coloidales en una superficie de un sol diluido puede ocurrir cuando las condiciones de pH y la concentración de la sal son cercanas a las cuales causan la coagulación o la precipitación. La deposición ocurre cuando las partículas coloidales chocan y se combinan con la superficie solida de sílice. La concentración del coloide debe ser convenientemente baja ya que bajo estas condiciones un sol concentrado podría coagular o gelificar rápidamente, y no se obtendrían recubrimientos. Esto es un tanto análogo a la deposición molecular, en que la concentración de la sílice debe no ser tan alta que las partículas colisionen y se adhieran unas con otras en lugar de a la superficie solida.

La deposición de coloides es enormemente acelerada y los depósitos son mucho más densos y duros cuando la sílice soluble es depositada junto con las partículas coloidales. Algunas aguas

termales contienen sílice disuelta en equilibrio con la sílice coloidal, y algunas sales disueltas. Cuando la solución se enfría, las partículas coloidales se depositan en superficies solidas al mismo tiempo que las solución enfriada se convierte en supersaturada con sílice, la cual es entonces depositada en la capa de partículas coloidales depositadas, cementándose juntos.

La mayoría de los depósitos de sílice son probablemente generados de seste modo. Pueden ser muy duros y muy adhesivos, sin embargo son microporosos, ya que usualmente no existe suficiente sílice molecular o soluble presente para llenar los poros entre las partículas coloidales. En la naturaleza, casi cualquier conjunto de condiciones imaginables puede ocurrir en un momento u otro. La deposición adicional de sílice molecular puede ocurrir hasta que el depósito silíceo se vuelva completamente impermeable. Este efecto es visto en algunos ópalos y en las paredes de geodas.

Por otra parte, cuando la sílice es depositada molecularmente, la sílice solida resultante contiene agua en pequeñas cantidades o en forma no adsorbida y unos cuantos grupos silanol internos. Es muy similar a la sílice vítrea o cuarzo fundido, como es comunmente pero erróneamente llamado.

Existen algunas situaciones, como en el manejo del equipo de salmueras geotérmicas calientes, donde los líquidos enfriados depositan sílice órdenes de magnitud más rápido de lo que es posible por la deposición molecular de sílice. Cada depósito esta invariablemente hidratado, y aunque a menudo son muy duros, tienen una estructura microporosa. Una tasa de acumulación alta será lo más obvio si el peso molecular de las partículas corresponde al de miles (varios nanómetros de diámetro) siendo depositadas en lugar de unidades individuales de SiO₂. También se esperara porosidad correspondiente a los espacios entre las partículas coloidales.

Existe una diferencia principal en los mecanismos: la deposición coloidal de partículas requiere la presencia de un agente coagulante potencial, usualmente pequeñas concentraciones de iones metalicos polivalentes, aunque los iones monovalentes como el sodio tienen un efecto similar a una concentración de arriba de aproximadamente 0.3 N. En ausencia de iones floculantes, en soluciones neutras o alcalinas, una partícula coloidal de sílice pura posee una carga negativa y también lo hace la superficie de la sílice del sustrato. Existe una repulsión mutua tal que la tasa de colisión es baja. Sin embargo, en este intervalo de pH los iones metálicos son adsorbidos en las superficies de sílice en algún grado y tras la colisión, la adhesión sucede. Para que la deposición en una superficie ocurra, los iones metalicos no deben estar presentes en tales concentraciones como para coagular las partículas coloidales en suspensión. (*ver Figura 2.27*)

Es probable que la deposición sea inusualmente rápida cuando las partículas coloidales son menores a 5 nm de diámetro. Tal tamaño de partícula está en equilibrio con la concentración del monómero que esta supersaturado con respecto a una superficie plana. Por lo tanto, como se muestra en la *Figura 2.27*, la superficie de la sílice depositada se llena rápidamente de modo que el radio de curvatura es mucho mayor que el de las partículas coloidales. En efecto, la superficie tiende a ser llenada y aplanada. Este es un factor importante en la deposición rápida debido a que

es mucho más probable que las pequeñas partículas coloidales se adhieran a la superficie que una a otra en suspensión.

También, la presencia de pequeñas partículas coloidales, especialmente en un sol caliente que este siendo enfriado, proporcionan un alto grado de supersaturación que causa la rápida polimerización del monómero al momento del contacto entre partícula y superficie (*ver Figura 2.27*), incrementando asi la tasa de deposición más allá de la iniciada por los cationes divalentes.





Figura 2.27-Acción floculante del ion calcio seguido por el efecto de cementación espontánea a través de la disolución y re-deposición de la sílice soluble [Figura modificada de (Iler, 1979)].

3. ESTADO DEL ARTE EN MATERIA DE PREVENCIÓN Y CORRECCIÓN DE INCRUSTACIONES

La precipitación, o incrustación, es uno de los principales problemas en la extracción de la energía geotérmica. Los minerales pueden precipitar dependiendo de la composición de la roca y la salmuera inyectada. En los campos geotérmicos, se ha observado la precipitación de minerales como sílice, calcita, carbonato de calcio, anhidrita, sulfuros metalicos, y minerales férricos, alrededor de pozos inyectores y tuberías (Ngothai et al., 2010).

El control de las incrustaciones y la corrosión son grandes retos en la utilización de energía geotérmica. En los pozos productores, durante o después del flasheo, la salmuera aumenta su pH, lo que puede pasar en lo profundo dentro del pozo. Un pH elevado en combinación con alta temperatura causa la precipitación del carbonato de calcio (Gill, 2011).

En el campo geotérmico de Lihir, Papua, Nueva Guinea, se han implementado diversos inhibidores en sistemas anti-incrustaciones con resultados bastante satisfactorios (Mejorada et al., 2011).

La precipitación de sílice o silicatos se vuelve un problema cuando la salmuera se enfría en los equipos de superficie y en los pozos reinyectores. Los pozos bloqueados debido a las incrustaciones requieren fuertes sumas de dinero para rehabilitarlos o en el peor de los casos para perforar nuevos (Gill, 2011).

Se han demostrado e implementado de manera exitosa diferentes programas de control y tratamiento de incrustaciones para diferentes tipos de depósitos encontrados en la producción de energía geotérmica, incluyendo calcita y silicatos metalicos. Recientemente, la inhibición de minerales de arcilla también ha sido demostrada.

El sulfuro de hidrogeno que se encuentra en cantidades mínimas en las salmueras geotérmicas puede ser reducido mediante el uso de depuradores u otros medios químicos.

El control de las incrustaciones de sílice ha resultado un mayor reto, en varios casos, se limita a una modificación en el pH. Los tratamientos químicos desarrollados para el control de silicatos metalicos tienen un efecto limitado contra la sílice pues la formación de depósitos de sílice involucra diferentes mecanismos y está controlada por diferentes factores. Una nueva clase de inhibidores diferentes a los químicos usados para inhibir los silicatos metalicos, han sido identificados y están siendo calificados para pruebas de campo.

Los trabajos de modelado computacional sugieren que el regreso de dióxido de carbono a los fluidos evaporados puede controlar la deposición de escamas de silicatos metalicos en los intercambiadores de calor de las plantas de ciclo combinado lo que reduce o elimina por completo la necesidad de inhibidores para silicatos (Stapleton and Weres, 2011).

Después de más de 40 años de investigación a cerca de las incrustaciones de sílice, estas son ya bien comprendidas, pero aun no es posible realizar predicciones confiables de incrustaciones bajo condiciones típicas de operación de una central de generación de energía geotérmica.

El entendimiento del comportamiento de la sílice en ambientes geotérmicos es la clave para resolver los principales y más costosos problemas que son la eliminación de agua saturada de sílice y de las incrustaciones en tuberías superficiales y subterráneas.

Más de 50 años de investigación geotérmica de laboratorio y de campo en todo el mundo no han brindado una solución universalmente aplicable, y más importante, económicamente viable a este insuperable problema. La dosificación de acido para suprimir la incrustación de sílice es bastante efectiva, pero el control de la adición de acido es difícil (Mroczek et al., 2010).

Actualmente se cuentan con varios programas por ejemplo: HITEQ (Weres et al., 1980), KIRMATH (Gérard, 1998), PHREEQC (Parkhurst and Apello, 1999), CHESS (Van Der Lee and De Windt, 2000), TOUGHREACT (Xu et al., 2006), CRUNCHFLOW (Steefel, 2008), Geochemist's workbench (Bethke, 2008), que contribuyen a la predicción, aunque todavía no con mucha exactitud, de la incrustación de minerales por saturación de las salmueras geotérmicas, esto por medio de cálculos de índices de saturación basados en ya sea, mediciones de la concentración de la salmuera por técnicas de laboratorio, o el cálculo de la concentración posible a una determinada temperatura, los cuales parten de la consideración de una condición de equilibrio de fondo.

Existen diversos métodos para frenar, disminuir o mitigar los efectos de la polimerización de sílice, pero a grandes rasgos pueden clasificarse en 2: a) Físicos, y b) Químicos.

Dentro de los métodos químicos utilizados, los cuales se encuentran prácticamente englobados todos bajo un solo termino denominado inhibidores, se encuentra la adición de ácido a la salmuera para modificar el pH de esta.

3.1 INHIBIDORES

Un inhibidor es una sustancia que por procesos físicos - químicos disminuye, retarda, o impide el desarrollo de cierto proceso, interacción o reacción que por algún motivo no se desea que suceda.

En varios campos geotérmicos desarrollados, los minerales tienden a precipitar o incrustarse dependiendo de los cambios en la temperatura o presión del fluido, trayendo consigo problemas en el flujo de dichos fluidos. Para superar estos problemas asociados con las incrustaciones, se han desarrollado diversos métodos para eliminar o reducir la cantidad de minerales depuestos. Sin embargo es importante señalar que deben además investigarse los mecanismos involucrados y la relación entre las incrustaciones minerales y las propiedades físicas y geoquímicas de las rocas y los fluidos del sistema geotérmico bajo explotación (Ngothai et al., 2010).

Existen dos rutas principales para el ensuciamiento de intercambiadores de calor y pozos. La primer ruta es a través de la transmisión por el agua "water-borne" (Gill, 1996) y la segunda es por nacimiento en el agua "water-born" (Gibbs, 1928). "Water-borne" se refiere al material suspendido tal como limo, arcilla o productos de corrosión existentes como tal en el agua. "Water-born" se refiere a la formación de la precipitación in situ ya sea en la salmuera o directamente en las superficies.

El material transportado por el agua puede también influenciar la precipitación del nacido en el agua proporcionando una especie de semilla o sustrato para facilitar la adherencia al material precipitado a la superficie

Existen varios pasos para que los precipitados nacidos en el agua formen escamas o incrustaciones. Estos pasos son:

- 1. Alcanzar la supersaturación con respecto a un material en particular que resulte de iones formadores de escamas, cambios de pH o cambios de temperatura.
- 2. Formación de un grupo de iones formadores de escamas y en última instancia proporcionar núcleos para el crecimiento adicional de cristales.
- 3. Crecimiento de los núcleos para formar precipitados.
- 4. Transporte de las masas precipitadas a las superficies para causar incrustaciones, sin embargo, en ocasiones hay una precipitación directa en las superficies.

Todos estos pasos son igual de importantes para la precipitación y su mitigación. El logro de la supersaturación ya sea para el carbonato de calcio o la sílice puede ser alterado por ejemplo por la modificación del pH de la salmuera.

Los inhibidores pueden ser usados para modificar los pasos 2 al 4. Algunos de los inhibidores pueden prevenir la nucleación y el crecimiento de cristales mientras que otros previenen el crecimiento de los núcleos; otro tipo de inhibidores puede interferir en el paso 4 modificando la morfología, el tamaño o la carga del material precipitado. El consumo de inhibidor es mínimo cuando la precipitación es completamente inhibida (Gill et al., 1983). Sin embargo, la inhibición incompleta puede resultar en un consumo de inhibidor significativo.

Otras maneras de mitigar la precipitación como la modificación del cristal, la no adherencia y la dispersión requieren que el inhibidor sea consumido como resultado de la adsorción del inhibidor en la superficie del material precipitante (Gill, 2011).

Los métodos de control-inhibición de las incrustaciones empleados en los campos geotérmicos han sido generalmente específicos para la química de las salmueras y las condiciones de proceso (Phillips et al., 1980).

Los métodos más comunes empleados para mitigar los depósitos de incrustaciones de sílice en los sistemas de transporte de salmueras geotérmicas incluyen: a) inyección de salmuera en caliente o cerca del punto de saturación de sílice (Henley, 1983), b) ajuste del pH de la solución salina (Rothbaum et al., 1979; Hibara et al., 1990), c) maduración o lagunage (Yanagase et al., 1970), d) cristalización/clarificación (Featherstone and Powell, 1981),e) remoción de sílice por precipitación controlada con metales (Rothbaum and Anderton, 1975), f) precipitación controlada de sílice por surfactantes cationicos (Ueda et al., 2000), g)dilución con vapor condensado o agua fresca (Gallup and Featherstone, 1985), h) lagunas de evaporación-percolación (Mercado, 1975), i) tratamiento con agentes reductores (Gallup, 1933), j) inhibidores-dispersantes orgánicos (Harrar et al., 1982; Candelaria et al., 1996), y k) agentes quelantes, ácidos orgánicos, agentes secuestrantes o

complejantes (Gallup, 1998). En algunos campos, han sido empleadas combinaciones de las soluciones anteriores (Arnorsson, 2000). También se han desarrollado métodos para remover depósitos una vez que se han formado en equipos, tuberías y pozos inyectores (Messer et al., 1978; Arata et al., 1999).

El desarrollo y prueba de inhibidores ha sido a través de pruebas de laboratorio o en pruebas de campo, y dentro de estas últimas, se puede dividir en 2 esquemas, el primero es en una línea aislada del sistema para el uso único y exclusivo de la prueba, y el segundo, en una línea dentro del sistema de producción, es decir, una línea en operación.

3.1.1 TIPOS DE INHIBIDORES

Los inhibidores pueden clasificarse de diversas maneras una de ellas es en: a) Orgánicos y, b) Inorgánicos. Otra manera de clasificar a los inhibidores es en: a) Ácidos y, b) Básicos.

Algunos ejemplos de inhibidores actualmente utilizados en la industria dedicada a la producción de energía eléctrica de origen geotérmico son los siguientes. (1) Inhibidor de base Poliacrilato, (2) GEO901, (3) GEO903, (4) GEO980, (5) pHREEdom 5200M, (6) Scale-Guard 84614, (7) NaOH o KOH y, (8) HCl o H_2SO_4 .

3.1.1.1 INHIBIDORES DE BASE POLIACRILATO

La inhibición de incrustaciones de calcita ha sido una parte integral del mantenimiento de la planta geotérmica del campo geotérmico de Lihir, en la isla Lihir, de Papua Nueva Guinea.

Desde el 2003, solo un químico, un inhibidor de base de poliacrilato, fue probado como efectivo para la química de Lihir. A pesar de resultar efectivo, el incremento en el costo asociado a este producto ha creado la necesidad de encontrar otro producto que sea más económico y que ofrezca los mismos buenos resultados.

En este caso la empresa Sinclair Knight Merz (SKM) condujo las pruebas pertinentes para finalmente concluir que la deposición en pozos y tuberías podía ser controlada por medio del uso de los inhibidores de base poliacrilato los cuales son químicos anti incrustantes; los agentes antiincrustantes utilizados en Lihir fueron desarrollados por la empresa Ashland de Australia.

El nombre comercial designado por la empresa Ashland para la familia de inhibidores de base poliacrilato es Polystabil. La familia de inhibidores de incrustaciones Polystabil incluye una variedad de novedosos productos que controlan de manera efectiva una amplia gama de incrustaciones en aguas de tipo industrial y de sistemas municipales.

Los productos están especialmente formulados y son una mezcla de poliacrilatos, fosfonatos, copolímeros de acrilato de acido sulfónico y otros dos compuestos activos, y ofrecen propiedades de estabilización y dispersión. En particular para Lihir, poseían un color café y una gravedad especifica de 1.1 (Mejorada et al., 2011).

3.1.1.2 GEO 901

GEO 901 es un éster de fosfato que ha sido muy satisfactoriamente aplicado en el control de la precipitación en ambientes donde la salmuera se encuentra simultáneamente, supersaturada con respecto a carbonato de calcio, sulfato de bario, y fluoruro de calcio. GEO 901 es un inhibidor desarrollado por la empresa Nalco específicamente para incrustaciones de carbonato de calcio (Gill, 2011).

3.1.1.3 GEO 903

La mayoría de los ácidos poliacrílicos comerciales disponibles contienen S, o P sobrantes del proceso de fabricación de estos (iniciadores o agentes de transferencia de cadenas poliméricas), los cuales pueden causar la precipitación de escamas de sulfitos, sulfuros o fosfatos; GEO 903 es un producto realizado mediante un proceso que no deja trazas de S o P en el producto (Moya et al., 2005). GEO 903 es un inhibidor desarrollado por la empresa Nalco específicamente para incrustaciones de carbonato de calcio (Gill, 2011).

3.1.1.4 GEO 980

Este producto el cual fue desarrollado por la empresa Nalco, es un copolímero de acido acrílico y hidroxi polietoxi alil éter, y tiene la capacidad de trabajar como inhibidor-retardante de la tasa de polimerización de sílice asi como dispersante de la sílice polimerizada.

Estudios de laboratorio reportados en la literatura han mostrado que el inhibidor GEO 980 puede prevenir la deposición de sílice por arriba de 2-2.2 veces el equilibrio de solubilidad de sílice basado en la curva de solubilidad de la *Figura 3.1*. Esta curva de solubilidad es solo una guía ya que la solubilidad de la sílice está fuertemente influenciada por la presencia de otros iones, la temperatura, la presión y la fuerza iónica total (Gill, 2011).



Figura 3.1-Solubilidad de sílice como función de la temperatura [Datos de (Gill, 2011)].

La curva de dosificación del inhibidor GEO 980 (*ver Figura 3.2*) fue desarrollada para la salmuera desglosada en la *Tabla-3.1* y variando la cantidad de sílice, la temperatura y la presión.



Figura 3.2-Dosis de GEO980 como función del índice de saturación de sílice [Datos de (Gill, 2011)].

| lón | Concentracion (ppm) |
|-------------------------|---------------------|
| Mg | 100 |
| Ca• | 50-1 000 |
| Fe | 10 |
| Si (SiO ₂)* | 200-600 |
| Na | 9 200 |
| CI | 6 000 |
| SO4 | 10 000 |
| HCO3 | 300 |

Tabla-3.1 Composición de la salmuera sintética [Tabla tomada de (Gill, 2011)].

Se realizó recientemente una prueba del inhibidor GEO980 en coordinación con CFE dentro de la planta de energía geotérmica de Cerro Prieto, localizada en México, en el estado de Baja California, con una capacidad instalada de 720 MW(Gill, 2011).

En los últimos años la planta redujo su producción de vapor debido a las incrustaciones por las altas concentraciones de sílice en las salmueras resultando en tasas de reinyección bajas.

El objetivo de la prueba fue evaluar la viabilidad de un proyecto de ciclo binario mediante el uso del inhibidor GEO980 para prevenir las obstrucciones causadas por la sílice.

Las pruebas demostraron la efectividad del uso del inhibidor GEO980 en el intercambiador de calor de prueba.

3.1.1.5 PHREEDOM 5200M

Este inhibidor es una sal diamina fosfonometilada, es liquido y de un color amarillo transparente, posee un pH de 4.2 y una gravedad especifica de 1.17 a 1.21. Fue desarrollado por la empresa Nalco. Su función es la inhibición de las incrustaciones da calcita. Ha sido comercializado después de varias pruebas bajo un amplio intervalo de índices de saturación de calcita. Ha sido probado en sistemas de enfriamiento de agua por varios años por arriba de 300 veces la saturación de calcita y sulfato de calcio por arriba de 7-8 veces. Resultados preliminares han demostrado también su eficacia en la inhibición de estibnita bajo condiciones acidas (Gill and Yorke, 1994).

Tiene una muy alta tolerancia para el calcio y por lo tanto es especialmente adecuado cuando la fuerza motriz del carbonato de calcio es muy alta o la concentración de calcio es muy elevada en la salmuera. Este producto es también altamente efectivo para sulfato de calcio, sulfato de bario y fluoruro de calcio. Durante el 2010 se realizaron pruebas de campo y de laboratorio en el campo geotérmico de Lihir (isla de Lihir en Papua Nueva Guinea) para determinar la eficiencia y efectividad de este y otros inhibidores (Mejorada et al., 2011).

El objetivo principal era reducir los costos asociados al inhibidor que se había venido utilizando en la planta de energía geotérmica de Lihir por medio de la búsqueda de un sustituyente que ofreciera iguales o mejores rendimientos con un costo menor.

3.1.1.6 SCALE-GUARD 84614

Este inhibidor posee un ingrediente activo el cual es bisulfato de sodio, es líquido y de color paja, posee un pH de 4-7 y una gravedad especifica de 1.24 a 1.28. Fue desarrollado por la empresa Nalco. Su función es la inhibición de las incrustaciones de calcita.

Durante el 2010 se realizaron pruebas de campo y de laboratorio en el campo geotérmico de Lihir (isla de Lihir en Papua Nueva Guinea) para determinar la eficiencia y efectividad de este y otros inhibidores. El objetivo principal era reducir los costos asociados al inhibidor que se había venido utilizando en la planta de energía geotérmica de Lihir por medio de la búsqueda de un sustituyente que ofreciera iguales o mejores rendimientos con un costo menor.

Debido a los buenos resultados obtenidos en las pruebas de laboratorio y de las pruebas piloto se optó por cambiar el inhibidor actualmente en uso por el Scale-Guard 84614 (Mejorada et al., 2011).

3.1.1.7 NAOH o KOH

El uso de bases para inhibición de incrustaciones de origen geotérmico ha sido frecuente en diversas plantas de generación, sin embargo, su uso puede considerarse restringido a los casos en que la problemática sean las incrustaciones derivadas de minerales de calcio, ya que su uso para inhibir las incrustaciones de sílice no es muy adecuado, esto se debe a que el principal catalizador de la polimerización de la sílice son los iones OH⁻.

3.1.1.8 HCL 0 H₂SO₄

El uso de ácidos como inhibidores de las incrustaciones es un método común en la geotermia, los ácidos contribuyen a la disolución de las incrustaciones ya existentes y al incremento del pH lo que provoca que la polimerización se retarde.

El inconveniente en el uso de este tipo de sustancias químicas como inhibidores es el hecho de que provocan corrosión en los equipos y tuberías lo que genera a su vez la necesidad de reparar o cambiar tuberías lo cual se traduce en gastos adicionales. Para evitar el uso de estos productos se han desarrollado diversos modelos numéricos que simulan los procesos de sílice en ambientes geotérmicos como herramientas de prevención de incrustaciones.

4. MODELADO DE SÍLICE

Los programas de modelado geoquímico más utilizados son códigos computacionales relacionados a un archivo de datos llamado base de datos. La base de datos contiene parámetros cinéticos y termodinámicos. El código usa los parámetros termodinámicos y cinéticos de la base de datos y concentraciones u otras constantes como entrada, y produce resultados que describen un modelo geoquímico para un sistema químico particular.

Los códigos de especiación y solubilidad se consideran relativamente sencillos. Los códigos de transporte de masa reactiva acoplada son mucho más matemática y computacionalmente complejos (Lichtner, 1996). Algunos de los códigos de modelado de sílice en ambientes geotérmicos encontrados en la literatura son: NANOKIN y SILNUC.

4.1 NANOKIN

Existen 2 versiones del código NANOKIN realizadas hasta el 2011; la primer versión se publicó en 2009, y la segunda justo en el 2011 (Fritz et. al., 2009; Noguera et. al., 2011).

NANOKIN es, según lo descrito en los papers correspondientes, un programa con un enfoque numérico que representa la nucleación, crecimiento y/o re-adsorción de partículas de composición fija en soluciones acuosas, y que involucra funcionalidades adecuadas para la formación de minerales de arcilla simples en procesos de desgaste, tales como: formación de partículas no-esféricas, nucleación homogénea y heterogénea, varias leyes de crecimiento, la precipitación resultante de la disolución de minerales primarios.

El modelo completo está integrado en un código numérico llamado NANOKIN, en el cual se han introducido varios procedimientos de optimización para permitir que toda la dinámica sea seguida.

NANOKIN fue aplicado a la precipitación de minerales enlazados a Al- en soluciones acuosas como: halloysita, kaolinita y Ca-montmorillonita. Con lo cual se propuso un esquema estable de la precipitación competitiva de halloysita y kaolinita bajo dos tipos de condiciones iniciales: 1) un estado de sobresaturación inicial de la solución acuosa; 2) una sobresaturación progresiva resultante de la disolución cinética de los minerales de una roca granítica bajo condiciones de desgaste. También se pudo calcular el rendimiento de los tamaños de partículas en el rango de micras, con diferentes funciones de distribución de tamaño de cristal (Fritz et. al., 2009).

La segunda versión de NANOKIN incluye un tratamiento para la capacidad de intercambio catiónico en arcillas en contacto con una solución acuosa, durante la precipitación, usando un enfoque ideal de solución solida. Combina en un solo calculo procesos de corto plazo como el intercambio catiónico y reacciones de largo plazo como la precipitación. También es capaz de

proporcionar la dependencia del tiempo para los tamaños de partícula, la composición y cantidad precipitada, asi como para las actividades de la solución acuosa, el pH y el estado de saturación. Fue aplicado para la descripción de la precipitación de la montmorillonita e illita procedente de soluciones acuosas a diferentes temperaturas y condiciones iniciales: 1) una supersaturación inicial con una composición de la solución acuosa que imita el agua fresca a T=25 °C, agua de mar a la misma temperatura, y un fluido hidrotermal a T=150 °C; 2) una supersaturación progresiva resultante de la disolución cinética de minerales que forman rocas graníticas, bajo condiciones hidrotermales y de desgaste. La conocida competencia entre las illitas y montmorillonitas en estos diversos ambientes es bien reproducida, asi como su composición catiónica dominante y sus tamaños de partícula típicos (Noguera et. al., 2011).

Otros códigos disponibles en la literatura como, HITEQ (Weres et al., 1980), KIRMAT (Gérard et al., 1998), PHREEQC (Parkhurst an Apello, 1999), CHESS (Van Der Lee and De Windt, 2000), TOUGHREACT (Xu et al., 2006), CRUNCHFLOW (Steefel, 2008), Geochemist's workbench (Bethke, 2008), no calculan explícitamente el paso de la nucleación como una función del estado de saturación de la solución con respecto a la fase mineral considerada. El problema de la tasa inicial de precipitación relacionada a una superficie inicial A₀ teóricamente igual a cero es resuelto creando una superficie inicial que permite que la precipitación se realice.

4.2 SILNUC

El código computacional SILNUC modela numéricamente la nucleación homogénea y el crecimiento de las partículas coloidales de sílice amorfa. Contiene la mayoría de resultados del trabajo experimental y teórico realizado por Weres et al. (1980), y es capaz de reproducir la mayoría de los datos experimentales dentro del error experimental.

El modelo de la química de la sílice amorfa incorporado en SILNUC consiste de varias formulas empíricas y teóricas derivadas. Fue ajustado por los autores a los datos experimentales reunidos en soluciones buffer y en presencia de cloruro de sodio, sobre el intervalo de temperatura de 50 hasta 100 °C.

Según lo reportado, se cree que los resultados pueden ser extrapolados de modo seguro al menos hasta 150 °C. Sólo limitados datos cinéticos fueron generados por encima de un pH de 8 aproximadamente, y estos datos, para la mayor parte, no fueron incluidos en el proceso de la reducción general de los datos. Por lo tanto, SILNUC no debe ser usado del todo en rangos de pH elevado a pesar de que en algunos casos puede producir predicciones acertadas en este rango.

El modelo confinado en SILNUC considera que toda la sílice disuelta es monomérica.

Los mecanismos de reacción de la base y el fluoruro catalizados están incluidos en SILNUC. El cloruro de sodio, el fluoruro de sodio y la sílice disuelta son los únicos solutos considerados presentes.

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS

SILNUC modela solo la formación de partículas coloidales de sílice amorfa y su crecimiento por la agregación por deposición molecular de sílice disuelta sobre estas. Asi mismo puede modelarse la deposición de sílice disuelta sobre partículas coloidales de sílice preexistentes que son agregadas a la salmuera al inicio de la reacción. Alternativamente, la concentración de sílice disuelta en forma iónica puede ser especificada, y SILNUC calculará el pH en cada punto del tiempo mientras el programa avanza. También puede especificarse la perdida de agua por vaporización.

SILNUC no modela la floculación o coagulación de la sílice coloidal, o su adhesión a superficies solidas y su cementación para formar depósitos sólidos. A pesar de lo anterior, el código puede considerarse como una herramienta confiable para la predicción de las incrustaciones en ambientes geotérmicos dentro de los parámetros establecidos en el reporte (Weres et al., 1980).

Las salidas primarias calculadas por SILNUC son la concentración de sílice disuelta y el número y tamaño de distribución de las partículas de sílice coloidales como función del tiempo. Varios valores complementarios tales como la tasa de deposición molecular en superficies solidas, la relación de saturación para sílice disuelta y la tensión superficial de la interfaz sílice-agua son también calculados por el programa. Se asumen condiciones de reactor con flujo tapón ideal. En términos físicos, esto corresponde a un tanque reactor perfectamente agitado que contiene una muestra al azar de salmuera o salmuera que fluye por una tubería sin retromezclado.

SILNUC fue desarrollado usando el compilador MNF4 FORTRAN y el sistema CDC 7600 en los Laboratorios Lawrence Berkeley.

4.2.1 ESTRUCTURA Y FUNCIONAMIENTO

El paquete original de simulación SILNUC de Weres et al. (1980), consta aproximadamente de 1000 líneas de código y consta de un programa principal, que ocupa 5 tarjetas perforadas de datos y dentro del cual se mandan a llamar un total de 8 subrutinas.(*ver Figura 4.1*)



Figura 4.1-Diagrama del programa SILNUC en su versión original de Weres et al.
En las siguientes líneas se dará una breve explicación de las funciones de cada uno de los diferentes componentes del paquete SILNUC.

El programa principal SILNUC se encarga principalmente de la lectura de los datos de entrada; asi mismo, este llama a las subrutinas SETUP y MASTER, las cuales son llamadas únicamente una vez por cada problema en ejecución.

El subprograma SETUP calcula el tiempo óptimo para inicial los cálculos del problema. SETUP se apoya en las subrutinas SPECIFY y SILKIN (las subrutinas SPECIFY y SILKIN son llamadas únicamente por MASTER, DEPOSIT y OUTPUT), mientras que la subrutina MASTER, de manera directa o indirecta, controla a todas las demás subrutinas. MASTER contiene el algoritmo de nucleación, decide si se debe ejecutar un paso de deposición molecular o de nucleación, modifica los intervalos de tiempo de nucleación y deposición molecular si es necesario, y determina cuando finalizar la nucleación y el problema en sí, y realiza llamadas periódicas a la subrutina OUTPUT.

La subrutina DEPOSIT determina el cambio en la concentración de sílice disuelta para cada periodo de tiempo, además, auxiliándose de la subrutina SILKIN, calcula el cambio en el radio de la partícula. DEPOSIT también llama a SPECIFY.

La subrutina OUTPUT genera la impresión de los resultados de salida y da un informe completo del estado físico del problema. También se encarga del cálculo de, el número (CLNV(NCLC)) y radio de las partículas (CLRV(NCLC)), y la masa total (CLMV(NCLC)), de cada clase coloidal. Esta subrutina también hace llamadas a las subrutinas SPECIFY y SILKIN.

La subrutina SPECIFY tiene como objetivo principal la determinación de, los valores de temperatura (TEMP, °C), la fracción de agua flasheada (FLASH) y el pH (PH), por medio de una interpolación lineal entre los arreglos vectoriales de los datos de entrada TEMPRV(K), FLASHRV(K), y PHRV(K) respectivamente. Además calcula otras variables como: la actividad del ion hidrogeno (AH), corrige la concentración de cloruro de sodio (SML) y la concentración total de fluoruro (TOTF), debido al efecto producido por la pérdida de agua por flasheo. Si las concentraciones de SiO₂, NaCl y F⁻ son especificadas en unidades de gramos o moles por litro a temperatura ambiente al inicio del programa, la subrutina SPECIFY convierte estas a unidades de gramos o moles por kilogramo de agua. SPECIFY no hace llamada a ninguna otra subrutina.

La subrutina SILKIN calcula la mayoría de los parámetros químicos utilizados por el programa, entre los cuales destacan: solubilidad (CSILS), relaciones de saturación de sílice amorfa (SRR), constantes para el equilibrio ácido-base, constantes de velocidad química, coeficientes de actividad iónica, pHnom (PHN), tensión superficial (GAMMA), la fracción de sílice disuelta en forma iónica (ALPSIL), factor de Zeldovich (ZLD), estado estacionario de la velocidad de nucleación (RANUC) y otras cantidades relacionadas. Del mismo modo, calcula la cinética del cambio en el radio de la partícula para cada clase coloidal (CLDV(NCLC)) y usa estos valores para calcular el radio de la partícula (CLRV(NCLC)).

En su versión original de Weres et al., CLDV necesita ser dimensionado debido a las restricciones de la plataforma FORTRAN; CLDV es dimensionado en 1200 = 4 X 300, para proporcionar los 4 valores de la función derivada del algoritmo de Runge Kutta, pues se evalúa esta en cada periodo de tiempo. Asi mismo, CLRV es dimensionada en 600 para retener los valores calculados en cada paso. Dichos valores son utilizados para determinar el cambio fraccional en el radio de la partícula dentro de la subrutina DEPOSIT.

El valor del parámetro de control KRGC dice a SILKIN si debe realizar la evaluación del cálculo del ciclo del algoritmo Runge Kutta. Si el valor de KRGC = 0, significa que la subrutina SILKIN no ha sido llamada por DEPOSIT durante un paso de deposición molecular; más bien, ha sido llamado por SETUP, MASTER, o OUTPUT, y que la tasa de nucleación y otros valores relacionados serán calculados en vez de las tasas de cambio del radio de partícula.

SILKIN, y solo SILKIN, llama a su vez a las subrutinas PHF y WATER.

La subrutina PHF calcula los valores de las funciones pH, F (pH , pHnom) y I (pH , pHnom), representadas en el programa por las variables FPH y FINT respectivamente. PHF no llama a ninguna subrutina.

La subrutina WATER calcula la densidad (DENS) y la constante dieléctrica del agua pura (EPSD), asi como las constantes de Debye-Huckel (ADH y BDH). WATER no llama a ninguna subrutina.

4.2.2 FUNDAMENTOS QUÍMICOS Y TERMODINÁMICOS DEL PROGRAMA SILNUC

El mecanismo general de precipitación de sílice es descrito a continuación.

La precipitación de sílice en salmueras geotérmicas se hace notable cuando existe una sobresaturación de sílice amorfa. Las etapas que constituyen el proceso de precipitación de sílice amorfa son:

- a) Formación de polímeros de sílice menores a su núcleo critico.
- b) Nucleación homogénea y crecimiento de partículas coloidales de sílice en fase acuosa.
- c) Deposición molecular sobre superficies solidas para dar como producto una sílice vítrea, densa y muy compacta de gran dureza. La formación de nuevos cristales sigue dos pasos:
 - a. Nucleación homogénea: esta corresponde a la producción de nuevos centros (núcleos)
 - b. El crecimiento subsecuente: tiene lugar a medida que el material es depositado sobre el núcleo estable

El proceso de nucleación es el que determina el tamaño y distribución de los cristales precipitados.

La energía que limita la formación del núcleo estable se debe a la energía superficial de las partículas pequeñas, si el núcleo alcanza su tamaño crítico, entonces este podrá comenzar a crecer siempre y cuando exista el grado apropiado de sobresaturación de sílice en la solución.

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS

Por otro lado, la velocidad de nucleación depende principalmente de la relación de saturación (concentración de sílice vs solubilidad de equilibrio bajo condiciones dadas). La velocidad de nucleación será muy lenta mientras la relación de saturación sea menor de 2 o 3 y será mucho más rápida siempre y cuando la relación de saturación sea mayor a 3. Cuando la relación de saturación se encuentra por debajo de un valor de 3.0, existirá un cierto intervalo de tiempo durante el cual la concentración de sílice disuelta no cambia considerablemente; este intervalo de tiempo depende directamente de la concentración de sílice de forma inversamente proporcional, ya que si disminuye la concentración de sílice, el intervalo de tiempo se verá incrementado (Weres et al., 1980).

En el caso en que las condiciones dicten que la nucleación homogénea es insignificante o despreciable (por ejemplo, cuando la relación de saturación es menor a 2), la deposición molecular será el mecanismo dominante.

La velocidad de deposición molecular sobre superficies solidas es usualmente muy lenta pero puede resultar apreciable bajo condiciones tales como altas concentraciones de sílice y altas temperaturas. Un claro ejemplo es la deposición de sílice vítrea en algunas tuberías conductoras de salmueras residuales del campo geotérmico de Cerro Prieto en Baja California, México, donde se ha observado una velocidad de deposición de 1mm/año (Santoyo, 1983).

El problema de la precipitación de sílice se ve restringido a situaciones en las que ocurre un gran decremento en las temperaturas de la salmuera; es decir, que la precipitación de sílice será un problema, solo si la temperatura del yacimiento se encuentra por arriba de los 240 °C. (*Ver Tabla-4.1*)

4.2.3 PRINCIPALES ALGORITMOS UTILIZADOS DENTRO DE SILNUC

El modelo incorporado en SILNUC presupone que toda la sílice disuelta se encuentra en forma monomérica. La deposición de sílice disuelta sobre las partículas pre-existentes de sílice coloidal especificadas al inicio de la reacción puede modelarse también. Alternativamente, se puede especificar la concentración de sílice disuelta en forma iónica y de este modo SILNUC calculara el pH en cada punto, a medida que la reacción avance. Esta opción permite considerar casos en los cuales el ácido monosilícico es el buffer dominante a ser tratado por SILNUC, sin tener que calcular o estimar el pH de la salmuera de otra forma. También se debe especificar la perdida de agua por la evaporación instantánea.

Los principales resultados calculados por SILNUC son la concentración de sílice disuelta, el número y tamaño de distribución de las partículas coloidales como función del tiempo, otros valores complementarios son, la velocidad de deposición molecular sobre superficies solidas, la relación de saturación de sílice y la tensión superficial de la interfase SiO₂-H₂O. Las condiciones que se presuponen son equivalentes a un reactor con flujo perfecto (tapón), que en términos físicos corresponde a un reactor perfectamente agitado o a una salmuera fluyendo a través de una tubería de conducción.

| Ti(°C) | | 200 | 220 | 240 | 270 | 300 |
|-----------------------|-----------------------------|--------------------|-------|-------|-------|-------|
| Conc. de cuarzo (ppm) | | 297 | 375 | 440 | 521 | 598 |
| Tf(°C) | Conc. de silice amfa. | | | | | |
| | | 1.315 _a | 1.870 | 1.469 | 1.619 | 2.004 |
| 70 | 245 | 390 _ь | 520 | 646 | 844 | 1198 |
| | | 1.594 _c | 2.123 | 2.638 | 3.443 | 4.891 |
| | | 0.01 _d | 0.058 | 0.145 | 0.300 | 0.620 |
| 100 | 364 | 1.238 | 1.303 | 1.377 | 1.514 | 1.859 |
| | | 368 | 489 | 606 | 789 | 1112 |
| 100 | | 1.010 | 1.342 | 1.664 | 2.167 | 3.054 |
| | | 0.0003 | 0.029 | 0.130 | 0.640 | 2.050 |
| 130 | 509 | 1.164 | 1.224 | 1.292 | 1.416 | 1.728 |
| | | 346 | 459 | 568 | 738 | 1033 |
| | | 0.679 | 0.902 | 1.117 | 1.449 | 2.030 |
| | | | | 0.034 | 0.370 | 3.210 |
| | | 1.093 | 1.148 | 1.210 | 1.324 | 1.607 |
| 160 | 680 | 325 | 430 | 532 | 690 | 961 |
| 100 | 000 | 0.477 | 0.633 | 0.783 | 1.014 | 1.413 |
| | | | | | 0.016 | 0.700 |

Tabla-4.1 Concentraciones de sílice, relaciones de saturación y velocidades de deposición, obtenidas de agua evaporada sobresaturada con cuarzo [Tabla modificada de (Santoyo, 1983)].

a, Relación de concentración por medio del flasheo

b, Concentración final de sílice (ppm)

c, Relación de saturación final sobre la sílice amorfa sólida

d, Velocidad de deposición molecular en µm/día

SILNUC contiene tres algoritmos principales:

4.2.3.1 ALGORITMO - 1

El primer algoritmo incluido en SILNUC es el que se encarga de los cálculos relacionados con la deposición molecular y el crecimiento de las partículas. Este algoritmo calcula la velocidad de deposición molecular de sílice disuelta sobre las partículas coloidales de sílice existentes y el radio de las partículas como funciones del tiempo. También calcula la concentración de sílice disuelta como función del tiempo. Los cambios en el radio de las partículas y la concentración de SiO₂ disuelta son calculados usando el algoritmo de Runge-Kutta, el cual es usado para la resolución de la ecuación diferencial:

$$\frac{dc}{dt} = -K(Y,T) \cdot F(pH,pH_{nom}) \cdot f(Y,C) \cdot a_1 \cdot \left[1 + \frac{C_1 + C}{m_1}\right]^{2/3}$$
(4.1)

El intervalo de tiempo para este cálculo es controlado comparando el cambio fraccional en la concentración de la sílice disuelta y el cambio fraccional de la masa promedio en el radio de partícula para preestablecer los parámetros de control.

En SILNUC, la población de partículas coloidales de sílice es descrita y tratada en términos de "clases" discretas de partículas. Se considera que las partículas dentro de cada clase poseen el mismo tamaño. Cada clase está completamente especificada por el radio de partícula (CLRV(NCLC)) y el numero de partículas existentes en cada una (CLNV(NCLC)). El programa original de Weres et al., puede considerar hasta 300 clases coloidales al mismo tiempo. Por lo tanto, el número de valores de radio de partícula que se necesitan registrar es igual al número de clases de partículas presentes. Una o más clases con un radio y una cantidad de sílice determinadas deben ser especificadas como presentes al inicio del cálculo. Esto permite que el efecto de una distribución de tamaño de partículas coloidales en la salmuera pueda ser considerado.

4.2.3.2 ALGORITMO - 2

El segundo algoritmo principal de SILNUC es el algoritmo de nucleación. La nucleación es modelada como la creación de nuevas clases coloidales. Ordinariamente, nuevas clases son creadas a intervalos de tiempo constante = DELTH. El procedimiento es el siguiente:

El intervalo de tiempo de la ultima deposición molecular, TCV(1), es comparado con el tiempo en el que la última clase coloidal fue nucleada, THL. Si TCV(1) es mayor a la diferencia de THL – DELTH, el algoritmo de nucleación se ejecuta. Primero, la concentración de sílice disuelta, la temperatura, el pH, etc., son determinados al tiempo THL + DELTH por interpolación lineal del arreglo vectorial de los datos de entrada.

Posteriormente la velocidad de nucleación es calculada por medio del formalismo teórico de Lothe-Pound. Los efectos transitorios a corto plazo son aproximadamente estimados usando las siguientes ecuaciones:

$$I_N(t) = I_N \left[1 - \exp\left(\frac{-t}{\tau_c}\right) \right]$$
(4.2)

Donde:

- t = Tiempo desde el inicio de la reacción
- c = Tiempo constante

 I_N = Tasa de nucleación

 τ_c = Tiempo constante de Collins

$$\tau_c = \frac{1}{(4\rho_n R_{md} A^* Z^2)}$$
(4.3)

Donde:

- ρ_n = Densidad numérica en unidades de sílice, en sílice amorfa, = 2.21E22 cm⁻³
- A^* = Área superficial del núcleo critico, bajo las condiciones dadas = $4\pi r^{*2}$
- r* = Radio del núcleo critico, calculado a partir de la teoría

clásica de la nucleación = $\frac{2\gamma}{\rho_n K_B T \ln S}$

Donde:

- γ = Tensión superficial de la interfase SiO₂ H₂O en ergs/cm²
- K_B = Constante de Boltzman = 1.38054x10⁻¹⁶ erg/°K
- T = Temperatura en °K
- S = Relación de saturación = C/C_0
- Z = Factor de Zeldovich, el cual se estima para el hecho de que solo una fracción del núcleo que alcanza su tamaño critico continua su crecimiento. Típicamente su valor oscila entre 0.01 – 0.10

$$Z = \frac{2}{3} \left[\frac{3}{4\pi\rho_n n^{*2}} \right]^{1/3} \left(\frac{\gamma}{k_B T} \right)^{1/2}$$
(4.4)

Donde

 n^* = Número de unidades que existen de SiO₂ en el núcleo critico

En un problema isotérmico, el valor del tiempo constante calculado al inicio del problema es usado a través de este y una nueva clase nucleada de partículas deberá es introducida entonces. El número de partículas coloidales en la clase es elegido para ser igual a la velocidad de nucleación (RANUCC) multiplicado por el tiempo DELTH. El número de unidades de sílice en cada una de las partículas recién nucleadas es calculado mediante la siguiente ecuación:

$$n = n^* + \frac{0.5}{Z}$$
(4.5)

De este modo, las partículas recién nucleadas son un poco más grandes que los núcleos de tamaño crítico bajo las condiciones dadas. Esto es consistente con el contenido físico del formalismo de Lothe-Pound, en el cual la velocidad de nucleación In, es la velocidad a la cual las partículas de tamaño (n*+0.5/Z) son creadas. Para posteriormente introducir partículas nucleadas en un tamaño (n > n*), lo cual también es necesario en un sentido matemático ordenado para asegurar que las partículas continuarán el crecimiento en la parte de deposición molecular del cálculo.

Cuando una nueva clase de partículas es nucleada, el numero de clases (NCLC) es incrementado en uno, y la concentración de sílice disuelta es disminuida por una cantidad igual a la masa de las partículas nucleadas, con la finalidad de que el balance de masa se conserve. Las partículas pueden llegar a disolverse, asi como, crecer bajo condiciones propias. Si el radio de una clase de

partículas disminuye de un valor pequeño, esa clase estará completamente disuelta, por lo que el número y el radio de las partículas en la clase serán igual a cero y la sílice que está siendo contenida en ella es adicionada a la sílice disuelta. De cualquier manera esto sucede raramente.

Sea o no declarada alguna clase de partícula coloidal como presente al inicio, una clase consistente de una partícula es nucleada al inicio del problema. Por lo tanto, siempre existe al menos una clase de partículas coloidales presente.

A lo largo de todo el cálculo, la velocidad máxima de nucleación que ha sido calculada al tiempo dado es registrada y eventualmente la velocidad de nucleación empezará a caer rápidamente de una forma similar, a la disminución de la concentración de sílice disuelta debido a su conversión a sílice coloidal. Cuando la tasa de nucleación calculada disminuye por debajo de una cierta fracción (RRMN) de la velocidad máxima de nucleación registrada (RNMX), la nucleación cesa. RRMN es preestablecido en un valor de 0.001, esto sirve para detener la proliferación de clases coloidales que contengan un número de partículas insignificantes.

4.2.3.3 ALGORITMO - 3

Este algoritmo especifica la temperatura, pH y la fracción de agua perdida por flasheo de vapor como función del tiempo. La temperatura (TEMPRV) y la fracción del agua perdida por el flasheo a vapor (FLASHRV) son datos de entrada introducidos como una serie de valores discretos a un tiempo determinado. Los valores del pH (PHRV) deben ser especificados de la misma manera, pero no necesariamente. Los valores base del tiempo (TREFV) son elementales para los anteriores datos de entrada.

El cálculo de los valores de temperatura, pH y fracción de agua flasheada es realizado mediante la interpolación lineal de los datos de entrada. Aunque también un valor de temperatura, fracción flasheada y pH pueden especificarse si se desean sus valores constantes a través de todo el cálculo. Alternativamente, el pH puede ser calculado en cada punto a partir de la relación de sílice en forma iónica (H3SiO4⁻) a sílice total monomérica. Usando esta opción se asume implícitamente que la salmuera está compuesta en su mayoría por ácido monosilícico. Esto es usualmente el caso, solo si la salmuera es baja en bicarbonato y tiene un pH por arriba de aproximadamente 7 a 100 ^oC. Si la concentración de sílice iónica es especificada, no es necesario especificar los valores de PHRV y serán ignorados en caso de estar presentes.

La concentración de sílice disuelta durante un paso de nucleación es calculado por medio de una interpolación cuadrática usando los valores de concentración calculados en los últimos tres pasos de la deposición molecular (MD). Estos tres valores de concentración son almacenados en el arreglo CSILV, mientras que sus tres valores de tiempo correspondientes se encuentran alojados en el arreglo TCV. Los tres parámetros de ajuste de la parábola están en el arreglo CFIM. CFIM es re-calculado siempre que el tamaño de paso de deposición molecular cambie. Después de cada paso de nucleación (N) el valor de CSILV(1) es corregido para considerar el decremento en la sílice disuelta que produce la formación de nuevas partículas, y CSFV es re-calculado.

4.3 NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA DE LA SÍLICE AMORFA COLOIDAL

La formación inicial de partículas coloidales de sílice amorfa es lo que se conoce con el nombre de nucleación homogénea. El proceso de nucleación homogénea es dominante cuando se lleva a cabo una polimerización rápida con una alta sobresaturación inicial. La velocidad de nucleación homogénea está grandemente determinada por la energía libre de los núcleos críticos y por la deposición molecular sobre sus superficies. Esta teoría es conocida con el nombre de nucleación homogénea de Lothe-Pound. En el caso particular de la nucleación coloidal de la sílice amorfa, una circunstancia física hace que la teoría de Lothe-Pound sea simple y fácil de trabajar.

La expresión clásica de la energía libre de formación de núcleos críticos en sílice disuelta es:

$$\Delta F^* = \left(\frac{16\pi}{3}\right) \cdot \frac{\gamma^3}{(\rho_n K_B T \ln S)^{-2}} \tag{4.6}$$

Donde:

- ρ_n = Densidad de la sílice amorfa solida en unidades de SO₂/cm³ = 2.21E22 cm⁻³
- S = Relación de saturación = C / C₀
- γ = Tensión superficial de la interfase sílice amorfa-agua

El radio y el área del núcleo de la partícula son respectivamente:

$$r^* = \frac{2\gamma}{\rho_n K_B T \ln S} \tag{4.7}$$

$$A^* = 4\pi r^{*2} = \frac{3\Delta F^*}{\gamma}$$
(4.8)

La expresión para la velocidad estacionaria de nucleación, derivada de la teoría de Lothe-Pound es:

$$I_N = ZA^* R_{md} \rho_n Q_{LP} exp\left(\frac{-\Delta F^*}{K_B T}\right)$$
(4.9)

Donde:

- I_N = Velocidad de nucleación expresada en unidades de SiO₂ (kg H₂O min)⁻¹
- R_{md} = Tasa de deposición molecular en g SiO₂ min⁻¹ cm⁻²
- Z = Factor de Zeldovich, un numero adimensional cuyo valor oscila típicamente entre 0.01 y 0.1
- Q_{LP} = Es el cambio de la energía libre asociado con la creación de una partícula coloidal estacionaria de tamaño de núcleo critico. (Esto es considerado en la teoría clásica de la nucleación)

La inserción del factor de Lothe-Pound corrige el valor de la velocidad de nucleación calculada por el hecho de que el núcleo se encuentra realmente en movimiento: este se

difunde a través del agua y ejecuta rápidos movimientos de agitación de naturaleza rotacional y traslacional en un pequeño lapso de tiempo y espacio. Estos grados de libertad decrementan de manera importante la energía libre de formación del núcleo crítico. Se ha demostrado que el factor de Lothe-Pound es aproximadamente constante (en este caso particular) e igual a 3.34E25 (kg H₂O). El significado físico de este número, es igual al número de moléculas de agua en un kilogramo de agua y, por lo tanto, aproximadamente igual al número de posiciones disponibles para que el núcleo crítico las ocupe en un volumen de espacio que contenga un kilogramo de agua líquida.

 $A^* \cdot R_{md} \cdot \rho_n = Es$ la tasa de deposición monomérica en el núcleo crítico.

Z = Es introducido para considerar el hecho de que la concentración actual de los núcleos críticos sea menor a la concentración de equilibrio y que debido a esto los núcleos críticos puedan ya sea disminuir o incrementar su tamaño.

La ecuación (4.9) muestra que el valor de I_N está determinado por el valor de ΔF^* , en tanto que, la ecuación (4.6) muestra que ΔF^* está en función de dos parámetros: la tensión superficial (γ), y la relación de saturación (S). Debido a la forma exponencial de la ecuación (4.9), el valor de I_N es profundamente afectado por los valores de estos 2 parámetros físicos. La variación de I_N con S es tan grande que existe un aparente valor limite de S bajo el cual no se observa nucleación y por arriba del cual la nucleación ocurre rápidamente. Iler reporta que existe una velocidad máxima a la cual el acido monosilícico puede depositarse sobre la sílice amorfa coloidal (Iler, 1979). El fenómeno de la velocidad de crecimiento crítico es fácilmente interpretado como la consecuencia del efecto del límite de supersaturación. Es probable que en la práctica, la nucleación homogénea, con todas sus características, predomine si la relación de supersaturación inicial es lo suficientemente alta para que la nucleación homogénea sea rápida, mientras que la nucleación heterogénea será dominante con valores de supersaturación menores.

4.4 EL TIEMPO DE ESPERA O INDUCCIÓN Y LA TENSIÓN SUPERFICIAL

El tiempo de espera retraso o inducción es a menudo asociado con el proceso de nucleación. Físicamente este es un periodo de tiempo durante el cual la concentración del monómero permanece constante. Finalmente la concentración del monómero comienza por disminuir, lo cual la es señal más clara de que se llevara a cabo un proceso de nucleación. En la mayoría de los sistemas físicos, el periodo de inducción es en gran parte un concepto teórico ya que es muy pequeño para ser observado; pero en el caso de la nucleación de la sílice amorfa coloidal, el tiempo de inducción es lo suficientemente largo para ser observado fácilmente y es usualmente obvio en los datos cinéticos.

Existen dos tipos de interpretaciones físicas para el fenómeno del tiempo de inducción (Santoyo, 1983):

La primera, dicta que el tiempo de inducción refleja la cantidad de tiempo necesario para que la tasa de nucleación alcance un valor de estado estable. Este es aproximadamente igual al tiempo requerido para que los conglomerados subcríticos crezcan y alcancen tamaños de núcleos críticos y un poco más allá de estos. El periodo de inducción es inversamente proporcional a la relación de saturación *S*, ya que el tamaño de núcleo crítico es mayor a menores valores de *S*. Los tiempos de inducción de esta clase son conocidos por ser muy pequeños en el caso de condensación de vapores, pero pueden ser significativos en reacciones de precipitación del estado sólido, esto únicamente en el caso de la nucleación homogénea.

La segunda interpretación es que el tiempo de inducción es simplemente el periodo de tiempo requerido para que bastantes partículas sean nucleadas y que crezcan hasta un punto en donde la concentración del monómero sea notablemente afectada. Esta interpretación es aplicable a tiempos de inducción observados en el caso de nucleaciones tanto homogéneas como heterogéneas. Analizado de esta forma, el tiempo de inducción esta simplemente relacionado a la tasa de deposición monomérica R_{md} y a la velocidad de nucleación en estado estacionario I_N y varía en una proporción aproximada a:

$$(R_{md} \rho_n)^{-1} \left(\frac{I_N}{R_{md} \rho_n}\right)^{-1/4}$$
 (4.10)

Los datos de Makrides et al. (1978), claramente exhiben el fenómeno del tiempo de inducción. Por algún tiempo después que ha sido preparada la solución de ácido monosilícico, no se detecta un cambio en la concentración de dicho acido, y entonces, finalmente la nucleación se vuelve evidente cuando la concentración cae rápidamente. A menores valores de *S*, el periodo de inducción es mayor. Makrides et al., encontró que a 25 °C y una salinidad y pH constantes el periodo de inducción varía aproximadamente como:

$$(\ln S)^{-12}$$
 (4.11)

Comparando la ecuación anterior con la ecuación (4.10), estos autores estimaron el valor de la tensión superficial como aproximadamente 45 ergs/cm². Como todos sabemos, la tensión superficial de un líquido γ es la fuerza por cm² que actúa sobre una superficie. La tensión superficial de la interfase SiO₂-H₂O puede también ser determinada a partir de las relaciones determinadas empíricamente entre el radio de partícula y la solubilidad. Usando este método, Alexander (1954), encontró que el valor de la tensión superficial ronda alrededor de los 46 ergs/cm². La excelente concordancia entre los valores de tensión superficial determinados de acuerdo estos 2 diferentes métodos proporciona un fuerte respaldo a la exactitud de la teoría de la nucleación homogénea de la polimerización de la sílice.

4.5 SENTIDO PRÁCTICO DEL FENÓMENO DE NUCLEACIÓN

Como se ha visto, la precipitación de sílice está limitada por la deposición molecular sobre superficies solidas preexistentes. La nucleación de la sílice amorfa coloidal en la fase liquida provee una gran área superficial, la cual hace posible una rápida precipitación. Las condiciones bajo las cuales la nucleación toma lugar determinan justamente, cuanta área superficial se proporcionara. La nucleación homogénea a valores de *S* elevados producirá una gran cantidad de partículas pequeñas con una gran área superficial específica y viceversa.

La posibilidad de periodos de inducción del orden de minutos, horas, o días, sugiere que las salmueras con un valor inicial de *S* elevado, no pueden precipitar su sílice dentro del equilibrio de proceso, pero podría darse el caso de que precipitara en cualquier otro punto del yacimiento. En el caso de tiempos de inducción muy largos (días), la aparente no precipitación de sílice podría conducir a la decision de reinyectar la salmuera sin tratamiento previo, lo cual podría traer consigo resultados catastróficos. Es por ello que es claramente de interés práctico el tener la capacidad de predecir con cierta precisión la cinética del proceso de nucleación homogénea, asi como el número y área superficial de las partículas producidas por este fenómeno. El poder tener la capacidad de realizar lo antes dicho depende de la formulación de una razonable y rigurosa teoría del proceso de nucleación homogénea en este sistema, además de su reconciliación con una gran cantidad de datos experimentales (Santoyo, 1983).

4.6 LA TEORÍA LOTHE-POUND

El subcapítulo siguiente fue tomado del trabajo realizado por Weres y sus colaboradores (1980), y complementado con alguna información de otros autores.

Supongamos una partícula de tamaño crítico que está actualmente en movimiento, se difunde rápidamente en el agua y ejecuta movimientos de zigzagueo o vaivén de naturaleza rotacional y traslacional en un lapso de tiempo y espacio relativamente cortos.

Estos grados de libertad disminuyen en gran manera la energía libre de formación del núcleo crítico. La teoría clásica de la nucleación ignora estos grados de libertad, y es esta su principal deficiencia.

Según la teoría propuesta por Lothe y Pound (1962), la formulación clásica de la nucleación, ya que ignora estos movimientos rotacionales y traslacionales, requiere un factor que corrija dicha deficiencia.

La teoría Lothe-Pound describe la energía libre de formación de una partícula consistente de "n" unidades monoméricas presente en una solución con una determinada relación de saturación, como (Lothe y Pound, 1962; Weres et al., 1980; Santoyo, 1983):

$$F(n) = -k_B T \ln S + A(n)\gamma - k_B T \ln Q_{ext} + k_B T \ln Q_{rep}$$
(4.12)

Donde:

$$A(n) =$$
Área superficial de una partícula coloidal esférica compuesta de "n" unidades monoméricas

 $\gamma =$ Tensión superficial

Los primeros 2 términos corresponden a la expresión de la energía libre empleada en la teoría clásica de la nucleación, mientras que el tercer término considera la contribución de la energía libre de los seis grados de libertad traslacional y rotacional de la partícula como un todo.

 Q_{ext} = Función de partición externa Q_{rep} = Función de partición de reemplazo

 Q_{ext} , representa la contribución de los grados de libertad externos a la energía libre de una partícula de "n" unidades monoméricas incrustadas en sílice amorfa solida. El término correspondiente a la energía libre es una corrección del primer término. El cuarto término expresa las contribuciones de la sílice amorfa de gran longitud de onda las cuales las partículas no poseen.

El factor de Lothe-Pound es entonces:

$$Q_{LP} = \frac{Q_{ext}}{Q_{rep}} \tag{4.13}$$

La función de partición configuracional puede ser factorizada en dos partes que son respectivamente iguales al número de posiciones y al número de orientaciones disponibles para cada partícula en el agua. Tal que:

$$Q_{ext} = Q_{lat} Q_{pos} Q_{orient} \tag{4.14}$$

Si realizamos una exanimación más minuciosa sería fácil ver que la multiplicidad de orientaciones no necesita ser explícitamente considerada aquí. Si Q_{orient} va a ser incluida en la definición de Q_{ext} , deberá introducirse un factor análogo en la definición de Q_{rep} . Alternativamente, uno puede demostrar sobre fundamentos físicos que, debido a que la sílice es amorfa e isotrópica, todas las orientaciones de una partícula esférica son físicamente idénticas y esto hace que Q_{orient} adquiera un valor = 1 (Weres et al., 1980).

Mientras el valor de Q_{pos} esta dado por una rigurosa extensión de la ley de Raoult, la cual enuncia lo siguiente: "El numero de posiciones dentro de un volumen de agua dado es igual al número total de moléculas que existen dentro de él."

Si el agua está libre de sales y la tasa de nucleación será expresada en unidades de (min \cdot kg H₂O)⁻¹, este número es simplemente el numero de moléculas de agua en un kilogramo de agua = 3.34E25. En una solución salina, esto es aproximadamente igual al número de moléculas de agua más el número de iones de la sal por kilogramo de agua. Sin embargo, esta "corrección salina" es tan pequeña puede ser ignorada para fines prácticos. Por lo tanto:

$$Q_{pos} = 3.34E25 \tag{4.15}$$

 Q_{ext} es completamente análogo en su significado físico a Q_{rep} ; la única diferencia es que el primero se aplica a una partícula de sílice amorfa incorporada en un medio acuoso, mientras que la segunda aplica a una partícula idéntica incorporada en sílice amorfa sólida. Simples consideraciones dimensionales nos llevan a la conclusión de que Q_{rep} varia aproximadamente $n^{2/3}$, y estas consideraciones aplican de igual manera para Q_{lat} . Por lo tanto, la relación de los 2 es aproximadamente independiente de n. Esta relación fue evaluada por medio de métodos mecánicos estadísticos para el caso de n=1 (una molécula de ácido monosilícico) y se encontró que es cercana a la unidad; y por lo tanto es probablemente cercano a la unidad para todos los valores de n. En resumen, combinando todos los argumentos anteriores:

$$Q_{LP} = 3.34E25 \tag{4.16}$$

Este es el factor por medio del cual la teoría clásica de la nucleación subestima la tasa de nucleación en este sistema (Potapov et al., 2006).

El hecho de que el factor de Lothe-Pound , Q_{LP} , es prácticamente constante significa que desaparece cuando la ecuación (4.11) es diferenciada con respecto a "n" y en todas las manipulaciones matemáticas. Esto significa que los resultados de la teoría de Lothe-Pound difieren de la teoría clásica cuando la tasa de nucleación calculada es incrementada en un factor igual a Q_{LP} . Finalmente, aplicando la teoría de Lothe-Pound a la velocidad de nucleación en estado estacionario, podemos escribir:

$$I_N = Q_{LP} Z R_{md} \rho_n A^* \exp(-\Delta F^*)$$
(4.17)

Donde:

- $\rho_n = {\rm Densidad}$ numérica de unidades de SiO2 en sílice amorfa solida = 2.21E22 cm^{-3}
- $A^* =$ Área superficial del núcleo crítico bajo las condiciones dadas = $4\pi r^{*2}$

 r^{*2} = Radio del núcleo crítico bajo las condiciones dadas y calculado a partir de la teoría clásica de la nucleación = $\frac{2\gamma}{\rho_n k_B T \ln S}$

Donde:

$$\begin{split} \gamma &= \text{Tensión superficial de la interfaz sílice amorfa-agua} \\ \text{bajo condiciones dadas en ergs/cm}^2 \\ k_B &= \text{Constante de Boltzmann} = 1.38054\text{e}\text{-16 ergs/K} \\ \Delta F^* &= \text{La barrera de la energía libre para la nucleación homogénea} \\ &\text{calculada de la teoría clásica.} \\ \Delta F^* &= \frac{\gamma A^*}{3} \\ Z &= \text{Factor de Zeldovich, el cual toma en cuenta el hecho de que solo una fracción de los núcleos que alcanzan el tamaño de núcleos críticos continúa creciendo más allá, el } \end{split}$$

resto retrocede. Típicamente, su valor está entre 0.005 y 0.1

5. RENOVACIÓN Y MEJORA DEL CÓDIGO SILNUC EN LA PLATAFORMA DE PROGRAMACIÓN MATLAB

Originalmente, el código de simulación de la nucleación homogénea y crecimiento de partículas coloidales de sílice amorfa conocido como SILNUC fue programado en 1980 en el lenguaje FORTRAN MNF4, el cual manejaba tarjetas perforadas para realizar la lectura de los datos de entrada. Por fortuna el código fue redactado dentro de un reporte dirigido al "U.S Department of Energy" titulado "Kinetics of Silica Polymerization" en mayo de 1980; este extenso reporte realizado por, Oleh Weres, Andrew Yee y Leon Tsao, describe a detalle la cinética de polimerización de sílice asi como el funcionamiento del código SILNUC.

El código original está conformado por un programa principal (SILNUC), el cual usa 5 tarjetas perforadas donde se encuentran los datos de entrada y 8 subrutinas (MASTER, SETUP, DEPOSIT, SILKIN, WATER, PHF, SPECIFY y OUTPUT).

5.1 ACTUALIZACIÓN DE SILNUC A FORTRAN 77

Al enfrentarnos al reto de que en la actualidad no contamos ya con la tecnología que pudiera leer un código de esta índole, nos vimos en la necesidad de, en primera instancia, actualizar el código en su mismo lenguaje, es decir, actualizar el código a un lenguaje FORTAN que fuera similar y que no requiriera demasiados cambios para poder ser ejecutado con la tecnología actual disponible; esto con la finalidad de poder reproducir los resultados reportados por Weres et al. (1980).

El lenguaje FORTRAN que se eligió para hacer la primera traducción fue FORTRAN 77. Se eligió este lenguaje debido a su gran similitud con el lenguaje original del código y a que no requería una gran cantidad de cambios en su estructura, lo cual nos facilitaría su traducción y operación.

Lamentablemente, debido a que el reporte es bastante viejo, el archivo digital es poco legible y ocurrieron diversos problemas de interpretación del texto los cuales se fueron corrigiendo uno a uno.

Como ya se mencionó, el código SILNUC fue traducido inicialmente a FORTRAN 77 en el compilador Compaq Visual Fortran. Al convertir el código, una de las primeras mejoras que se hizo fue darle al programa la opción de obtener los datos de cada una de las tarjetas por medio de la lectura de archivos de texto (*.txt) donde el usuario puede manipular los datos de entrada de modo practico y fácil antes de iniciar la ejecución del código.

Debido a que FORTRAN 77 no puede alojar números mayores a 1.E80, pues esto provoca "errores" y "warnings" al compilar, se procedió a un cambio de sintaxis de este valor por 1.D80 y dichas variables de declararon como REAL (8) con lo que el problema fue resuelto.

Otro punto que se resolvió fue el caso en que coincidían los nombres de variables con alguna función o bien con algún nombre de bloque de variables, ya que dentro de FORTAN 77 está

prohibido el uso del mismo nombre para designar a una variable y un bloque de variables o subrutina, este se resolvió modificando los nombres de estas.





Figura 5.1-Diagrama del programa SILNUC actualizado en FORTRAN 77.

Todo el programa-código, excluyendo obviamente los archivos de texto, está incluido en un mismo archivo llamado por nosotros: "nucsil.for". Dentro de dicho archivo se encuentra el programa principal SILNUC, asi como todas las demás subrutinas; como ya se mencionó antes, el programa principal SILNUC, llama a las subrutinas SETUP y MASTER en ese preciso orden; la subrutina SETUP llama a las subrutinas SPECIFY y SILKIN, y esta ultima llama a su vez a las subrutinas WATER y PHF; la subrutina MASTER llama a las subrutinas OUTPUT, SPECIFY, SILKIN y DEPOSIT, la primera y la última de estas, llaman a su vez a las subrutinas SPECIFY y SILKIN.

El archivo "card1y2.txt" contiene:

NRUN = Número de problemas a resolver.

NREF = Número de elementos de temperatura, tiempo, etc. Debe ser mínimo = 1.

NCLC = Número de clases coloidales presentes inicialmente. Debe ser entero positivo. Si es = 0, el archivo card5.txt no será leído.

INX = Variable de control que determina si ocurre o no nucleación homogénea (=1 o =0). Si es = 0, NCLC debe ser mínimo = 1.

IPR = Variable de control de la frecuencia de salida de los datos. Si es = 0 o se deja en

blanco, adquiere un valor predeterminado = 3, lo cual es el valor recomendado. IPR2 = Variable que determinara el valor de IPR cuando TCV(1).GE.TCP. Si se deja vacía o =0 tendrá un valor predeterminado = 3.

KDP = Variable de control que determina el numero de pasos de deposición molecular entre las líneas de salida generadas por la subrutina DEPOSIT. Si se deja en blanco o =0, será =10.

NDP = Variable de control de la frecuencia de llamadas a OUTPUT, si IPR.GE.4. Si se deja en blanco o =0 tendrá un valor = 50.

ITPM = Variable que determina el valor de DTPM que es una variable de control de la frecuencia de llamadas a OUTPUT. No hay un valor predeterminado para esta variable pero se puede dejar en blanco o =0 y tendrá el mismo efecto.

$$DTPM = 2 ** ITPM \tag{5.1a}$$

IMAX = Determina el número máximo de pasos de deposición molecular. Su valor preestablecido es 1000.

IHCMA = Determina el valor de DHCMA. Si es = 0 o se deja en blanco, DHCMA será = 4.

$$DHCMA = 2 ** IHCMA$$
(5.1b)

IHCMI = Determina el valor de DHCMI. Si es = 0 o se deja en blanco, DHCMI será = 2048.

$$DHCMI = 2 ** IHCMI$$
(5.1c)

IDH = Determina el valor de DDH. Si es = 0 o se deja en blanco, DDH será = 64.

$$DDH = 2 ** IDH \tag{5.1d}$$

IMAXM = Determina el valor de TMAXM. Si es = 0 o se deja en blanco, TMAXM será = 64.

El archivo "card3.txt" contiene:

SILIN = Concentración inicial de sílice disuelta.

SILOUT = Concentración de sílice disuelta a la cual se detendrá el programa.

PHI = Valor del coeficiente osmótico practico. Si es = 0 o se deja en blanco, será = 0.92.

SMLI = Concentración inicial de NaCl. Si SMLI.GT.0, estará en unidades de moles/kg H₂O; si SMLI.LT.0, estará en unidades de mol/L, a temperatura ambiente. Si es = 0 o se deja en blanco, será = 0.088.

TOTFI = Concentración total inicial de fluoruro. Si SMLI.GT.0, estará en unidades de

moles/kg H₂O; si SMLI.LT.0, estará en unidades de mol/L, a temperatura ambiente.

CSII = Concentración inicial de sílice disuelta en forma iónica.

TCP = Tiempo al cual IPR será igual a IPR2. Si es = 0 o se deja en blanco, será = 1E10.

CDP = Segunda variable de control de la frecuencia de líneas de salida generadas por DEPOSIT. Si es = 0 o se deja en blanco, será = 0.001. El archivo "card4.txt" contiene:

TREFV = Secuencia de valores de tiempo a los cuales se interpolaran la temperatura, etc.

FLASHRV = Fracción de agua flasheada para cada tiempo TREFV.

TEMPRV = Temperatura medida para cada tiempo TREFV.

PHRV = Valores de pH para cada tiempo TREFV.

El archivo "card5.txt" contiene:

CLRV = Radio de partícula de cada clase coloidal inicial en nanómetros.

CLMV = Cantidad de sílice presente en cada clase coloidal.

El código completo de nuestra versión de SILNUC en FORTRAN 77 se encuentra en el ANEXO-A.

5.2 ACTUALIZACIÓN DE SILNUC A MATLAB 7

El objetivo principal de este proyecto, fue el de la actualización y mejora del código SILNUC, por lo cual se eligió al programa MATLAB 7 para desarrollar este proyecto. Se eligió por ser una plataforma visual fácil de usar y muy completa, no requiere de efectuar el proceso antiguo de primero compilar y crear el ejecutable, etc., ya que MATLAB en un solo paso compila, crea y ejecuta el programa.

Dentro del lenguaje MATLAB no existen las llamadas "subrutinas" (SUBROUTINE) que son utilizadas dentro de FORTRAN, pero existen sus análogas llamadas "funciones" (function).

Una de las mejoras realizadas a SILNUC fue la generación de la posibilidad de elegir entre, la interacción directa con el usuario para la introducción de los datos de entrada durante la ejecución del programa, o la introducción de los datos de forma manual dentro del mismo código antes de iniciar su ejecución; debido a esta mejora se logro eliminar el uso de archivos de datos o de texto adicionales para introducir los valores de las variables de entrada.

Otra de las grandes ventajas de MATLAB es que posee la capacidad de utilizar los datos generados para crear graficas y tablas lo cual hace mucho más práctico el manejo y observación de los datos

generados asi como la observación de las tendencias de estos. Y es precisamente esto, una de las grandes mejoras aportadas al programa SILNUC.

Uno de los mayores inconvenientes de la versión original de SILNUC es que hace uso de funcionescomandos y estructuras que ya no son usados actualmente.

Ejemplos de lo anterior, es la forma en que se utilizan los comandos condicionales IF. Ya que, dentro de FORTRAN, solo se puede dar una instrucción por cada IF, lo cual ocasiona el uso de varios IF si se desean realizar varias instrucciones bajo una misma condición; además, la sintaxis de este comando, es diferente en MATLAB.

Primeramente, en MATLAB, todos los comandos se escriben con minúsculas, por lo cual, en el caso anterior en particular seria "if" en vez de "IF".

La estructura del comando "if" para MATLAB es la siguiente:

```
if (condición)
```

Instrucciones...

end

Una de las ventajas de esta estructura es que se pueden ejecutar más de una instrucción bajo una sola mención de la condición. Asi mismo, otra ventaja es que podemos ver claramente donde inicia, donde termina y que instrucciones se ejecutaran bajo la condición dada.

Otro comando que, a pesar de aun existir en los lenguajes FORTRAN y C, no existe para MATLAB, es el comando DO; este comando fue reemplazado por, el comando de tipo ciclo de MATLAB, "while", cuya estructura es la siguiente:

```
while (condición)
Instrucciones...
end
```

Este comando es del tipo ciclo e indica que las instrucciones contenidas dentro de él, se ejecutaran, una y otra vez, siempre y cuando se cumpla la condición dada.

Otra de las desventajas de FORTRAN es la condición que dicta que los nombres de variables no deben poseer números ni letras minúsculas; también, dicta que la longitud máxima del nombre de las variables es de 7 caracteres.

En MATLAB, uno puede asignar a las variables el nombre que uno desee, no importando el uso de números y letras mayúsculas y minúsculas; las únicas restricciones son el uso de caracteres especiales y algunos nombres que coincidan con nombres de comandos.Otro punto que hace el uso de MATLAB una mejora para SILNUC es el hecho de que en MATLAB no se requiere el uso de etiquetas, ya que MATLAB es un lenguaje de programación estructurada. Y es en este rubro en el cual se tocara el mayor problema o desventaja de la programación en FORTRAN.

El mayor reto con enfrentado al querer reescribir el código SILNUC dentro del lenguaje de programación de MATLAB, fue que FORTRAN no es un lenguaje estructurado, es decir, hace uso de etiquetas, las cuales dictan, el inicio y final de los ciclos, el punto de re direccionamiento por medio de los comandos GOTO, y junto a las cuales se coloca un comando CONTINUE, que ordena al programa continuar a partir de ahí.

De este modo, uno de los mayores retos en la reestructuración de SILNUC fue el sustituir los comandos GOTO usados en FORTRAN. El comando GOTO usado en FORTRAN, sirve para saltar bloques de código o retroceder dentro del mismo código.

Según opiniones de expertos en programación, el uso indiscriminado del comando GOTO puede ocasionar serios problemas dentro de los programas, tales como errores inesperados en los resultados o la creación de ciclos infinitos.

Los comandos GOTO fueron sustituidos por comandos de tipo condicional o ciclos condicionales tales como los comandos "if" y "while", respectivamente. Debido a lo anterior, nos vimos en la necesidad de la creación de 2 nuevas funciones, a las cuales por facilidad nombramos como: "f1" y "f2". "f1" y "f2" son funciones usadas dentro de la función SETUP.

También se crearon otras 2 funciones, llamadas: ALG10 y CSF. Estas funciones se crearon pues son dependientes de valores variables de diversas variables.

Agregando las nuevas funciones, el programa SILNUC desarrollado en MATLAB consta de 13 archivos "*.m", los cuales son: el programa principal SILNUC.m y 12 funciones dentro de 12 archivos "*.m" (SETUP, MASTER, SPECIFY, SILKIN, WATER, PHF, f1, f2, OUTPUT, DEPOSIT, ALG10, CSF). La nueva estructura del programa se muestra a continuación: (*ver Figura 5.2*)



Figura 5.2-Diagrama del programa SILNUC actualizado en MATLAB 7.

Como ya se menciono antes, una de las grandes aportaciones de MATLAB es la facilidad del uso de datos para la generación de tablas y graficas; en este rubro, una de las grandes mejoras fue la generación de, 20 graficas diferentes que ilustran la evolución de diferentes variables de importancia, y de 3 tablas donde se muestran algunos valores de entrada y la evolución de las principales variables de mayor interés.

Otra ventaja de MATLAB sobre FORTRAN es que el último maneja una precisión de 7 a 15 dígitos decimales representativos, mientras que MATLAB maneja una precisión de 32 dígitos decimales representativos como mínimo, ya que esta precisión esta puede ser modificada por el usuario, esto hasta un máximo de 2^29 dígitos. Obviamente, al aumentar el número de dígitos representativos a utilizar dentro de la ejecución del programa, el tiempo de computo de verá afectado de manera directa.

A continuación se muestran un párrafo tomado de la hoja de descripción del producto "Compag Visual Fortran v 6.5" (ver Imagen 5.1) y un párrafo tomado de la página oficial de MATLAB en internet, "MathWorks" (ver Imagen 5.2):

COMPAQ

Software Product Description

Compaq Visual Fortran Version 6.5 for Win32 x86 Systems SPD 80.56.00

DESCRIPTION

- Language elements that support the various extended range and extended precision floating point architectural features:
 - 32-bit IEEE S floating data type, with an 8-bit exponent and 24-bit mantissa, which provides a range of 1.17549435E-38 (normalized) to 3.40282347E38 (the IEEE denormalized limit is 1.40129846E45) and a precision of typically 7 decimal digits
 - 64-bit IEEE T_floating data type, with an 11-bit exponent and 53-bit mantissa, which provides a range of 2.2250738585072013D-308 (normalized) to 1.7976931348623158D308 (the IEEE denormalized limit is 4.94065645841246544D-324) and a precision of typically 15 decimal digits

Imagen 5.1 Párrafo tomado de la hoja de descripción del producto "Compag Visual Fortran v 6.5"

| | MathWorks Acceler | ating the pace of engineering | I and science | O United States > | Contact Us How To Buy | Search MathWorks Create Account | Log Ir |
|-----|-------------------------------|-------------------------------|--------------------|-------------------|-------------------------|------------------------------------|--------|
| | Products & Services Solutions | Academia Support | User Community Eve | ents Company | | | |
| | Documentation Center | | | AAAA | Trial Software | Product Updates 🚦 | Shar |
| | urch R2014a Document | tation | | | | 6 | 2 |
| sea | in the boothing in | | | | | | |

When you use variable-precision arithmetic, the accuracy of approximations depends on the value of the global variable digits. This variable determines the number of decimal digits for numerical computations. By default, the toolbox uses 32 significant decimal digits, which roughly corresponds to double-precision floating-point accuracy. Imagen 5.2 Párrafo tomado de la página oficial de MATLAB [@-1].

Ahora bien, existen ciertas modificaciones "incomprensibles e indescriptibles" que FORTRAN realiza a los valores de las variables que, aunado a su carencia de precisión, modifican de forma importante los resultados obtenidos dentro de la ejecución de los cálculos del programa.

Ejemplos de este tipo ocurren al declarar una cierta variable con un valor = 5.0E-5, ya que FORTRAN, sin razón aparente, modifica este valor a 4.999999E-5, o bien, una variable con un valor = 6.0E-5, lo modifica de igual manera sin razón aparente a 6.000003E-5; lo anterior podría pensarse que en realidad no afecta en demasía los resultados donde se usen estos valores, pero en realidad, ya que SILNUC usa procesos iterativos, un error tan pequeño tiende a propagarse y crecer, y por lo tanto llegar a afectar los resultados de otras variables donde se ocupe este valor.

Frente a esto, MATLAB representa un programa que nos ofrece una mayor exactitud en nuestros resultados ya que realiza estrictamente las operaciones que se le indican con los valores tal cual como son asignados desde inicio.

En resumen, las mejoras hechas al código SILNUC gracias al uso del programa y lenguaje de programación utilizado por MATLAB, son: eliminación del uso de archivos de datos o de texto adicionales para introducir los valores de las variables de entrada, reescritura del programa en un lenguaje estructurado (MATLAB), generación de herramientas visuales que facilitan el manejo e interpretación de los datos y resultados obtenidos (tablas y gráficas) e incremento de la exactitud en los resultados obtenidos.

El código generado en MATLAB 7 se muestra en el ANEXO-B.

5.3 DATOS TÉCNICOS

La mejora del programa SILNUC fue realizada en una computadora portátil de marca TOSHIBA, modelo Satellite L305, con un procesador Pentium (R) Dual-Core CPU T4200 @ 2.00GHz 2.00GHz, una memoria RAM de 3.00GB, con un sistema operativo Windows Vista TM Home Basic Service Pack 1 de 32 bits.

El programa actualizado y mejorado en FORTRAN 77 se desarrollo en el programa Compaq Visual Fortran 6.6, mientras que el programa actualizado y mejorado en MATLAB se desarrollo en el programa MATLAB 7.

6. MODELACIÓN TEÓRICA

6.1 APLICACIÓN DEL PROGRAMA SILNUC

En el análisis teórico que a continuación se muestra, se tratarán dos salmueras de desecho diferentes, la primera con las características del fluido producido por el pozo A-5 del campo geotérmico de Los Azufres, Azufres-Michoacán (México), y la segunda con características de un pozo M del campo geotérmico de Cerro Prieto, Mexicali-Baja California (México) (datos reportados por Santoyo (1983) y Weres et al. (1980) respectivamente).

El pozo A-5 produce una mezcla agua vapor, conducida a través de un separador centrífugo donde se lleva a cabo la separación de las 2 fases. Finalmente, el vapor es conducido hacia las turbinas de generación donde el agua condensada se separa y es inyectada en un pozo reinyector ubicado a una distancia apropiada para no afectar la productividad del pozo productor.

Se considerara que la salmuera separada se encuentra a una temperatura de 150 °C. La conducción de la salmuera hasta el pozo reinyector es a través de una tubería aislada térmicamente, con el objeto de mantener la temperatura de la salmuera constante y evitar asi que la solubilidad de la sílice se vea afectada por este parámetro.

La simulación teórica se realizara bajo estas condiciones de reinyección con la finalidad de conocer los principales parámetros que afectan a la cinética de precipitación de la sílice de esta salmuera. Los datos experimentales obtenidos del campo geotérmico de Los Azufres, específicamente del pozo A-5 indican que las condiciones de operación de todo el proceso son las siguientes:

Pozo A-5, Los Azufres, Michoacán.

-Perfil de Temperaturas:

Temperatura de Fondo: 280 °C Temperatura de separación: 150 °C

Los datos reportados indican que la profundidad del pozo es de 1493 m. Tomando en cuenta este dato se puede considerar un perfil de temperatura lineal a lo largo de todo el pozo.

-Presión del cabezal: 185 lb/in²

 $-Q_{tot} = \text{Gasto total: 115 ton/h}$

$$Q_{tot} = Q_v + Q_l \tag{6.1}$$

 Q_v = Gasto de vapor: 73 ton/h Q_l = Gasto de agua: 42 ton/h La calidad del vapor de la mezcla es determinada por la siguiente ecuación:

$$\lambda = \left(\frac{Q_v}{Q_{tot}}\right) = \left(\frac{73}{115}\right) \approx 0.635 \ ton/hr \tag{6.2}$$

Estos datos fueron obtenidos del pozo A-5, del campo de Los Azufres, Michoacán, por la Superintendencia de Ingeniería Química, C.F.E.; bajo estas condiciones de producción se generaran los datos que se introducirán al programa SILNUC.

6.2 DATOS PARA LA SIMULACIÓN

Los datos que se proporcionaran al programa SILNUC para su procesamiento pueden clasificarse de la siguiente manera:

6.2.1 CONCENTRACIÓN INICIAL DE SIO2 MONOMÉRICA DISUELTA

Se considerara que la concentración de sílice es la correspondiente a la solubilidad del cuarzo en agua pura a la temperatura de fondo. Tomando en cuenta la temperatura de fondo = 280 °C correspondiente al pozo A-5 de Los Azufres, la concentración correspondiente es 0.541 g SiO₂/kg H₂O, esto según datos obtenidos por Cosner y Apps (1978) del Laboratorio Berkeley, reportados en la Tabla 2.1 de Weres et al. (1980).

6.2.2 CONCENTRACIÓN INICIAL DE SALES PRESENTES EN LA SALMUERA

La concentración de sales es un dato obtenido de la *Tabla-6.1*, la cual representa el análisis químico de la salmuera de desecho del pozo A-5. Ya que el cloruro de sodio representa la mayor parte de los electrolitos presentes, se puede considerar la salmuera como una solución de una sal compuesta de un catión y un anión monovalentes. Sin embargo, debido a que la salmuera posee otras sales disueltas, estas pueden ser aproximadas usando la concentración efectiva de NaCl, la cual es igual a la suma de las concentraciones molares de cloruros y bicarbonatos.

Del análisis reportado se encontró que estas sales tienen una concentración aproximada de 0.110 moles/kg a 70 °C. Se hizo una corrección para determinar la concentración de sales a la temperatura de 150 °C, considerando la pérdida de vapor que existe al llevarse a cabo la separación de las fases.

| | A | NALISIS QUIMICO DE UNA | SALMUERA GEOTE | RMICA | | |
|----------------|------------------|------------------------|--------------------|-------------------|------------------------------------|--|
| | | COMISION FEDERAL D | E ELECTRICIDAD - C | FE | | |
| | | LABORATORIO D | e geoquimica | | | |
| | Lugar: | Los Azufres | | | | |
| | Esta do: | Michoacan | | | | |
| Localización: | | | | Análisis No. : | Muestra : M-1 Fecha : 21-Sep-82 | |
| | Zona: | Laguna Verde | | Identificación : | | |
| | Fuente: | Pozo A-5 | | Temp. : 76 C | | |
| | | Agua Separada | | | | |
| | | | | | | |
| Sustancia | Simbolo | Contenido (mg/l) | Sustancia | Simbolo | Contenido (mg/l) | |
| Sodio | Na | 1689.00 | Fluoruros | F | 1.13 | |
| Potasio | К | 411.76 | Cloruros | Cl | 2887.70 | |
| Litio | Li | 24.19 | Bromuros | Br | ND | |
| Calcio | Ca | 7.43 | Hidroxidos | OH | ND | |
| Magnesio | Mg | ND | Bicarbonatos | HCO₃ | 55.49 | |
| Fierro | Fe | ND | Carbonatos | CO₃ | ND | |
| Cobre | Cu | ND | A. Carbonico | CO ₂ | 140.70 | |
| Silice | SiO ₂ | 945.29 | Acidez A. M. | CaCO₃ | ND | |
| Amonio | NH ₃ | 1.15 | Acidez F. | CaCO₃ | 159.89 | |
| Sulfatos | SO ₄ | 16.00 | Alcalinidad F. | CaCO₃ | ND | |
| Aluminio | Al | ND | Alcalinidad A. M. | CaCO₃ | 45.48 | |
| Rubidio | Rb | 5.52 | Acidez Libre | | ND | |
| Cesio | Cs | 2.98 | Dureza Total | CaCO ₃ | ND | |
| Boro | В | 252.78 | Nitratos | NO ₃ | 0.00 | |
| Arsenico | As | 24.90 | Nitritos | NO₃ | ND | |
| Mercurio | Hg | ND | Conductividad | μs/cm | 8600.00 | |
| Ac. Sulfidrico | H ₂ S | ND | pН | | 7.20 | |
| | | | S.T.D. | | 5 504.00 | |

Tabla-6.1 Análisis químico de una salmuera geotérmica [Tabla modificada de (Santoyo, 1983)].

Dicha corrección se logro mediante los siguientes balances de energía:

$$C_{NaCl}^{70\,^{\circ}C} = \left(C_{NaCl}^{70\,^{\circ}C}\right)(1-X) \tag{6.3}$$

Donde X:

$$H_L^{150°} = (1 - X)H_L^{70°} + XH_V^{70°}$$
(6.4)

Donde:

 H_L = Entalpia del líquido

 H_V = Entalpia del vapor

Para cada una de las entalpias anteriores, los valores se obtuvieron de las tablas de vapor: (Nieva y Santoyo, 1982)

$H_L(150^{\circ}C) = 632.20 \text{ J/g}$

 $H_L(70^{\circ}C) = 318.30 \text{ J/g}$

 $H_V(70 \ ^\circ C) = 2637.00 \ \text{J/g}$

Finalmente despejando X:

$$X = \frac{(H_L^{150°} - H_L^{70°})}{(H_V^{70°} - H_L^{70°})} = \frac{632.20 - 318.30}{2637.0 - 318.30} = 0.1354$$
(6.5)

Por lo tanto la concentración de sales a 150 °C es:

$$C_{NaCl}^{150\,^{\circ}C} = \frac{(C_{NaCl}^{70\,^{\circ}C})}{(1-X)} = \frac{0.110}{1-0.1354} = 0.130 \ mol/kg \tag{6.6}$$

6.2.3 CONCENTRACIÓN INICIAL DE FLUORUROS

La concentración inicial de fluoruros se determinó siguiendo la misma metodología para el cálculo de la concentración de sales, para obtener su concentración a 150 $^{\circ}$ C:

De la *Tabla 6.1*, $C_{F^-} = 1.13 \ ppm$

1.13
$$ppm = 1.13 \ \frac{mg}{l} \left(\frac{1 \ g}{1000 \ mg}\right) = 0.00113 \ g/l$$
 (6.7a)

$$F^{-} mol = \frac{0.00113 \, g/l}{18.9984} \approx 0.00006 \frac{mol}{kg} \quad @ 70^{\circ}C \tag{6.7b}$$

Mediante los balances de energía pertinentes, se obtuvo el valor corregido a 150 °C, el cual es = 0.0000688 mol/kg.

6.2.4 TEMPERATURA

Se desea mantener constante este parámetro durante la trayectoria del proceso de reinyección (T=150 $^{\circ}$ C).

A continuación se muestra la *Tabla-6.2* que contiene los parámetros de tiempo de residencia, cantidad de agua perdida por flasheo, temperatura y pH.

| Tiempo | Flash | Temperatura | рН |
|---------|--------|-------------|--------|
| 0.0000 | 0.0000 | 280.0000 | 7.2000 |
| 2.7480 | 0.0046 | 254.8800 | 7.2000 |
| 4.1840 | 0.0102 | 253.2200 | 7.2000 |
| 5.5670 | 0.0255 | 251.4400 | 7.2000 |
| 6.9760 | 0.0376 | 249.4400 | 7.2000 |
| 9.8670 | 0.0574 | 244.4400 | 7.2000 |
| 11.3080 | 0.0903 | 241.2700 | 7.2000 |
| 13.9000 | 0.1630 | 236.9400 | 7.2000 |
| 20.0000 | 0.2540 | 200.0000 | 7.2000 |
| 30.0000 | 0.3370 | 150.0000 | 7.2000 |
| 40.0000 | 0.3370 | 150.0000 | 7.2000 |
| 50.0000 | 0.3370 | 150.0000 | 7.2000 |
| 77.5000 | 0.3370 | 150.0000 | 7.2000 |

Tabla-6.2 Parámetros de tiempo de residencia, fracción de agua evaporada, temperatura y pH.

La obtención de los datos anteriores se realizó mediante la modelación del pozo de acuerdo a las condiciones de operación mencionadas en párrafos anteriores, esto con ayuda del paquete computacional VSTEAM (Intercomp, 1981) propiedad del IIE, el cual modela los procesos hidrodinámicos, térmicos y de equilibrio existentes en el pozo.

De dicha modelación se obtuvieron parámetros como: temperatura del fluido, profundidad, presión, velocidad de flujo, tiempo, densidad del liquido, densidad del vapor, y densidad de la mezcla, esto en base a la trayectoria que sigue el fluido desde el fondo del pozo hacia la superficie. Con la ayuda de todos estos parámetros se determino el tiempo de residencia del fluido, la cantidad de agua perdida por flasheo, y la temperatura.

Cuando el tiempo es igual a 0, la temperatura es la temperatura de fondo = 280 °C y la cantidad de agua perdida por flasheo es igual a 0. Bajo estas condiciones, la concentración de sílice corresponde a la saturación con cuarzo.

El equilibrio químico es destruido cuando la salmuera empieza a flashear en el pozo o cerca de él; esta, al perder rápidamente un porcentaje importante de agua en forma de vapor, disminuye su temperatura.

La vaporización inicia a los 2.748 minutos con el 0.46 % de agua evaporada, después de 77.50 minutos, la salmuera ha perdido el 33.70% de agua a consecuencia de la vaporización, y por lo tanto su temperatura ha disminuido hasta 150 °C. En ese momento, la salmuera fluye por una tubería que la conducirá hasta el pozo reinyector. Esta secuencia de temperatura describe lo que pasara cuando se inicien las pruebas de reinyección en Los Azufres, Michoacán.

6.3 PARÁMETROS EVALUADOS EN LAS SIMULACIONES

6.3.1 PH DE LA SALMUERA

El pH de la salmuera es un parámetro de gran importancia debido a que tiene un amplio efecto sobre la polimerización de la sílice. Su determinación potenciométrica derivada de múltiples análisis realizados a la salmuera indica un valor de 7.2 para esta.

El potencial de hidrógeno será uno de los diversos parámetros que modificaremos dentro de las simulaciones posteriores a realizar, con la finalidad de conocer de manera cuantitativa el efecto que posee este sobre la cinética de precipitación.

6.3.2 CONCENTRACIÓN INICIAL DE SÍLICE COLOIDAL

Este dato es otro parámetro de interés y también será alterado en las simulaciones para analizar su posible efecto al aumentar o disminuir. Para fines de mero conocimiento, cabe mencionar que en la práctica, la determinación de la concentración inicial de sílice coloidal se realiza comunmente mediante el análisis químico de la salmuera por el "Método del Molibdato Azul" (Iler, 1979).

6.3.3 RADIO DE PARTÍCULA

Este parámetro también será variado para observar su efecto y relevancia dentro de las simulaciones. En la práctica, el radio de partícula es determinado por medio del método de titulación potenciométrica del área superficial de una partícula (Método Sears). Una vez determinada el área superficial, podemos entonces encontrar su respectivo radio, haciendo la consideración de que las partículas coloidales son esféricas.

6.4 METODOLOGÍA

Se realizaron múltiples grupos de simulaciones donde se evaluaron las variables antes mencionadas para observar los efectos que estas desencadenaban sobre el proceso de nucleación de la sílice.

Los primeros 3 grupos evalúan los efectos de los diversos valores que pueden adquirir los parámetros del pH, la concentración inicial de sílice coloidal y el radio de partícula; en la última simulación se reproduce el ejemplo que se incluye en el trabajo de Weres et al. (1980).

Para todos los casos, se comparan los resultados obtenidos en MATLAB contra los resultados del programa mejorado en FORTRAN 77 (ya que este arroja los mismo resultados que la versión original); de modo exclusivo para el caso de la ultima simulación, se comparara estadísticamente la diferencia entre los resultados generados por MATLAB vs FORTRAN.

6.4.1 GRUPO NO. 1 DE SIMULACIONES – EVALUACIÓN DEL EFECTO DE LA ALTERACIÓN DEL RADIO DE PARTÍCULA, MATLAB VS FORTRAN

Datos de entrada:

Concentración inicial de sílice monomérica disuelta = $0.541 \text{ g/kg H}_2\text{O}$ Concentración inicial de sales presentes en la salmuera = $0.130 \text{ mol/kg H}_2\text{O}$ Concentración inicial de fluoruros = 6.0E-5 mol/kg H $_2\text{O}$ La *Tabla 6.2* contiene los datos de Tiempo, Agua flasheada, Temperatura, y pH. Concentración de sílice coloidal para cada partícula = $0.005 \text{ g/kg H}_2\text{O}$

En este grupo de simulaciones, se realizaran 3 simulaciones en las cuales se asignara a cada una un valor diferente de radio de partícula, dichos valores son los siguientes:

Radio de partícula (S1) = 2.0E-7 cm Radio de partícula (S1) = 3.5E-7 cm Radio de partícula (S1) = 5.0E-7 cm

Uno de los efectos a observar en esta serie de simulaciones es la conversión de sílice disuelta a sílice coloidal, en base al siguiente diagrama de flujo:



Donde:

K1 = Mecanismo de nucleación homogénea.

K2 = Mecanismo de deposición molecular.

Básicamente, SILNUC calcula cuantitativamente la cantidad de sílice coloidal al final de la reacción por medio de los mecanismos de nucleación homogénea y deposición molecular. La principal limitación del programa consiste en no poder simular la floculación de la sílice coloidal formada.

En base a los datos de este grupo de simulaciones, se presenta en seguida el desarrollo de los cálculos realizados por el programa SILNUC, estos, al iniciar el proceso de nucleación, con el objeto de explicar la metodología que es empleada durante todo el resto de la simulación.

Como se puede observar a continuación, para cada uno de los grupos de simulaciones, la variable NRUN es declarada como 1, a pesar de que se resolverán 3 problemas distintos en cada uno; lo anterior, se aplico de ese modo, ya que a pesar de que los programas desarrollados en este proyecto tienen la capacidad para efectuar varios problemas de manera consecutiva, los archivos usados para la entrada de los datos deben ser modificados antes de iniciar una nueva corrida, de lo contrario, se deben crear previamente los 4 archivos de datos por cada problema, y en el caso

especifico del programa desarrollado en MATLAB 7, se deben modificar los datos dentro del mismo código o bien, en el modo interfaz usuario-maquina, se deben volver a introducir todos los datos.

Precisamente, por todo lo antes mencionado, se decidió asignar el valor de 1 a la variable NRUN, asi, tenemos la capacidad y facilidad de, en vez de crear muchos archivos de datos, modificar los 4 archivos de datos creados inicialmente.

a) Datos de entrada:

NRUN = Número de problemas a resolver = 1 NREF = Numero de elementos de temperatura, tiempo, etc. = 13 NCLC = Número de clases coloidales presentes inicialmente = 1 INX = Ocurre o no nucleación homogénea (SI=1 o NO=0) = 1 IPR = Variable de control de la frecuencia de salida de los datos = 0 IPR2 = Variable que determinara el valor de IPR cuando TCV(1).GE.TCP = 0 KDP = Variable de control = 0 NDP = Variable de control = 0 ITPM = Variable de control = 0 IMAX = Determina el número máximo de pasos de deposición molecular = 0 IHCMA = Variable de control = 0 IDH = Variable de control = 0 IDH = Variable de control = 0

```
SILIN = Concentración inicial de sílice disuelta = 0.541 \text{ g SiO}_2 / \text{Kg H}_2\text{O}
SILOUT = Concentración de sílice disuelta final = 0.0 \text{ g SiO}_2 / \text{Kg H}_2\text{O}
PHI = Valor del coeficiente osmótico practico = 0
SMLI = Concentración inicial de NaCI = 0.130 \text{ mol/kg}
TOTFI = Concentración total inicial de fluoruro = 6.0\text{E}-5 mol/kg
CSII = Concentración inicial de sílice disuelta en forma iónica = 0
TCP = Tiempo al cual IPR será igual a IPR2 = 0
CDP = Variable de control = 0
```

```
TREFV = Secuencia de valores de tiempo = ver Tabla-6.2
FLASHRV = Fracción de agua flasheada para cada tiempo TREFV = ver Tabla-6.2
TEMPRV = Temperatura medida para cada tiempo TREFV = ver Tabla-6.2
PHRV = Valores de pH para cada tiempo TREFV = ver Tabla-6.2
```

```
CLRV = Radio de partícula S1 = 2.0E-7 cm
Radio de partícula S2 = 3.5E-7 cm
Radio de partícula S3 = 5.0E-7 cm
CLMV= Cantidad de sílice presente en cada clase coloidal (S1, S2 y S3) = 0.005 g/kg H<sub>2</sub>O
```

b) Cálculo del factor por el cual la composición de los sólidos disueltos en la salmuera se concentran como consecuencia del flasheo del vapor, FLC:

$$FLC = \frac{1.0}{1.0 - FLASH}$$
; donde; $FLASH = 0.3370$ (6.8a)

$$FLC = \frac{1.0}{1.0 - 0.3370} = 1.5083 ; FLC = 1.5083$$
 (6.8b)

c) Se procede a calcular las concentraciones reales:

$$SILIN = SILIN \cdot FLC = (0.541)(1.5083) = 0.8160 \ g \ SiO_2/kg \ H_2O$$
(6.9)

$$SMLI = SMLI \cdot FLC = (0.130)(1.5083) = 0.1960 \ mol/kg$$
(6.10)

$$TOTFI = TOTFI \cdot FLC = (6.0 \times 10^{-5})(1.5083) = 9.0498 \times 10^{-5} \ mol/kg$$
(6.11)

d) Cálculo de los coeficientes de actividad para las especies Na⁺, F⁻ y SiO₂, por medio de la ecuación de Debye-Hückel:

$$\log \gamma = \frac{-A_{DHZ} \cdot I^{1/2}}{1 + a \cdot B_{DH} \cdot I^{1/2}} + b \cdot I$$
(6.12)

Donde:

 $\begin{array}{l} A_{DH} = 0.6920 \\ B_{DH} = 0.3540 \\ I &= \mbox{Molalidad de la sal} = 0.1960 \mbox{ mol/kg} \\ a \mbox{ y } b = \mbox{Constantes especificas para cada especie, obtenidas a 150 °C.} \\ (ver Tabla-6.3) \end{array}$

Tabla-6.3 Constantes especificas para cada especie según la ecuación de Debye-Hückel [Tabla modificada de (Santoyo, 1983)].

| | F | Na | SiO ₂ |
|---|-------|-----|------------------|
| а | 4.0 | 3.0 | 4.0 |
| b | 0.075 | 02 | 0.0 |

Sustituyendo:

$$\gamma_{Na^+} = anti \log \left[-\frac{(0.692)(0.196)^{1/2}}{1 + (4)(0.354)(0.196)^{1/2}} + (0.075)(0.196) \right] = 10^{-0.1730} = 0.6705$$

$$\gamma_{F^-} = anti \log \left[-\frac{(0.692)(0.196)^{1/2}}{1 + (3)(0.354)(0.196)^{1/2}} + (0.20)(0.196) \right] = 10^{-0.1692} = 0.6774$$
(6.15)

$$\gamma_{SiO_2} = anti \log \left[-\frac{(0.692)(0.196)^{1/2}}{1 + (4)(0.354)(0.196)^{1/2}} + (0.0)(0.196) \right] = 10^{-0.1883} = 0.6482$$

(6.13)

(6.14)

e) En base al coeficiente de actividad del SiO₂ se calcula la fracción de sílice monomérica en forma iónica (ALPSIL), tal como se muestra a continuación:

$$ALPSIL = \frac{1.0}{1.0 + \gamma_{SiO_2} \cdot 10^{pK - pH}}$$
; $pK = 8.895 @\ 150^{\circ}C$ (6.16a)

$$ALPSIL = \frac{1.0}{1.0 + 0.6482 \cdot 10^{8.895 - 7.2}} = 0.0302 \ g \ SiO_2 / kg \ H_2O$$
(6.16b)

f) Cálculo de la solubilidad de sílice amorfa en agua pura:

$$\log C_0(0) = -\frac{731}{T} + 1.52 \quad ; \quad T = 423.15 \tag{6.17a}$$

$$\log C_0(0) = -\frac{731}{423.15} + 1.52 = -0.2075;$$
(6.17b)

$$C_0(0) = 10^{-0.2075} = 0.6201 \, g \, SiO_2 / kg \, H_2 O \tag{6.17c}$$

g) Cálculo de la solubilidad de NaCl:

$$C_0(m) = C_0(0) \cdot A_W$$
; $\ln A_W = 0.018 \cdot \nu \cdot m \cdot \phi$ (6.18a)

Donde:

 $C_0(m) =$ Solubilidad del SiO₂ en la salmuera

 A_W = Actividad del agua

 ν = Número de iones por mol de sal (2 para el NaCl)

- ϕ = Coeficiente osmótico práctico = 0.92
- m = Concentración de la sal disuelta en la solución = 0.1960 mol/kg

$$\ln A_W = 0.018(2.0)(0.92)(0.1960) = 0.00649$$
(6.18b)

$$A_W = \exp(0.00649) = 1.0065 \tag{6.18c}$$

$$C_0(m) = (0.6201)(1.0065) = 0.6241$$
 (6.18d)

h) Cálculo de las relaciones de saturación de sílice:

$$S_a = \frac{C_i}{C_0(0)} \cdot (1.0 - ALPSIL) = \frac{0.8160}{0.6201} \cdot (1.0 - 0.0302) = 1.2762$$
(6.19a)
$$S_r = S_a \cdot A_W = (1.2762)(1.0065) = 1.2845$$
(6.19b)

i) Calculo del pH nominal de la solución para poder calcular la velocidad de deposición molecular de la sílice:

$$pH_{nom} = pH + \log \frac{Na^+}{0.069}$$
; $Na^+ = actividad \ de \ la \ especie = m \cdot \gamma_{Na^+}$ (6.20a)

$$Na^{+} = m \cdot \gamma_{Na^{+}} = (0.1960)(0.6705) = 0.1314$$
 (6.20b)

$$pH_{nom} = 7.2 + \log \frac{0.1314}{0.069} = 7.4797$$
 (6.20c)

j) En base al pH y pH_{nom} se calculan las funciones triales de FPH y FINT mediante la interpolación de una tabla incorporada en el programa SILNUC:

$$FPH = 1.5323 @ pH = 7.2$$

 $FINT = 0.1247 @ pH = 7.4797$

k) Cálculo de la tensión superficial de la interfase sílice-agua, por medio de la siguiente ecuación empírica:

$$\gamma = 63.68 - (0.049 + (0.2174) \cdot FINT) \cdot T$$
(6.21a)

$$\gamma = 63.68 - (0.049 + (0.2174)(0.1247))(423.15) = 31.47$$
(6.21b)

$$\gamma = 31.47 \ ergs/^{\circ}K$$
(6.21c)

I) Cálculo de la velocidad de deposición molecular en presencia de todas las sales:

$$R_{md} = F_f(S_a) \cdot (1 - S^{-1}) \cdot K_{OH}(T) \cdot FPH + \left(M \cdot \left((1 - ALPF)(K_{HF}(T)) + (ALPF)(K_{F^-}(T))\right)\right)$$
(6.22)

Donde:

El parámetro $F_f(S_a)$ es determinado en función de los valores de S_a y S_t :

$$si S_a < S_t$$
; $F_f(S_a) = S_a^{5}$ (6.23a)

$$si S_a > S_t$$
; $F_f(S_a) = S_t^5 + 5S_t^4 \cdot (S_a - S_t)$ (6.23b)

Tal que:

$$S_t = anti \log \left(0.0977 + \frac{75.84}{T} \right) = 1.8920$$
; $S_a = 1.2761$ (6.24a)

$$F_f(S_a) = (1.2761)^5 = 3.384$$
 (6.24b)

$$S = \frac{C_i}{C_0(0)} = \frac{0.8160}{0.6201} = 1.316 \rightarrow relación \ de \ saturación$$
 (6.24c)

 $K_{OH}(T)$ = Constante de equilibrio:

$$\log K_{OH}(T) = 3.1171 - \frac{4296.6}{T}$$
; $K_{OH}(T) = 9.19E - 8 g/cm^2 min$ (6.25)

M =Cantidad de fluoruro presente = 1.038E-4 mol/kg

 $K_{HF}(T)$ y $K_{F^-}(T)$ = Constantes de equilibrio:

$$K_{HF}(T) = -11.723 + \frac{4039}{T}$$
; $K_{HF}(T) = 6.639E - 3$ (6.26)

$$K_{F^-}(T) = -2.647 + \frac{1183}{T}$$
; $K_{F^-}(T) = 1.4083$ (6.27)

ALPF = Fracción de fluoruro presente como F⁻:

$$ALPF = \frac{1}{\left(1 + \frac{H^+ \cdot \gamma_{F^-}}{K_{HF}(T)}\right)} ; \quad H^+ = M \cdot \gamma_{F^-} = (1.038E - 4)(0.6774) = 7.0314E - 5$$
(6.28a)

$$ALPF = \frac{1}{\left(1 + \frac{(7.0314E - 5)(0.6774)}{6.639E - 3}\right)} = 0.9932$$
 (6.28b)

Agrupando valores y sustituyendo, encontramos:

$$R_{md} = (3.384)(1 - (1.316)^{-1})(9.19 \times 10^{-8})(1.5323) + (1.038 \times 10^{-4}((1 - 0.9932)(6.639 \times 10^{-3}) + (0.9932)(1.4083))))$$

$$R_{md} = 1.453E - 4 @ t = 30 min$$

m) Se inicial el cálculo del proceso de nucleación homogénea con el cálculo del radio del núcleo crítico:

$$r^* = \frac{2\gamma}{\rho_n \cdot K_B \cdot T \cdot \ln S_r}$$
; $\rho_n = 2.21E22 \text{ unidades de } SiO_2/cm^3$ (6.30a)

$$K_B = constante \ de \ Boltzmann = 1.38E - 16$$
 (6.30b)

$$r^* = \frac{2(31.47)}{(2.21E22)(1.38E - 16)(423.15)(\ln 1.2845)} = 1.948E - 7 \ cm \tag{6.30c}$$

n) Calculo del área superficial del núcleo considerándolo como una partícula esférica:

$$A^* = 4\pi r^{*2} = 4(3.1416)(1.948E - 7)^2 = 4.769E - 13\ cm^2 \tag{6.31}$$

o) Cálculo de la energía libre de formación del proceso de nucleación homogénea:

$$\Delta F^* = \frac{\gamma \cdot A^*}{3} = \frac{31.47(4.769E - 13)}{3} = 5.003E - 12 \ ergs \cdot cm/^{\circ}K \tag{6.32}$$

p) Cálculo del número de unidades de sílice existentes en el núcleo:

(6.33)
$$n^* = \frac{4\pi}{3} \cdot \rho_n \cdot r^{*3} = \frac{4(3.1416)}{3} (2.21E22)(1.948E - 7)^3 = 684.30 \text{ unidades de SiO}_2$$

q) Cálculo del factor de Zeldovich:

$$Z = \frac{2}{3} \left[\frac{3}{4\pi\rho_n n^{*2}} \right]^{1/3} \left(\frac{\gamma}{K_B T} \right)^{1/2}$$
$$= \frac{2}{3} \left[\frac{3}{4\pi(2.21E22)(684.3)^2} \right]^{1/3} \left(\frac{31.47}{(1.380E - 16)(423.15)} \right)^{1/2}$$

$$Z = 4.406E - 3 \tag{6.34}$$

r) Tamaño de las partículas de radio critico:

$$AN = n^* + \frac{0.5}{Z} = 684.30 + \frac{0.5}{4.406E - 3} = 797.8 \text{ unidades de } SiO_2$$
(6.35)

s) Cálculo de la función de partición total del núcleo, QT:

$$QT = Q_{LP} \cdot (\exp{-\Delta F^*})$$
; $Q_{LP} = 3.34E25$; (6.36a)

$$QT = 3.34E25(\exp(-5.003E - 12)) = 3.34E25 \text{ unidades de } SiO_2/kg$$
 (6.36b)

t) Cálculo de la velocidad de deposición del monómero sobre la superficie del núcleo, CN:

$$CN = R_{md} \cdot \rho_n \cdot A^* = 1.453E - 4(2.21E22)(4.769E - 13) = 1.5314E6 \ g \ SiO_2/min$$
(6.37)

u) Cálculo de la velocidad de nucleación homogénea, I_n :

$$I_n = QT \cdot CN \cdot Z = (3.34 \times 10^{25})(1.5314 \times 10^6)(4.406 \times 10^{-3})$$

= 2.254E29 unidades de SiO₂/min
(6.38)

v) Cálculo del tiempo constante para que la nucleación se lleva a cabo:

$$TAUC = \frac{1}{4 \cdot \rho_n \cdot R_{md} \cdot A^* \cdot Z^2} = \frac{1}{4(2.21E22)(1.453E - 4)(4.769E - 13)(4.406E - 3)^2}$$
$$TAUC = 8.41E - 3 \min$$
(6.39)

w) Se efectúa una comparación de tiempos dentro del programa:

$$TAUN = 6.95E7 \text{ min} \rightarrow tiempo \ de \ inducción$$

 $TAUD = 3.625E1 \ min \rightarrow tiempo \ de \ natural \ de \ incrustación$

Se calcula el tiempo de inducción real (TAU), con la comparación entre TAUN y TAUD, tomando como cierto al menor de estos, tal que:

$$TAU = 3.625E1 min$$

Enseguida se calcula el incremento DELTH, el programa estimará este de manera iterativa hasta que alcance el tiempo máximo establecido en la simulación. (TMAXM = 77.50 –ver Tabla-6.2)

$$DELTH = \frac{TAU}{64} = \frac{3.625E1}{64} = 0.5664 min$$
(6.40)

x) Finalmente se calcula la variación de la concentración de sílice con respecto al tiempo, es decir, la cinética de reacción, de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$\frac{dc}{dt} = -K(Y,T) \cdot FPH \cdot f(Y,C) \cdot a_1 \cdot \left[1 + \frac{C_1 + C_i}{m_1}\right]^{2/3}$$
(6.41)

Donde, $K(Y,T) \neq f(Y,C)$ son funciones triales incorporadas en SILNUC. De tal forma que al inicio de la reacción, la concentración de SiO₂ varió de 0.8160 - 0.8159 g/kg.

Mientras que la concentración de sílice coloidal varía en una cantidad representada por la suma de la concentración inicial (0.005) y la formada por los procesos de nucleación y deposición. Con la finalidad de conservar el balance de materia siguiente:

Concentracion de
$$SiO_2$$
 coloidal = $0.005 + 0.0001 = 0.0051 g SiO_2/kg$

Tomando en consideración el valor anterior y el radio de partícula, se calcula el numero de partículas, área superficial total, radio promedio de cada partícula y masa promedio, recordando que estos valores son todos iniciales.

El valor de DELTH se incrementa en los 30 minutos iniciales por medio de cálculos iterativos hasta alcanzar el tiempo límite.

Los resultados obtenidos de esta primer serie de simulaciones son mostradas en la *Tabla-6.4* y en la *Figura 6.1*, la cual presenta la variación de la concentración de sílice disuelta durante todo el proceso, a diferentes radios de partícula.

| ACTUALIZACIÓN DEL CÓ | ÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN |
|----------------------|--|
| нс | DMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS |

| Resultados del Grupo de Simulaciones - 1 | | | | | | | | |
|---|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|--|--|
| Programa | FORTRAN | | | MATLAB | | | | |
| Simulación | S1 | S2 | S3 | S1 | S2 | \$3 | | |
| Radio de Particula (cm) | 2.0E-07 | 3.5E-07 | 5.0E-07 | 2.0E-07 | 3.5E-07 | 5.0E-07 | | |
| Tiempo de Induccion (min) | 3.6254E+01 | 6.3445E+01 | 9.0636E+01 | 3.6254E+01 | 6.3445E+01 | 9.0636E+01 | | |
| Concentración de Silice Disuelta (gr SiO ₂ /kg H ₂ O) | 0.8160-0.6987 | 0.8160-0.6683 | 0.8160-0.6678 | 0.8160-0.6989 | 0.8160-0.6662 | 0.8160-0.6653 | | |
| Concentración de Silice Coloidal (gr SiO ₂ /kg H ₂ O) | 0.0050-0.1249 | 0.0050-0.1552 | 0.0050-0.1557 | 0.0050-0.1247 | 0.0050-0.1573 | 0.0050-0.1583 | | |
| Número Total de Particulas Coloidales | 1.0188E+17 | 1.9009E+16 | 6.5202E+15 | 1.0188E+17 | 1.9009E+16 | 6.5202E+15 | | |
| Area Total Superficial (cm ²) | 3.3270E+05 | 2.1980E+05 | 1.5419E+05 | 3.3232E+05 | 2.2175E+05 | 1.5584E+05 | | |
| Radio Promedio de cada Particula (cm) | 5.0978E-07 | 9.5923E-07 | 1.3718E-06 | 5.0948E-07 | 9.6349E-07 | 1.3791E-06 | | |
| Concentración de Silice Coloidal en cada Particula (gr SiO ₂ /kg H ₂ O) | 1.2258E-18 | 8.1669E-18 | 2.3886E-17 | 1.2237E-18 | 8.2760E-18 | 2.4271E-17 | | |
| Número de Nuevas Clases Coloidales Formadas | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | | |

Tabla-6.4 Resultados obtenidos del primer grupo de simulaciones a diferentes valores de radio de partícula.



Figura 6.1-Variación de la concentración de sílice según resultados obtenidos por el Grupo No. 1 de simulaciones.

En la *Tabla-6.4* se puede observar que el numero de partículas nucleadas es mayor para el caso en que se considero una clase de partícula coloidal inicial con un radio de $2x10^{-7}$ cm, esto se debe a
que el tamaño de partícula coloidal inicial se puede considerar como el radio critico, y por lo tanto las partículas creadas deberán tener un tamaño igual o mayor a este. De igual manera para los demás tamaños de partícula.

Lo anterior conlleva a que de igual manera que con el tamaño, el área superficial total sea mayor para el caso del radio más pequeño.

No obstante, la concentración de sílice coloidal promedio en cada partícula es directamente proporcional a su radio, y por lo tanto la conversión de sílice disuelta a coloidal es mayor para el caso del radio más grande.

La *Figura 6.1* nos muestra la evolución de la concentración de la sílice disuelta a través del tiempo para cada caso. En ella se puede observar que la concentración de sílice disuelta para los tres casos hasta un tiempo de aproximadamente 31 minutos, después del periodo de inducción, permanece en un estado aparentemente estable donde los tres casos tienen aproximadamente la misma tasa de conversión de sílice disuelta a coloidal.

Este lapso, de acuerdo a los resultados obtenidos de la simulación y a la pendiente que muestra la curva, está asociado principalmente con el proceso de deposición molecular que es un proceso de conversión de sílice disuelta a coloidal relativamente lento.

Ahora bien existe una marcada diferencia entre las tres curvas a partir de los 31 minutos, principalmente entre las correspondientes a los dos radios mayores respecto del menor.

La diferencia entre las 3 curvas se debe directamente al tamaño promedio de las partículas coloidales, y a la tasa de deposición molecular.

El radio promedio de las partículas coloidales influye directamente en la cantidad de sílice depuesta ya que al tener un radio mayor poseen asi mismo una mayor área superficial y por ende consumen una mayor cantidad de sílice disuelta.

La tasa de deposición molecular es mayor en presencia de partículas coloidales de menor radio por lo cual el tiempo necesario para deponer una cantidad determinada de sílice sobre la superficie de las partículas coloidales será menor para radios de menor tamaño.

En el caso particular de la curva que genera el radio de menor tamaño, esta se puede explicar separándola en tres secciones.

La primera sección va del tiempo 0 a los 31 minutos y corresponde a la etapa donde los procesos de nucleación y deposición inician, siendo la deposición el proceso dominante ya que consume la mayor parte de la sílice disuelta a pesar de que en esta sección se forma una nueva clase de partículas coloidales; por ello la pendiente en este caso en mínima.

La segunda sección abarca de los 31 a los 39 min y corresponde a la etapa donde la nucleación y la deposición tienen su clímax, ya que en esta etapa se forman 2 nuevas clases de partículas coloidales y la deposición molecular alcanza su valor más alto. Por ello en esta sección la

pendiente se incrementa notablemente respecto a las otras secciones. Para esta sección la deposición molecular es también el proceso dominante.

La tercera sección abarca la etapa final de la curva de los 39 a los 70 min aproximadamente, y corresponde a la etapa donde la deposición molecular disminuye hasta valores menores a la sección 2 pero mayores a la sección 1 de la curva. Por ello la pendiente de esta sección es menor a la sección anterior pero mayor a la primera. En esta etapa ya no hay nucleación.

Las curvas de los radios mayores también presentan estas 3 secciones antes mencionadas pero el cambio de pendiente entre ellas no es tan notorio como en la curva del radio menor. Esto se debe a que la tasa de conversión de sílice disuelta a coloidal a lo largo de las últimas 2 etapas posee un cambio de pendiente mínimo.

También se puede observar que los resultados obtenidos por ambos programas, para las 3 simulaciones realizadas, siguen la misma tendencia a lo largo de la curva, presentando una mínima diferencia al final de esta.

6.4.2 GRUPO NO. 2 DE SIMULACIONES – EVALUACIÓN DEL EFECTO DE LA ALTERACIÓN DE LA CONCENTRACIÓN INICIAL DE SÍLICE COLOIDAL, MATLAB VS FORTRAN

Datos de entrada:

Concentración inicial de sílice monomérica disuelta = $0.541 \text{ g/kg H}_2\text{O}$ Concentración inicial de sales presentes en la salmuera = $0.130 \text{ mol/kg H}_2\text{O}$ Concentración inicial de fluoruros = 6.0E-5 mol/kg H $_2\text{O}$ La *Tabla-6.2* contiene los datos de Tiempo, Agua flasheada, Temperatura, y pH. Radio de partícula = 2.0E-7 cm

En este grupo de simulaciones, se realizaran 3 simulaciones en las cuales se asignara a cada una un valor diferente de concentración inicial de sílice coloidal, dichos valores son los siguientes:

Concentración inicial de sílice coloidal (S1) = $0.003 \text{ g/kg H}_2\text{O}$ Concentración inicial de sílice coloidal (S1) = $0.005 \text{ g/kg H}_2\text{O}$ Concentración inicial de sílice coloidal (S1) = $0.009 \text{ g/kg H}_2\text{O}$

De acuerdo al código computacional los datos de entrada serian declarados por medio de las siguientes variables de la manera a continuación descrita:

Datos de entrada:

NRUN = Número de problemas a resolver = 3 NREF = Numero de elementos de temperatura, tiempo, etc. = 13 NCLC = Número de clases coloidales presentes inicialmente = 1 INX = Ocurre o no nucleación homogénea (SI=1 o NO=0) = 1 IPR = Variable de control de la frecuencia de salida de los datos = 0 IPR2 = Variable que determinara el valor de IPR cuando TCV(1).GE.TCP = 0 KDP = Variable de control = 0 NDP = Variable de control = 0 ITPM = Variable de control = 0 IMAX = Determina el número máximo de pasos de deposición molecular = 0 IHCMA = Variable de control = 0 IHCMI = Variable de control = 0 IDH = Variable de control = 0 IMAXM = Variable de control = 0

SILIN = Concentración inicial de sílice disuelta = $0.541 \text{ g SiO} / \text{kg H}_2\text{O}$ SILOUT = Concentración de sílice disuelta final = $0.0 \text{ g SiO} / \text{kg H}_2\text{O}$ PHI = Valor del coeficiente osmótico practico = 0SMLI = Concentración inicial de NaCI = 0.130 mol/kgTOTFI = Concentración total inicial de fluoruro = 6.0E-5 mol/kg CSII = Concentración inicial de sílice disuelta en forma iónica = 0TCP = Tiempo al cual IPR será igual a IPR2 = 0CDP = Variable de control = 0

```
TREFV = Secuencia de valores de tiempo = ver Tabla-6.2
FLASHRV = Fracción de agua flasheada para cada tiempo TREFV = ver Tabla-6.2
TEMPRV = Temperatura medida para cada tiempo TREFV = ver Tabla-6.2
PHRV = Valores de pH para cada tiempo TREFV = ver Tabla-6.2
```

CLRV = Radio de partícula S1 = 2.0E-7 cm

CLMV= Cantidad inicial de sílice presente en cada clase coloidal S1 = 0.003 g/kg H_2O Cantidad inicial de sílice presente en cada clase coloidal S2 = 0.005 g/kg H_2O Cantidad inicial de sílice presente en cada clase coloidal S3 = 0.009 g/kg H_2O

Los resultados de este grupo de simulaciones se presentan en la *Tabla-6.5* y en la *Figura 6.2* la cual ilustra la variación de la concentración de sílice disuelta durante todo el proceso, para diferentes concentraciones iniciales de sílice coloidal.

| ACTUALIZACIÓN DEL O | CÓDIGO SILNUC EN MATLA | B PARA LA MODELACI | ÓN NUMÉRICA DE LOS | PROCESOS DE NUCLEACI | ÓN |
|---------------------|------------------------|---------------------|--------------------|----------------------|----|
| 1 | HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN | MOLECULAR DE SÍLICE | EN SISTEMAS GEOTÉR | RMICOS | |

| | R | esultados del Gru | po de Simulacion | es - 2 | | |
|---|---------------|-------------------|------------------|---------------|---------------|---------------|
| Programa | FORTRAN | | | MATLAB | | |
| Simulación | S1 | S2 | S3 | S1 | S2 | S3 |
| Concentración de Silice Coloidal (gr SiO ₂ /kg H ₂ O) | 0.003 | 0.005 | 0.009 | 0.003 | 0.005 | 0.009 |
| Tiempo de Induccion (min) | 6.3445E+01 | 3.6254E+01 | 2.0141E+01 | 6.0424E+01 | 3.6254E+01 | 2.0141E+01 |
| Concentración de Silice Disuelta (gr SiO ₂ /kg H ₂ O) | 0.8160-0.6683 | 0.8160-0.6987 | 0.8160-0.7163 | 0.8160-0.6870 | 0.8160-0.6989 | 0.8160-0.7163 |
| Concentración de Silice Coloidal (gr SiO ₂ /kg H ₂ O) | 0.003-0.1552 | 0.0050-0.1249 | 0.009-0.1133 | 0.003-0.1335 | 0.0050-0.1247 | 0.009-0.1133 |
| Número Total de Particulas Coloidales | 1.9009E+16 | 1.0188E+17 | 1.8338E+17 | 6.1127E+16 | 1.0188E+17 | 1.8338E+17 |
| Area Total Superficial (cm ²) | 2.1980E+05 | 3.3270E+05 | 3.7927E+05 | 2.9341E+05 | 3.3232E+05 | 3.7923E+05 |
| Radio Promedio de cada Particula (cm) | 9.5923E-07 | 5.0978E-07 | 4.0569E-07 | 6.1804E-07 | 5.0948E-07 | 4.0566E-07 |
| Concentración de Silice Coloidal en cada Particula (gr SiO ₂ /kg H ₂ O) | 8.1669E-18 | 1.2258E-18 | 6.1782E-19 | 2.1845E-18 | 1.2237E-18 | 6.1771E-19 |
| Número de Nuevas Clases Coloidales Formadas | 3 | 3 | 4 | 3 | 3 | 4 |

Tabla-6.5 Resultados obtenidos del segundo grupo de simulaciones a diferentes valores de concentración inicial de sílice coloidal.



Figura 6.2-Variación de la concentración de sílice según resultados obtenidos por el Grupo No. 2 de simulaciones.

En la *Tabla-6.5* se puede observar que el número de partículas coloidales es mayor para el caso en que se considero una concentración de sílice coloidal de 0.009, esto parece bastante lógico ya que la formación de partículas coloidales requiere la presencia de sílice coloidal y por lo tanto al tener una concentración inicial mayor de esta es obvio que se genere una mayor cantidad de partículas coloidales.

Por lo tanto se puede afirmar que la cantidad de partículas coloidales es directamente proporcional a la concentración inicial de sílice coloidal para cada caso. Y ya que en este grupo de simulaciones el radio se mantuvo constante, el valor de área superficial más elevado lo posee el conjunto de datos donde la concentración de sílice coloidal es más alta.

Para este grupo de simulaciones, el radio promedio es inversamente proporcional a la concentración de sílice coloidal, esto se debe a que en presencia de concentraciones elevadas de sílice coloidal se generan rápidamente radios de partícula pequeños en comparación a cuando se realiza en presencia de concentraciones menores.

Como puede observarse, a mayor concentración inicial de sílice coloidal, la conversión final de sílice disuelta a sílice coloidal es menor. Esto resulta coherente ya que al existir inicialmente una cierta cantidad de sílice coloidal, el sistema ya no requiere realizar ese gasto de energía para generar núcleos que crecerán a partículas coloidales.

Sin embargo, en el caso donde la concentración es mayor, se generan 4 clases coloidales, lo cual podría sonar contradictorio, pero no lo es, ya que los núcleos formados son de un tamaño menor al de los otros casos.

La *Figura 6.2* nos muestra la evolución de la concentración de la sílice disuelta a través del tiempo para cada caso. En ella se puede observar que la concentración de sílice disuelta para los tres casos hasta un tiempo de aproximadamente 31 minutos, después del periodo de inducción, permanece en un estado aparentemente estable donde los tres casos tienen aproximadamente la misma tasa de conversión de sílice disuelta a coloidal.

Este lapso, de acuerdo a los resultados obtenidos de la simulación y a la pendiente que muestra la curva, está asociado principalmente con el proceso de deposición molecular que es un proceso de conversión de sílice disuelta a coloidal relativamente lento.

Existe una ligera diferencia entre los tres pares de curvas entre los 31 y los 40 minutos aproximadamente, la cual se hace más notoria después de los 40 minutos. También se puede observar una diferencia en las curvas generadas por MATLAB y FORTRAN para la concentración de sílice coloidal más baja.

La diferencia entre las 3 curvas se debe a la cantidad de sílice coloidal, y a la tasa de deposición molecular.

La cantidad de sílice coloidal influye directamente en la tasa de conversión de sílice disuelta a coloidal; estas son inversamente proporcionales entre sí.

La tasa de deposición molecular se incrementa en presencia de una mayor cantidad de sílice coloidal pues existe una mayor área donde la sílice disuelta puede deponerse. Sin embargo una vez que pasa alcanza su valor máximo, la tasa de deposición disminuye.

En el caso particular de las curvas que generan MATLAB y FORTRAN para la concentración más baja, las diferencias se deben a la localización del punto donde la tasa de deposición es máxima. Esto es consecuencia de las diferencias en la precisión decimal de las plataformas de los códigos.

Los 3 pares de curvas pueden analizarse como en el grupo de simulaciones anterior dividiéndolas en 3 secciones. En esta simulación las 3 secciones son notorias en todos los casos.

La primera sección va del tiempo 0 a los 31 minutos y corresponde a la etapa donde los procesos de nucleación y deposición inician, siendo la deposición el proceso dominante ya que consume la mayor parte de la sílice disuelta a pesar de que en esta sección se forma una nueva clase de partículas coloidales; por ello la pendiente en este caso en mínima.

La segunda sección abarca de los 31 a los 39 min aproximadamente, y corresponde a la etapa donde la nucleación y la deposición tienen su clímax, ya que en esta etapa se forman 2 (concentraciones de 0.003 y 0.005) y 3 (concentración de 0.009) nuevas clases de partículas coloidales y la deposición molecular alcanza su valor más alto. Por ello en esta sección la pendiente se incrementa notablemente respecto a las otras secciones. Para esta sección la deposición molecular es también el proceso dominante.

La tercera sección abarca la etapa final de la curva de los 39 a los 75 min aproximadamente, y corresponde a la etapa donde la deposición molecular disminuye hasta valores menores a la sección 2 pero mayores a la sección 1 de la curva. Por ello la pendiente de esta sección es menor a la sección anterior pero mayor a la primera. En esta etapa ya no hay nucleación.

Las curvas de los radios mayores también presentan estas 3 secciones antes mencionadas pero el cambio de pendiente entre ellas no es tan notorio como en la curva del radio menor. Esto se debe a que la tasa de conversión de sílice disuelta a coloidal a lo largo de las últimas 2 etapas posee un cambio de pendiente mínimo.

También se puede observar que los resultados obtenidos por ambos programas, para las 3 simulaciones realizadas, siguen la misma tendencia a lo largo de la curva, presentando una mínima diferencia al final de esta, exceptuando las curvas generadas a la menor concentración.

6.4.3 GRUPO NO. 3 DE SIMULACIONES – EVALUACIÓN DEL EFECTO DE LA ALTERACIÓN DEL PH, MATLAB VS FORTRAN

Datos de entrada:

Concentración inicial de sílice monomérica disuelta = 0.541 g/kg H_2O Concentración inicial de sales presentes en la salmuera = $0.130 \text{ mol/kg H}_2O$ Concentración inicial de fluoruros = $6.0E-5 \text{ mol/kg H}_2O$ En este grupo de simulaciones, se realizaran 3 simulaciones en las cuales se asignara a cada una un valor diferente de pH, dichos valores son los siguientes:

pH (S1) = 7.2 pH (S1) = 7.5 pH (S1) = 7.9 La *Tabla-6.2* contiene los datos de Tiempo, Agua flasheada y Temperatura. Radio de partícula = 2.0E-7 cm Concentración inicial de sílice coloidal = 0.005 g/kg H₂O

De acuerdo al código computacional los datos de entrada serian declarados por medio de las siguientes variables de la manera a continuación descrita:

Datos de entrada:

NRUN = Número de problemas a resolver = 3 NREF = Numero de elementos de temperatura, tiempo, etc. = 13 NCLC = Número de clases coloidales presentes inicialmente = 1 INX = Ocurre o no nucleación homogénea (SI=1 o NO=0) = 1 IPR = Variable de control de la frecuencia de salida de los datos = 0 IPR2 = Variable que determinara el valor de IPR cuando TCV(1).GE.TCP = 0 KDP = Variable de control = 0 NDP = Variable de control = 0 ITPM = Variable de control = 0 IMAX = Determina el número máximo de pasos de deposición molecular = 0 IHCMA = Variable de control = 0 IDH = Variable de control = 0 IMAXM = Variable de control = 0

SILIN = Concentración inicial de sílice disuelta = 0.541 g SiO₂ / kg H₂O
SILOUT = Concentración de sílice disuelta final = 0.0 g SiO₂ / kg H₂O
PHI = Valor del coeficiente osmótico practico = 0
SMLI = Concentración inicial de NaCl = 0.130 mol/kg
TOTFI = Concentración total inicial de fluoruro = 6.0E-5 mol/kg
CSII = Concentración inicial de sílice disuelta en forma iónica = 0
TCP = Tiempo al cual IPR será igual a IPR2 = 0
CDP = Variable de control = 0

TREFV = Secuencia de valores de tiempo = *ver Tabla-6.2* FLASHRV = Fracción de agua flasheada para cada tiempo TREFV = *ver Tabla-6.2* TEMPRV = Temperatura medida para cada tiempo TREFV = *ver Tabla-6.2* PHRV = Valores de pH para cada tiempo TREFV (S1) = 7.2 Valores de pH para cada tiempo TREFV (S2) = 7.5 Valores de pH para cada tiempo TREFV (S3) = 7.9

CLRV = Radio de partícula S1 = 2.0E-7 cm

CLMV= Cantidad inicial de sílice presente en cada clase coloidal S1 = 0.005 g/kg H₂O

Los resultados de este grupo de simulaciones se muestran en la Tabla-6.6 y la Figura 6.3.

Como puede observarse, el pH de la salmuera tiene un efecto importante sobre la concentración de sílice coloidal formada, de tal manera que a mayor pH, el porcentaje de conversión de sílice coloidal es menor y por lo tanto la concentración final de sílice coloidal será menor.

| Resultados del Grupo de Simulaciones - 3 | | | | | | |
|---|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|
| Programa | | FORTRAN | | MATLAB | | |
| Simulación | \$1 | S2 | \$3 | \$1 | S2 | \$3 |
| рН | 7.2 | 7.5 | 7.9 | 7.2 | 7.5 | 7.9 |
| Tiempo de Induccion (min) | 3.6254E+01 | 3.5214E+01 | 6.1115E+01 | 3.6254E+01 | 3.5214E+01 | 6.1115E+01 |
| Concentración de Silice Disuelta (gr SiO ₂ /kg H ₂ O) | 0.8160-0.6987 | 0.8160-0.7085 | 0.8160-0.7511 | 0.8160-0.6989 | 0.8160-0.7087 | 0.8160-0.7511 |
| Concentración de Silice Coloidal (gr SiO ₂ /kg H ₂ O) | 0.0050-0.1249 | 0.0050-0.1150 | 0.0050-0.0725 | 0.0050-0.1247 | 0.0050-0.1148 | 0.0050-0.0725 |
| Número Total de Particulas Coloidales | 1.0188E+17 | 1.0188E+17 | 1.0188E+17 | 1.0188E+17 | 1.0188E+17 | 1.0188E+17 |
| Area Total Superficial (cm ²) | 3.3270E+05 | 3.1494E+05 | 2.3143E+05 | 3.3232E+05 | 3.1462E+05 | 2.3143E+05 |
| Radio Promedio de cada Particula (cm) | 5.0978E-07 | 4.9599E-07 | 4.2517E-07 | 5.0948E-07 | 4.9573E-07 | 4.2517E-07 |
| Concentración de Silice Coloidal en cada Particula (gr SiO ₂ /kg H ₂ O) | 1.2258E-18 | 1.1290E-18 | 7.1115E-19 | 1.2237E-18 | 1.1273E-18 | 7.1116E-19 |
| Número de Nuevas Clases Coloidales Formadas | 3 | 4 | 4 | 3 | 4 | 4 |

Tabla-6.6 Resultados obtenidos del tercer grupo de simulaciones a diferentes valores de pH.



Figura 6.3-Variación de la concentración de sílice según resultados obtenidos por el Grupo No. 3 de simulaciones.

En la *Tabla-6.6* se puede observar que el tiempo de inducción y la conversión de sílice disuelta a coloidal son afectados por el pH de manera directamente proporcional este.

El pH es uno de los principales factores que afectan la solubilidad de la sílice. La sílice posee una solubilidad mayor en pH ácido, por lo cual la solubilidad en este grupo de simulaciones será menor para el caso en el que el pH es 7.9.

Cuando el pH es mayor, la solubilidad es menor y los mecanismos de nucleación y deposición se ven favorecidos. De esta manera, la nucleación genera mayor número clases de partículas coloidales en comparación con la solución de menor pH, sin embargo el radio de estas es menor que en los demás casos.

La *Figura 6.3* nos muestra la evolución de la concentración de la sílice disuelta a través del tiempo para cada caso. En ella se puede observar que la concentración de sílice disuelta para los tres casos hasta un tiempo de aproximadamente 31 minutos, después del periodo de inducción, permanece en un estado aparentemente estable donde los tres casos tienen aproximadamente la misma tasa de conversión de sílice disuelta a coloidal.

Este lapso, de acuerdo a los resultados obtenidos de la simulación y a la pendiente que muestra la curva, está asociado principalmente con el proceso de deposición molecular que es un proceso de conversión de sílice disuelta a coloidal relativamente lento.

Las curvas generadas por los 2 pH más bajos se sobreponen entre sí, lo que significa que a esos valores de pH bajo las condiciones dadas, el pH no tiene efectos notables en la cinética de la sílice.

El efecto del pH se hace notable entre los 2 pares de curvas de los pH menores y la curva generada al pH más elevado. Aquí la tasa de deposición de los dos pares de curvas traslapadas es menor a la de la curva del pH más alto.

Como ya se menciono esta diferencia radica en que la nucleación y deposición molecular se ven favorecidas en valores de pH ácido. Por lo cual la tasa de conversión de sílice es menor para el caso en el que el pH es 7.9.

Las curvas al igual que en las simulaciones anteriores pueden seccionarse en 3. La primer sección de 0 a 31 minutos, la segunda de 31 a 40 minutos, y la tercera de 40 a 70 minutos aproximadamente.

La primera sección corresponde a la etapa donde la nucleación y la deposición molecular son lentos, aquí ocurre la primer nucleación; la segunda sección corresponde a la segunda nucleación y al incremento de la deposición molecular hasta alcanzar su valor máximo; la tercera sección corresponde a la etapa donde ya no hay mas pasos de nucleación, únicamente deposición molecular y la tasa de esta se reduce.

También se puede observar que los resultados obtenidos por ambos programas, para las 3 simulaciones realizadas, siguen la misma tendencia a lo largo de la curva, presentando una mínima diferencia al final de esta, exceptuando las curvas generadas a la menor concentración.

6.4.4 GRUPO NO. 4 DE SIMULACIONES — EVALUACIÓN ESTADÍSTICA DEL EFECTO DE LA PRECISIÓN EN LOS RESULTADOS OBTENIDOS, VALIDACIÓN DE LA IMPLEMENTACIÓN DEL CÓDIGO MATLAB VS FORTRAN

En este último grupo de simulaciones se realizó la reproducción del problema ejemplo que se incluye en el trabajo de Weres et al. (1980) con el código actualizado y mejorado en MATLAB y se compararon estadísticamente los resultados finales relacionados al número de partículas, radio de partícula y masa total de partícula, para cada clase coloidal, obtenidos por MATLAB con los obtenidos por el código actualizado en FORTRAN 77, el cual arroja los mismos resultados que el código original.

Primeramente se realizaron las corridas pertinentes del problema ejemplo en MATLAB y FORTRAN 77, se introdujeron los mismos datos de entrada (*ver Tabla-6.7, Tabla-6.8, Tabla-6.9*) a ambos códigos, y una vez obtenidos los resultados, se procedió a analizarlos (*ver Tabla-6.10*; los resultados completos de ambos códigos se encuentran en el *ANEXO-C-D-E*).

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS

| TARJETA 1 Y 2 | | TARJETA 3 | | |
|---------------|-------|-----------|--------|--|
| VARIABLE | VALOR | VARIABLE | VALOR | |
| NRUN | 1 | SILIN | 0.597 | |
| NREF | 13 | SILOUT | 0.25 | |
| NCLC | 2 | PHI | 0 | |
| INX | 1 | SMLI | 0.18 | |
| IPR | 0 | TOT FI | 0.0006 | |
| IPR2 | 0 | CSII | 0.0075 | |
| KDP | 0 | TCP | 0 | |
| NDP | 0 | CDP | 0 | |
| ITPM | 0 | | | |
| IMAX | 0 | | | |
| IHCMA | 0 | | | |
| IHCMI | 0 | | | |
| IDH | 0 | | | |
| IMAXM | 0 | | | |

Tabla-6.7 Datos de entrada: TARJETA 1 Y 2, y TARJETA 3.

Tabla-6.8 Datos de entrada: TARJETA 4.

| TARJETA 4 | | | | | |
|-----------|---------|-------------|--------|--|--|
| Tiempo | Flash | Temperatura | pН | | |
| TREFV | FLASHRV | TEMPRV | PHRV | | |
| 0.0000 | 0.0000 | 300.0000 | 0.0000 | | |
| 0.2500 | 0.0850 | 275.0000 | 0.0000 | | |
| 0.5000 | 0.1510 | 250.0000 | 0.0000 | | |
| 0.7500 | 0.2060 | 225.0000 | 0.0000 | | |
| 1.0000 | 0.2540 | 200.0000 | 0.0000 | | |
| 1.5000 | 0.2970 | 175.0000 | 0.0000 | | |
| 1.7500 | 0.3370 | 150.0000 | 0.0000 | | |
| 2.2500 | 0.3870 | 125.0000 | 0.0000 | | |
| 2.7500 | 0.4100 | 100.0000 | 0.0000 | | |
| 12.7500 | 0.4100 | 100.0000 | 0.0000 | | |
| 17.7500 | 0.4100 | 75.0000 | 0.0000 | | |
| 27.7500 | 0.4100 | 50.0000 | 0.0000 | | |
| 77.5000 | 0.4100 | 30.0000 | 0.0000 | | |

Tabla-6.9 Datos de entrada TARJETA 5.

| TARJETA 5 | | | | | |
|-----------|------------|------------|--|--|--|
| NCLC | CLRV | CLM V | | | |
| 1 | 3.5000E-07 | 5.0000E-03 | | | |
| 2 | 7.0000E-07 | 5.0000E-03 | | | |

| | Numero de | e Particulas | Radio de | Particula | Masa | Total |
|--------------------------|-------------|--------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| Numero de Clase Coloidal | FORTRAN | MATLAB | FORTRAN | MATLAB | FORTRAN | MATLAB |
| 1 | 1.03898E+00 | 1.03898E+00 | 1.00473E-07 | 1.01555E-07 | 2.08371E-19 | 2.09782E-19 |
| 2 | 5.80866E+14 | 5.36954E+14 | 1.00480E-07 | 1.01565E-07 | 5.84996E-06 | 5.31268E-06 |
| 3 | 6.91945E+14 | 6.41362E+14 | 1.00511E-07 | 1.01591E-07 | 6.59637E-06 | 6.68499E-06 |
| 4 | 8.24141E+14 | 7.65511E+14 | 1.00527E-07 | 1.01616E-07 | 8.26270E-06 | 7.48018E-06 |
| 5 | 9.80826E+14 | 9.13611E+14 | 1.00699E-07 | 1.01672E-07 | 9.30667E-06 | 9.48854E-06 |
| 6 | 1.16724E+15 | 1.08947E+15 | 1.00719E-07 | 1.01706E-07 | 1.12199E-05 | 1.06058E-05 |
| 7 | 1.38786E+15 | 1.29922E+15 | 1.00841E-07 | 1.01803E-07 | 1.31208E-05 | 1.34591E-05 |
| 8 | 1.65034E+15 | 1.54790E+15 | 1.00999E-07 | 1.01834E-07 | 1.58236E-05 | 1.50285E-05 |
| 9 | 1.96044E+15 | 1.84454E+15 | 1.01140E-07 | 1.02245E-07 | 1.84285E-05 | 1.90810E-05 |
| 10 | 1.97502E+15 | 1.99013E+15 | 1.01146E-07 | 1.02258E-07 | 2.23053E-05 | 2.12855E-05 |
| 11 | 2.32958E+15 | 2.19569E+15 | 1.01177E-07 | 1.03778E-07 | 2.59502E-05 | 2.70393E-05 |
| 12 | 2.67016E+15 | 2.61450E+15 | 1.01193E-07 | 1.03787E-07 | 3.14171E-05 | 3.01253E-05 |
| 13 | 2.76453E+15 | 2.67017E+15 | 1.01258E-07 | 1.03813E-07 | 3.64943E-05 | 3.82685E-05 |
| 14 | 3.28179E+15 | 3.10839E+15 | 1.01278E-07 | 1.03836E-07 | 4.41857E-05 | 4.25666E-05 |
| 15 | 3.88856E+15 | 3.69657E+15 | 1.02707E-07 | 1.03873E-07 | 5.12421E-05 | 5.40671E-05 |
| 16 | 4.61050E+15 | 4.38756E+15 | 1.02710E-07 | 1.03893E-07 | 6.20758E-05 | 6.00370E-05 |
| 17 | 5.45388E+15 | 5.21058E+15 | 1.02864E-07 | 1.03924E-07 | 7.20555E-05 | 7.62471E-05 |
| 18 | 5.52995E+15 | 5.58714E+15 | 1.02885E-07 | 1.04021E-07 | 9.01968E-05 | 8.45174E-05 |
| 19 | 6.46177E+15 | 6.17340E+15 | 1.03112E-07 | 1.04049E-07 | 1.09199E-04 | 1.07325E-04 |
| 20 | 7.62620E+15 | 7.32116E+15 | 1.03500E-07 | 1.04152E-07 | 1.26139E-04 | 1.19672E-04 |
| 21 | 8.99705E+15 | 8.65732E+15 | 1.03546E-07 | 1.04197E-07 | 1.52743E-04 | 1.53151E-04 |
| 22 | 1.05451E+16 | 1.02530E+16 | 1.03771E-07 | 1.04964E-07 | 1.76112E-04 | 1.74802E-04 |
| 23 | 1.06299E+16 | 1.06534E+16 | 1.03826E-07 | 1.05084E-07 | 2.13341E-04 | 2.15190E-04 |
| 24 | 1.25171E+16 | 1.21000E+16 | 1.04046E-07 | 1.05301E-07 | 2.46332E-04 | 2.44732E-04 |
| 25 | 1.47722E+16 | 1.43125E+16 | 1.04943E-07 | 1.05465E-07 | 3.04360E-04 | 3.01448E-04 |
| 26 | 1.71446E+16 | 1.68561E+16 | 1.05111E-07 | 1.05628E-07 | 3.43085E-04 | 3.48153E-04 |
| 27 | 1./3611E+16 | 1.73328E+16 | 1.05365E-07 | 1.05894E-07 | 3.6/384E-04 | 3./2/86E-04 |
| 28 | 2.04697E+16 | 1.991/9E+16 | 1.05483E-07 | 1.06007E-07 | 4.23895E-04 | 4.21950E-04 |
| 29 | 2.13613E+16 | 2.13613E+16 | 1.05831E-07 | 1.06371E-07 | 4.87904E-04 | 4.86475E-04 |
| 30 | 2.40113E+16 | 2.34098E+16 | 1.05904E-07 | 1.06436E-07 | 5.91131E-04 | 5.90601E-04 |
| 31 | 2.54227E+16 | 2.56948E+16 | 1.07661E-07 | 1.06890E-07 | 6.79446E-04 | 6.79871E-04 |
| 22 | 2.02942E+10 | 2.70429E+10 | 1.07095E-07 | 1.00912E-07 | 0.30341E-04 | 0.27313E-04 |
| 24 | 3.51277L+10 | 3.24247L+10 | 1.081981-07 | 1.08903L-07 | 9.47077L-04 | 9.314231-04 |
| 25 | 3.34337L+10 | 2 92709E+16 | 1.082001-07 | 1.089702-07 | 1 10990E 02 | 1 21276E 02 |
| 36 | 4 56232E+16 | 3.82738L+10 | 1.09320E-07 | 1.09817E-07 | 1.19889E-03 | 1.21270L-03 |
| 30 | 5.07675E+16 | 5 1318/F+16 | 1.00451E 07 | 1.10710E-07 | 1.37010E 03 | 1.55557E 05 |
| 38 | 5.37850E+16 | 5.29356E+16 | 1.10140E-07 | 1.10745E-07 | 1.71319E-03 | 1.72473L-03 |
| 30 | 6 16211F+16 | 6 18762F+16 | 1.10104E 07 | 1.10745E 07 | 1.73442E 03 | 1.70510E 03 |
| 40 | 6.27744E+16 | 6.22569E+16 | 1.12940E-07 | 1.13972E-07 | 2.44531E-03 | 2.47242E-03 |
| 41 | 7.41142E+16 | 7.31835E+16 | 1.12967E-07 | 1.13998E-07 | 2.69871E-03 | 2.74890E-03 |
| 42 | 7.68094E+16 | 7.75780E+16 | 1.16543E-07 | 1.17273E-07 | 2.79151E-03 | 2.83999E-03 |
| 43 | 8.64035E+16 | 8.54324E+16 | 1.16560E-07 | 1.17298E-07 | 3.60764E-03 | 3.56233E-03 |
| 44 | 9.38862E+16 | 9.47597E+16 | 1.20316E-07 | 1.20150E-07 | 3.83220E-03 | 3.90298E-03 |
| 45 | 1.02290E+17 | 1.01311E+17 | 1.20342E-07 | 1.20176E-07 | 4.04958E-03 | 4.10564E-03 |
| 46 | 1.18345E+17 | 1.18170E+17 | 1.23972E-07 | 1.23848E-07 | 4.72957E-03 | 4.79861E-03 |
| 47 | 1.19175E+17 | 1.19305E+17 | 1.24000E-07 | 1.23877E-07 | 4.73499E-03 | 4.80585E-03 |

| Tabla-6.10 Resultados | obtenidos del | cuarto grupo | de simulaciones |
|-----------------------|---------------|--------------|-----------------|

| continuation | | countration obte | | Biobo ac pini | | |
|--------------|-------------|------------------|-------------|---------------|--------------|--------------|
| 48 | 1.32281E+17 | 1.33276E+17 | 1.27670E-07 | 1.28628E-07 | 5.11790E-03 | 5.21100E-03 |
| 49 | 1.41716E+17 | 1.40744E+17 | 1.27704E-07 | 1.28661E-07 | 5.43301E-03 | 5.47394E-03 |
| 50 | 1.59677E+17 | 1.60775E+17 | 1.34533E-07 | 1.35875E-07 | 5.44455E-03 | 5.48206E-03 |
| 51 | 1.65118E+17 | 1.64146E+17 | 1.34574E-07 | 1.35915E-07 | 6.26390E-03 | 6.17311E-03 |
| 52 | 1.74805E+17 | 1.75991E+17 | 1.39328E-07 | 1.39943E-07 | 6.27032E-03 | 6.17913E-03 |
| 53 | 1.97759E+17 | 1.96913E+17 | 1.39376E-07 | 1.39991E-07 | 7.17993E-03 | 7.09227E-03 |
| 54 | 1.99270E+17 | 2.00240E+17 | 1.42622E-07 | 1.43401E-07 | 7.18194E-03 | 7.09302E-03 |
| 55 | 2.30785E+17 | 2.29949E+17 | 1.42682E-07 | 1.43553E-07 | 7.27215E-03 | 7.40880E-03 |
| 56 | 2.32103E+17 | 2.33101E+17 | 1.47013E-07 | 1.47802E-07 | 8.20254E-03 | 8.31484E-03 |
| 57 | 2.44954E+17 | 2.45721E+17 | 1.47944E-07 | 1.47875E-07 | 8.21861E-03 | 8.33020E-03 |
| 58 | 2.78228E+17 | 2.78831E+17 | 1.51982E-07 | 1.53063E-07 | 8.46372E-03 | 8.61955E-03 |
| 59 | 2.79588E+17 | 2.79194E+17 | 1.52074E-07 | 1.53153E-07 | 1.00048E-02 | 1.02258E-02 |
| 60 | 2.91117E+17 | 2.91373E+17 | 1.57266E-07 | 1.58654E-07 | 1.00552E-02 | 1.02704E-02 |
| 61 | 3.24590E+17 | 3.24525E+17 | 1.57377E-07 | 1.58879E-07 | 1.01188E-02 | 1.03036E-02 |
| 62 | 3.27346E+17 | 3.26680E+17 | 1.62314E-07 | 1.63497E-07 | 1.15364E-02 | 1.15999E-02 |
| 63 | 3.35011E+17 | 3.34755E+17 | 1.62447E-07 | 1.63628E-07 | 1.16210E-02 | 1.16896E-02 |
| 64 | 3.54809E+17 | 3.50295E+17 | 1.68587E-07 | 1.67943E-07 | 1.18643E-02 | 1.20746E-02 |
| 65 | 3.54958E+17 | 3.50582E+17 | 1.68745E-07 | 1.68099E-07 | 1.27449E-02 | 1.28940E-02 |
| 66 | 3.67856E+17 | 3.66791E+17 | 1.73754E-07 | 1.74123E-07 | 1.29003E-02 | 1.30243E-02 |
| 67 | 3.70929E+17 | 3.66972E+17 | 1.73939E-07 | 1.74305E-07 | 1.45022E-02 | 1.43905E-02 |
| 68 | 3.71486E+17 | 3.67097E+17 | 1.81344E-07 | 1.82529E-07 | 1.45077E-02 | 1.46426E-02 |
| 69 | 3.75762E+17 | 3.74421E+17 | 1.81555E-07 | 1.82737E-07 | 1.48648E-02 | 1.51109E-02 |
| 70 | 3.88677E+17 | 3.84633E+17 | 1.88424E-07 | 1.86823E-07 | 1.58768E-02 | 1.61219E-02 |
| 71 | 3.88821E+17 | 3.84757E+17 | 1.88664E-07 | 1.87062E-07 | 1.59528E-02 | 1.62100E-02 |
| 72 | 4.06495E+17 | 4.03205E+17 | 1.97227E-07 | 1.95912E-07 | 1.62761E-02 | 1.65119E-02 |
| 73 | 4.07091E+17 | 4.03528E+17 | 1.97497E-07 | 1.96181E-07 | 1.71039E-02 | 1.71404E-02 |
| 74 | 4.07254E+17 | 4.04921E+17 | 2.25142E-07 | 2.14944E-07 | 1.74697E-02 | 1.78702E-02 |
| 75 | 4.16655E+17 | 4.15030E+17 | 2.25434E-07 | 2.26111E-07 | 1.80433E-02 | 1.84052E-02 |
| 76 | 4.25646E+17 | 4.21919E+17 | 2.28373E-07 | 2.29049E-07 | 1.87159E-02 | 1.90184E-02 |
| // | 4.26816E+17 | 4.23024E+17 | 2.28916E-07 | 2.29390E-07 | 1.915/4E-02 | 1.94543E-02 |
| /8 | 4.43655E+17 | 4.40161E+17 | 2.31813E-07 | 2.32483E-07 | 1.95011E-02 | 1.96450E-02 |
| 79 | 4.45566E+17 | 4.4246/E+1/ | 2.34929E-07 | 2.35598E-07 | 1.99708E-02 | 1.98089E-02 |
| 80 | 4.46294E+17 | 4.43146E+17 | 2.35334E-07 | 2.36002E-07 | 2.01488E-02 | 2.02753E-02 |
| 81 | 4.491/4E+1/ | 4.46961E+17 | 2.38547E-07 | 2.39212E-07 | 2.02887E-02 | 2.03375E-02 |
| 82 | 4.60492E+17 | 4.56952E+17 | 2.39030E-07 | 2.39693E-07 | 2.07508E-02 | 2.03566E-02 |
| 83 | 4.64344E+17 | 4.60959E+17 | 2.42369E-07 | 2.43027E-07 | 2.08076E-02 | 2.04620E-02 |
| 84 | 4.71831E+17 | 4.69151E+17 | 2.45762E-07 | 2.46417E-07 | 2.08167E-02 | 2.06725E-02 |
| 85 | 4.74183E+17 | 4./104/E+1/ | 2.49228E-07 | 2.49879E-07 | 2.10346E-02 | 2.11411E-02 |
| 80 | 4.74433E+17 | 4./1652E+1/ | 2.49903E-07 | 2.50555E-07 | 2.16272E-02 | 2.164/1E-02 |
| 87 | 4.80509E+17 | 4.77323E+17 | 2.53501E-07 | 2.54149E-07 | 2.2000000-02 | 2.21418E-02 |
| 80 | 4.84200E+17 | 4.80953E+17 | 2.5/18/E-0/ | 2.57831E-07 | 2.24313E-02 | 2.23047E-02 |
| 60 | 4.043/3E+1/ | 4.0100101 | 2.00300E-07 | 2.010210-07 | 2.27704E-02 | 2.23/3/6-02 |
| 90 | 4.8/8810+1/ | 4.65UIUE+17 | 2.0//83E-U/ | 2.084185-07 | 2.30421E-02 | 2.2/0010-02 |
| 91 | 4.92835E+17 | 4.8983UE+1/ | 2./19U/E-U/ | 2.7254UE-U7 | 2.338U2E-U2 | 2.30214E-U2 |
| 92 | 4.95204E+17 | 4.9010000017 | 2.70014E-U7 | | 2.390/4E-02 | 2.33T9ACE 03 |
| 93 | 5.01059E+17 | 4.9/02UE+1/ | 5.34022E-U/ | 3.3325UE-U/ | 2.93803E-02 | 2.0284UE-U2 |
| 74 | J.UI330E+1/ | 4.30U0ZE+1/ | 0.04021E-07 | 0.0323UE-U/ | 3.UZU3ZE-U/ | 3.U3U90E-U/ |

Continuación Tabla-6.10 Resultados obtenidos del cuarto grupo de simulaciones.

Siendo nuestros datos de tipo experimental y continuos, según la clasificación hecha por Verma (2005), el primer análisis efectuado a los datos fue el de comprobar si estos eran susceptibles de ser utilizados para realizar los análisis estadísticos deseados.

Para verificar lo anterior, el primer punto a cumplir fue que nuestra muestra debía ser estadísticamente suficiente, aproximadamente 30 datos según Otto (1999), los cual se cumplió sin problema alguno pues nuestras muestras iniciales eran de 94 datos.

El segundo punto a revisar fue verificar si nuestros datos correspondían a una distribución Gaussiana o "normal", distribución sesgada, o una distribución con posibles valores desviados o aberrantes ("outliers"); para comprobar lo anterior se graficaron los histogramas correspondientes. Los histogramas fueron preparados en forma automática, usando el paquete comercial llamado STATISTICA; el ancho de las ventanas no fue escogido manualmente, sino que fue fijado por la computadora (*ver ANEXO-F*). Asi mismo también se efectuaron graficas comparativas de dispersión donde se graficaron los valores obtenidos en FORTRAN vs MATLAB para observar de igual manera la existencia de posibles valores desviados y la linealidad de los datos (*ver ANEXO-G*).

Por medio de los histogramas y gráficas anteriores se pudo observar la presencia de posibles valores desviados en cada una de las muestras de datos obtenidas por cada uno de los programas.

Una vez que se observo dentro de los histogramas la posible presencia de valores desviados, se realizaron pruebas estadísticas específicas para la detección de estos.

6.4.4.1 DETECCIÓN DE VALORES DESVIADOS O ABERRANTES (OUTLIERS)

Las pruebas para la detección de valores tipo outlier que se seleccionaron para evaluar los datos de número de partículas, radio de partículas y masa promedio son:

- Iglewicz and Hoaglin (Modified Z-score) [@-2]
- Nalimov test [@-3]
- Pearson and Hartley test [@-4]
- Grubb test (ESD)[@-5]

Estas pruebas se consideran las más adecuadas ya que las tablas de valores críticos se ajustan a nuestro tamaño de muestra n = 94.

6.4.4.1.1 IGLEWICZ AND HOAGLIN (MODIFIED Z-SCORE)

Estos autores recomiendan el uso del factor Z modificado para la detección de valores desviados o aberrantes, el cual es definido como:

$$MZ_i = \frac{0.6745 (x_i - \hat{x})}{MAD}$$
(6.42)

Donde:

 MZ_i = Factor Z modificado x_i = Dato sospechoso \tilde{x} = Mediana MAD = Desviación mediana absoluta Estos autores recomiendan que, cualquier dato sospechoso que arroje un resultado del factor Z modificado mayor a 3.5 se puede considerar como un dato outlier.

6.4.4.1.2 NALIMOV TEST

Esta prueba de detección de valores desviados involucra el cálculo de un valor, r*, por medio de la siguiente ecuación:

$$r^* = \frac{|x^* - \widehat{\mu}|}{s} \cdot \sqrt{\frac{n}{n-1}} \tag{6.43}$$

Donde:

 $r^* =$ Valor calculado $x^* =$ Dato sospechoso $\hat{\mu} =$ Media s = Desviación estándar n = Número de datos

La toma de decision se realiza comparando el valor de r^* con su valor critico de tabla (*ver ANEXO-H*) con f=n-2 grados de libertad.

Si
$$r(95\%) < r^* < r(99\%)$$
: Outlier Probable
Si $r(99\%) < r^* < r(99.9\%)$: Outlier Significativo
Si $r^* > r(99.9\%)$: Outlier Altamente Significativo

6.4.4.1.3 PEARSON AND HARTLEY TEST

Esta prueba, diseñada para muestras de más de 30 datos, detecta la presencia de posibles valores desviados por medio de la siguiente ecuación:

$$q = \left| \frac{x_i - \bar{x}}{s} \right| \tag{6.44}$$

Donde:

q = Valor calculado $x_i =$ Dato sospechoso $\overline{x} =$ Media s =Desviación estándar

El valor calculado q se compara con el valor crítico q_{crit} de tabla (*ver ANEXO-I*); si el valor calculado es mayor al valor critico, el dato sospechoso se considera un dato outlier.

6.4.4.1.4 GRUBB TEST (ESD)

El test de Grubb también llamado ESD (extreme studentized deviate) únicamente determina si el valor más extremo en la muestra de datos representa un valor desviado de los demás o no, esto por medio de la siguiente ecuación:

$$G = \frac{\max|Y_1 - \bar{Y}|}{s} \tag{6.45}$$

Donde:

G = Valor calculado Y_1 = Dato sospechoso \overline{Y} = Media s =Desviación estándar

El dato sospechoso se considera outlier cuando:

$$G > \frac{(N-1)}{N} \cdot \sqrt{\frac{(t_{\alpha/2N, N-2})^2}{N-2 + (t_{\alpha/2N, N-2})^2}}$$
(6.46)

Donde:

N = Número de datos $t_{\alpha/2N}$, $_{N-2} =$ Valor critico de la distribución t N - 2 = Grados de libertad $\alpha/2N$ = Nivel de significancia

Los resultados de las pruebas anteriores se reportan en la sección ANEXO (ver ANEXO-J-K-L-M).

Como se muestra en las tablas anteriores, la mayoría de los datos obtenidos como resultado de la simulación, en relación al número de partículas, el radio de partícula, y la masa total de partícula, pertenecen a una distribución "normal", solo algunos casos son considerados como valores de tipo outlier.

Como puede verse en las tablas, existen diferencias en las conclusiones entre las pruebas con respecto a cuales son datos desviados.

La prueba Iglewicz and Hoaglin (Modified Z-score) concluyó que: 1) dentro de los datos de radio de partícula de FORTRAN, existen 7 valores desviados localizados en el extremo derecho de la distribución de los datos y representan el 7.45% de los datos; y 2) dentro de los datos de radio de partícula de MATLAB existen 10 valores desviados localizados en el extremo derecho de la distribución de los datos y representan el 10.64% de los datos. Sin embargo, esta prueba es poco confiable ya que se aplica bajo un único valor crítico.

La prueba Nalimov concluyó que: 1) dentro de los datos de radio de partícula de FORTRAN, para los 3 niveles de confianza, existen 2 valores desviados localizados en el extremo derecho de la distribución de los datos y representan el 2.13% de los datos; 2) dentro de los datos de masa total de FORTRAN, para un nivel de confianza de 95%, existen 4 valores desviados localizados en el extremo derecho de la distribución de los datos y representan el 4.26% de los datos; y 3) dentro de los datos de radio de partícula de MATLAB, para los 3 niveles de confianza, existen 2 valores desviados localizados en el extremo derecho de la distribución de los datos y representan el 2.13% de los datos y representan el 2.13% de los datos y representan el 2.13% de los datos de radio de partícula de MATLAB, para los 3 niveles de confianza, existen 2 valores desviados localizados en el extremo derecho de la distribución de los datos y representan el 2.13% de los datos de radio de partícula de MATLAB, para los 3 niveles de confianza, existen 2 valores desviados localizados en el extremo derecho de la distribución de los datos y representan el 2.13% de los datos.

La prueba Pearson and Hartley test concluyó que: 1) dentro de los datos de radio de partícula de FORTRAN, para un nivel de confianza de 95%, existen 2 valores desviados localizados en el extremo derecho de la distribución de los datos y representan el 2.13% de los datos; 2) dentro de los datos de radio de partícula de FORTRAN, para un nivel de confianza de 99%, existe 1 valor desviado localizado en el extremo derecho de la distribución de los datos y representa el 1.06% de los datos; 3) dentro de los datos de radio de partícula de partícula de MATLAB, para un nivel de confianza de 95%, existen 2 valores desviados localizados en el extremo derecho de la distribución de los datos y representa el 2.13% de los datos; y 4) dentro de los datos de radio de partícula de MATLAB, para un nivel de confianza de 99%, existe 1 valor desviado localizado en el extremo derecho de la distribución de los datos y representan el 2.13% de los datos; y 4) dentro de los datos de radio de partícula de MATLAB, para un nivel de confianza de 99%, existe 1 valor desviado localizado en el extremo derecho de la distribución de los datos y representan el 2.13% de los datos; y 4) dentro de los datos de radio de partícula de MATLAB, para un nivel de confianza de 99%, existe 1 valor desviado localizado en el extremo derecho de la distribución de los datos y representa el 1.06% de los datos.

La prueba Grubb test (ESD) fue realizada en línea por medio de un software de uso "on line". Esta concluyó que: 1) dentro de los datos de radio de partícula de FORTRAN, para un nivel de confianza de 99%, existe 1 valor desviado localizado en el extremo derecho de la distribución de los datos y representa el 1.06% de los datos; y 2) dentro de los datos de radio de partícula de MATLAB, para un nivel de confianza de 99%, existe 1 valor desviado localizado en el extremo derecho de la distribución de los datos terremo de los datos de radio de partícula de MATLAB, para un nivel de confianza de 99%, existe 1 valor desviado localizado en el extremo derecho de la distribución de los datos y representa el 1.06% de los datos.

Finalmente después de realizar las pruebas de detección de valores desviados, dichos valores fueron eliminados únicamente en los casos donde la prueba ofrecía niveles de confianza, y solo se eliminaron los datos que de acuerdo al nivel de confianza más elevado se consideraban como datos de tipo outlier. Una vez eliminados los datos desviados, se graficaron de nuevo los histogramas correspondientes con la única finalidad de observar el efecto de la eliminación de los datos desviados en la distribución (*ver ANEXO-N*).

Continuando con el análisis estadístico, es decir, el objetivo de la cuarta simulación, se procedió a analizar si los datos corregidos de los tres grupos, es decir, numero de partículas de MATLAB y FORTRAN, radio de partículas de MATLAB y FORTRAN, y masa total de partícula de MATLAB y FORTRAN, correspondían a una misma población respectivamente por grupo.

6.4.4.2 Validación de la implementación del código MATLAB vs FORTRAN mediante la comparación estadística de los resultados

Para realizar lo anterior se efectuaron las pruebas F (Fisher) y t (Student).

6.4.4.2.1 PRUEBA F (FISHER)

Esta prueba de la relación F (conocida también como la prueba de "Fisher" e honor a R.A. Fisher) para dos muestras, tiene el propósito de verificar la hipótesis nula H_0 que podría formularse como "las dos muestras tienen la misma varianza", y la hipótesis alterna H_1 como:"las dos muestras tienen varianzas diferentes". Para la prueba de la relación F, se supone que las dos muestras fueron tomadas de una población o poblaciones Gaussianas normales (Verma, 2005).

Supongamos que contamos con 2 muestras x y y con las respectivas desviaciones estándar s_x y s_y . El estadístico F se define entonces como:

$$F = \frac{s_x^2}{s_y^2}$$
(6.47)

Ya que F debe ser ≥ 1 , y por lo tanto, $s_x^2 \ge s_y^2$, debemos siempre definir como s_x^2 a la varianza mayor. Los grados de libertad de esta prueba se calculan entonces como:

$$v_1 = (n_x - 1)$$
 (6.48a)

$$v_2 = \left(n_y - 1\right) \tag{6.48b}$$

El valor del estadístico F se compara con su valor crítico de la distribución F para un nivel de confianza del 95% (*ver ANEXO-O*) y del 99% (*ver ANEXO-P*); si el valor calculado de F es menor que el valor critico de la tabla correspondiente, se acepta la hipótesis nula, de lo contrario se rechaza y se dice que la hipótesis alterna es cierta.

6.4.4.2.2 RESULTADOS

6.4.4.2.2.1 NÚMERO DE PARTÍCULAS

De acuerdo a la prueba F, dado que el valor calculado de F para el número de partículas es menor que el valor critico de F, se concluye que no existe una diferencia significativa entre las dos varianzas a un nivel de confianza de 95%; del mismo modo, dado que el valor calculado de F para el número de partículas es menor que el valor critico de F, se concluye que no existe una diferencia significativa entre las dos varianzas a un nivel de confianza de 99%.

```
6.4.4.2.2.2 RADIO DE PARTÍCULA
```

De acuerdo a la prueba F, dado que el valor calculado de F para el radio de partícula es menor que el valor critico de F, se concluye que no existe una diferencia significativa entre las dos varianzas a un nivel de confianza de 95%; del mismo modo, dado que el valor calculado de F para el radio de

partícula es menor que el valor critico de F, se concluye que no existe una diferencia significativa entre las dos varianzas a un nivel de confianza de 99%.

6.4.4.2.2.3 MASA TOTAL

De acuerdo a la prueba F, dado que el valor calculado de F para la masa total es menor que el valor critico de F, se concluye que no existe una diferencia significativa entre las dos varianzas a un nivel de confianza de 95%; del mismo modo, dado que el valor calculado de F para la masa total es menor que el valor critico de F, se concluye que no existe una diferencia significativa entre las dos varianzas a un nivel de confianza de 99%.

Los resultados de las pruebas F mencionadas arriba se encuentran concentrados en la Tabla-6.11.

| PRUEBA F | | | PRUEBA DE VARIANZAS | | |
|---------------|--------------|-------------------|---------------------|--------------------|--|
| | | RAD PART | NO PART | MASSTOT | |
| | MATLAB | 3.526170E+34 | 3.064691E-15 | 7.678948E-05 | |
| VARIANZAS | FORTRAN | 3.573028E+34 | 3.100630E-15 | 7.783003E-05 | |
| ESTADISTICO | F | 1.01 | 1.01 | 1.01 | |
| MUESTRAS | Х | FORTRAN | FORTRAN | FORTRAN | |
| NUESTRAS | Y | MATLAB | MATLAB | MATLAB | |
| GRADOS DE | Х | 93 | 91 | 93 | |
| LIBERTAD | Y | 93 | 91 | 93 | |
| | Forit 95% | 1.42 | 1.42 | 1.42 | |
| VALOR CRITICO | Fcrit 99% | 1.64 | 1.65 | 1.64 | |
| DECISION | DECISION 95% | VARIGUALES | VARIGUALES | VAR IGUALES | |
| DECISION | DECISION 99% | VARIGUALES | VARIGUALES | VAR IGUALES | |

6.4.4.2.3 PRUEBAT (STUDENT)

Esta prueba sirve para comparar dos medias; generalmente, se realiza la prueba "t de Student" (conocida como "prueba t") después de haber aplicado la prueba F. Para la aplicación de la prueba t, se supone que las muestras son normales o más bien, los dos conjuntos de datos son unas muestras aleatorias de una determinada población normal o dos poblaciones idénticas distribuidas en forma normal, esto a pesar de que la prueba t es poco sensible a desviaciones respecto a la normalidad (Verma, 2005).

Para la prueba t la hipótesis nula H_0 establece que "las medias de las muestras son iguales" o que "las muestras vienen de la misma población" o bien "las muestras provienen de poblaciones idénticas", mientras que la hipótesis alterna H_1 indica que "las medias de las muestras son diferentes" o que "existe diferencia significativa (a un cierto nivel de confianza) entre las dos

medias" o bien "las muestras no provienen de una misma población o pertenecen a poblaciones diferentes".

Cuando la prueba t se aplica bajo la H_1 anterior, se llama prueba t de dos colas. Se recomienda usar la prueba t bajo un nivel de confianza del 95% o de 99%, o aun más estricto si se considera apropiado.

En realidad existen dos versiones de la prueba t, 1) cuando las varianzas son iguales, y 2) cuando las varianzas son diferentes. En nuestro caso usaremos la versión para cuando las varianzas son iguales ya que de acuerdo a la prueba F concluimos que las dos muestras tienen varianzas iguales.

Cuando la prueba F ha arrojado un resultado verdadero para la hipótesis nula, el estadístico de la prueba t se calcula usando las siguientes ecuaciones (Verma, 2005):

$$t = \frac{|\bar{x} - \bar{y}|}{s\left(\sqrt{\frac{1}{n_x} - \frac{1}{n_y}}\right)}$$
(6.49)
$$s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n_x} (x_i - \bar{x})^2 + \sum_{i=1}^{n_y} (y_i - \bar{y})^2}{n_x + n_y - 2}}$$
(6.50)

Donde:

t = Valor calculado

 $\bar{x} =$ Media de la muestra x

 $\overline{y} =$ Media de la muestra y

s = Desviación estándar combinada de las dos muestras

Puede suceder, en ocasiones, que los datos individuales no están disponibles. Entonces, no es posible calcular la desviación estándar combinada en base a las medias, pero se pueden usar las deviaciones estándar respectivas para calcular la combinada, de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$s = \sqrt{\frac{(n_x - 1)s_x^2 + (n_y - 1)s_y^2}{n_x + n_y - 2}}$$
(6.51)

Donde:

 $s_x =$ Desviación estándar de la muestra x

 $s_y =$ Desviación estándar de la muestra y

En nuestro caso utilizamos la segunda ecuación para obtener la desviación estándar combinada, aunque contábamos con todos los datos disponibles, ya que resultaba más sencillo su cálculo y los resultados eran los mismos.

El número $n_x + n_y - 2$ representa los grados de libertad para el valor crítico de la distribución t de Student.

El valor del estadístico t se compara con su valor crítico de la distribución t para un nivel de confianza del 95%, del 99% y del 99.8% (*ver ANEXO-Q*); si el valor calculado de t es menor que el valor critico de la tabla correspondiente, se acepta la hipótesis nula, de lo contrario se rechaza y se dice que la hipótesis alterna es cierta.

6.4.4.2.4 RESULTADOS

6.4.4.2.4.1 NÚMERO DE PARTÍCULAS

De acuerdo a la prueba t, dado que el valor calculado de t para el número de partículas es menor que el valor critico de t, se concluye que no existe una diferencia significativa entre las dos medias a un nivel de confianza de 95%; del mismo modo, dado que el valor calculado de t para el número de partículas es menor que el valor critico de t, se concluye que no existe una diferencia significativa entre las dos medias a un nivel de confianza de 99%; asi mismo, dado que el valor calculado de t para el número de partículas es menor que el valor critico de t, se concluye que no existe una diferencia significativa entre las dos medias a un nivel de confianza de 99.8%.

6.4.4.2.4.2 RADIO DE PARTÍCULA

De acuerdo a la prueba t, dado que el valor calculado de t para el radio de partícula es menor que el valor critico de t, se concluye que no existe una diferencia significativa entre las dos medias a un nivel de confianza de 95%; del mismo modo, dado que el valor calculado de t para el radio de partícula es menor que el valor critico de t, se concluye que no existe una diferencia significativa entre las dos medias a un nivel de confianza de 99%; asi mismo, dado que el valor calculado de t para el radio de torne el valor critico de t, se concluye que no existe una diferencia significativa entre las dos medias a un nivel de confianza de 99%; asi mismo, dado que el valor calculado de t

6.4.4.2.4.3 Masa Total

De acuerdo a la prueba t, dado que el valor calculado de t para la masa total es menor que el valor critico de t, se concluye que no existe una diferencia significativa entre las dos medias a un nivel de confianza de 95%; del mismo modo, dado que el valor calculado de t para la masa total es menor que el valor critico de t, se concluye que no existe una diferencia significativa entre las dos medias a un nivel de confianza de 99%; asi mismo, dado que el valor calculado de t para la masa total es total es menor que el valor critico de t, se concluye que no existe una diferencia significativa entre las dos medias a un nivel de confianza de 99%; asi mismo, dado que el valor calculado de t para la masa total es menor que el valor critico de t, se concluye que no existe una diferencia significativa entre las dos medias a un nivel de confianza de 99.8%.

Los resultados de las pruebas t mencionada arriba se encuentran concentrados en la Tabla-6.12.

| | PRUEBA t | PRUEBA DE POBLACIONES | | | |
|---------------------------|----------------|-----------------------|--------------|--------------|--|
| PARA VARIANZAS IGUALES | | | | | |
| RAD PART NO PART MASS TOT | | | | | |
| | MATLAB | 3.526170E+34 | 3.064691E-15 | 7.678948E-05 | |
| VARIANZAS | FORTRAN | 3.573028E+34 | 3.100630E-15 | 7.783003E-05 | |
| ESTADISTICO | S COMBINADA | 1.476109E+17 | 4.043767E-08 | 6.955975E-03 | |
| MEDIAS | MATLAB | 1.962510E+17 | 1.507818E-07 | 8.291962E-03 | |
| | FORTRAN | 1.973792E+17 | 1.502154E-07 | 8.288580E-03 | |
| ESTADISTICO | t | 0.052397523 | 0.094996897 | 0.003333112 | |
| (| Э.L. | 186 | 182 | 186 | |
| | Fcrit 95% | 1.97 | 1.97 | 1.97 | |
| VALOR CRITICO | Fcrit 99% | 2.60 | 2.61 | 2.60 | |
| | Fcrit 99.8% | 3.14 | 3.14 | 3.14 | |
| | DECISION 95% | POB IGUALES | POB IGUALES | POB IGUALES | |
| DECISION | DECISION 99% | POB IGUALES | POB IGUALES | POB IGUALES | |
| | DECISION 99.8% | POB IGUALES | POB IGUALES | POB IGUALES | |

Tabla-6.12 Resultados de la prueba t de Student.

Ya que de acuerdo a la prueba de t se concluyó, para cada par de grupo de datos, estos pertenecen a una misma población, podemos decir que la versión del código SILNUC actualizada y mejorada en MATLAB en este proyecto, genera resultados estadísticamente iguales a los resultados generados por el código SILNUC desarrollado en FORTRAN.

Por lo tanto el código aquí presentado puede ser usado para los mismos fines que su antecesor.

7. CONCLUSIONES

La energía geotérmica es actualmente una de las energías renovables más importantes dentro de la cartera energética de varios países.

Existen varios estudios recientes enfocados al aprovechamiento de nuevos tipos de sistemas geotérmicos, tales como los sistemas de roca seca caliente, los magmáticos y los sedimentarios.

La geotermia tiene aun varios retos que superar, en cuestión de tecnología y conocimiento.

Se han desarrollado en la literatura diversas ecuaciones para describir la solubilidad de la sílice en ambientes geotérmicos bajo condiciones específicas de temperatura, presión y concentración de otras sales disueltas.

El conocimiento de los mecanismos de formación de incrustaciones por medio del fenómeno de nucleación y deposición molecular ha sido ampliamente estudiado por diversos autores

El uso de inhibidores dentro de los sistemas geotérmicos para evitar o reducir la formación de incrustaciones es uno de los métodos más usados dentro de la industria geotérmica.

El desarrollo de modelos numéricos que simulen las condiciones reales de cualquier pozo, incluyendo todos los parámetros involucrados, asi como todos los mecanismos presentes, es aun un reto.

A Pesar de lo anterior, la cinética de polimerización de la sílice en las salmueras geotérmicas es predecible bajo ciertas condiciones de Temperatura, elementos disueltos, fracción de vapor, y pH, mediante los procesos de nucleación homogénea y deposición molecular.

El programa de simulación numérica SILNUC es una herramienta vigente que sirve para interpretar y predecir el comportamiento de la sílice durante el proceso de reinyección.

Se llevó a cabo con éxito la actualización y mejora del código SILNUC, inicialmente en la plataforma de FORTRAN 77 y por último en MATLAB 7, siendo el objetivo principal de este trabajo el segundo.

Una de las mejoras realizadas a SILNUC fue la adición la posibilidad de elegir entre, la interacción directa con el usuario para la introducción de los datos de entrada durante la ejecución del programa, o la introducción de los datos de forma manual dentro del mismo código antes de iniciar su ejecución; debido a esta mejora se logro eliminar el uso de archivos de datos o de texto adicionales para introducir los valores de las variables de entrada.

Otra de las grandes ventajas de MATLAB es que posee la capacidad de utilizar los datos generados para crear graficas y tablas lo cual hace mucho más práctico el manejo y observación de los datos generados asi como la observación de las tendencias de estos.

En este rubro, una de las grandes mejoras fue la programación de, 23 graficas diferentes que ilustran la evolución de diversas variables de importancia, y de 3 tablas donde se muestran

algunos valores de entrada y la evolución de las variables de mayor interés, involucradas en el proceso de polimerización de sílice.

Otra ventaja de MATLAB sobre FORTRAN es que el último maneja una precisión de 7 a 15 dígitos decimales representativos, mientras que MATLAB maneja una precisión de 32 dígitos decimales representativos como mínimo, y esta precisión puede ser modificada por el usuario, hasta un máximo de 2^29 dígitos. Obviamente, al aumentar el número de dígitos representativos a utilizar dentro de la ejecución del programa, el tiempo de computo de verá afectado de manera directa.

Se observó que al declarar una cierta variable con un valor = 5.0E-5, FORTRAN, sin razón aparente, modifica este valor a 4.999999E-5, o bien, una variable con un valor = 6.0E-5, es modificada de igual manera sin razón aparente a 6.000003E-5.

Lo anterior podría pensarse que en realidad no afecta en demasía los resultados donde se usen estos valores, pero en realidad, ya que SILNUC usa procesos iterativos, un error tan pequeño tiende a propagarse y crecer, y por lo tanto llegar a afectar los resultados de otras variables donde se ocupe este valor.

Frente a esto, MATLAB representa un programa que nos ofrece una mayor exactitud en nuestros resultados ya que realiza estrictamente las operaciones que se le indican con los valores tal cual como son asignados desde inicio.

En resumen, las mejoras hechas al código SILNUC gracias al uso del programa y lenguaje de programación utilizado por MATLAB, son: eliminación del uso de archivos de datos o de texto adicionales para introducir los valores de las variables de entrada, reescritura del programa en un lenguaje estructurado (MATLAB), generación de herramientas visuales que facilitan el manejo e interpretación de los datos y resultados obtenidos (tablas y gráficas) e incremento de la exactitud en los resultados obtenidos.

De las corridas realizadas:

Se observó que el pH, la temperatura, la salinidad, el tamaño de la(s) partícula(s) presente(s) inicialmente y la concentración inicial de sílice coloidal, son parámetros que pueden afectar de manera importante la cinética de la polimerización de la sílice en ambientes geotérmicos.

Uno de los factores de mayor impacto en el proceso tratado es el pH, ya que se encontró que en valor de pH alcalino de aproximadamente = 8, la conversión de sílice disuelta a coloidal es mínima, mientras que para un pH menor (ácido) a este el comportamiento es completamente inverso.

El pH es uno de los parámetros que comunmente se puede modificar dentro de un pozo para aumentar la solubilidad de la sílice y asi frenar los procesos de polimerización.

Otro factor importante observado es la temperatura, ya que esta influye de manera directa en la saturación de sílice; si esta se pudiera mantenerse constante, se podría evitar la sobresaturación de la salmuera y por consiguiente disminuir la velocidad de polimerización.

Por otra parte, respecto al último grupo de simulaciones, se puede concluir que:

Con base en los resultados de las pruebas estadísticas realizadas a los datos generados por los dos códigos, los datos pertenecen a una misma población lo cual significa que ambos programas arrojan los mismos resultados, por lo cual la versión de SILNUC actualizada y mejorada en MATLAB en este proyecto, puede ser usada para los mismos fines que su antecesor desarrollado en FORTRAN.

Se encontró que las diferencias en los datos, debidas a la diferencia en la precisión entre los programas, no son significativas estadísticamente a un nivel de confianza del 99%.

Sin embargo, los resultados generados por SILNUC poseen ciertas limitaciones considerando que utiliza diversas ecuaciones de carácter empírico, por lo cual, dichos resultados deberán ser respaldados por medio de pruebas experimentales a nivel campo y laboratorio, con el objetivo de ser completamente confiables dentro de intervalos más amplios a los analizados por sus creadores.

SILNUC no modela el proceso de coagulación o floculación, la nucleación heterogénea, la precipitación sobre sustratos sólidos, ni el crecimiento de partículas por fusión; estas son algunas de las barreras de SILNUC que impiden que pueda predecir cuantitativamente la cantidad de sílice vítrea formada durante el proceso, asi como cuantificar el efecto de la interacción de las partículas coloidales con otros elementos presentes tales como aluminio por mencionar alguna.

8. RECOMENDACIONES

Se propone realizar pruebas experimentales en el laboratorio de interacción agua-roca del IER, para comparar y validar la capacidad numérica del código y el diseño de experimentos que conduzcan a la inhibición de la cinética de precipitación y de ser posible a nivel de campo, para comprobar los datos generados.

Elaborar un estudio detallado para tratar de modelar los procesos de coagulación, floculación, y nucleación heterogénea, por medio del desarrollo e inclusión de las ecuaciones relacionadas, para asi generar un programa mucho más completo y apegado a todos los fenómenos desarrollados dentro de los ambientes geotérmicos.

Incluir dentro del programa la posibilidad de que todos los resultados se descarguen en un archivo de texto para facilitar su manejo posterior y almacenamiento; asi mismo formular la posibilidad de elaborar graficas comparativas donde se muestren los resultados las diferentes corridas realizadas (NRUN).

Hacer un análisis estadístico más profundo, en relación a la propagación de errores aleatorios, es decir, de precisión, en las mediciones y el cómputo.

REFERENCIAS

BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Abraham F.F., Homogeneous nucleation theory, Academic Press, NY, (1974).
- [2] AGM Asociación Geotérmica Mexicana, Datos disponibles en la página web: http://www.geotermia.org.mx/geotermia/?page_id=688, (2013).
- [3] Alexander G.B. and Iler R.K., U.S Pat. 2,801,902, Du Pont, (1957).
- [4] Alexander G.B., Broge E.C. and Iler R.K., U.S. Pat. 2,765,242, Du Pont, (1956).
- [5] Alexander G.B., Heston W.M. and Iler R.K., The solubility of amorphous silica in water, The Journal of Physical Chemistry, 58, 2, 153, (1954).
- [6] Alexander G.B., The Effect of Particle Size on the Solubility of Amorphous Silica, The Journal of Physical Chemistry, 61, 11, 1563, (1957).
- [7] Alexander G.B., The Polymerization of Monosilicic Acid, Journal of the American Chemical Society, 76, 8, 2094-2096, (1954).
- [8] Anderson G.M. and Burnham C.W., Reactions of quartz and corundum with aqueous chloride and hydroxide solutions at high temperatures and pressures, American Journal of Science, 265, 12-27, (1967).
- [9] Angcoy E.C. and Arnórsson S., An Experiment on Monomeric and Polymeric Silica Precipitation Rates from Supersaturated Solutions, Proceedings of World Geothermal Congress, 2710, 1-6, (2010).
- [10] Anisimov, M.P., Nucleation: Theory and experiment, Russian Chemical Reviews, 72, 7, 591, (2003).
- [11] Antti J. L., Theoretical and computational approaches on heterogeneous nucleation, Thesis, University of Helsinki, 54p, (2006)
- [12] Arata E., Erich R. and Paradis R., Recent innovations in pigging technology for the removal of hard scale from geothermal pipelines. Proceedings of 20th Annual PNOC-EDC Geothermal Conference, 123–128, (1999).
- [13] Arellano V., Geotermia, Sección: Dos décadas de investigación, Boletín IIE, 23, 5, 223-232, (1999).
- [14] Arnórsson S., Deposition of calcium carbonate minerals from geothermal waters theoretical considerations, Geothermics, 18, 1-2: 33-39, (1989).
- [15] Arnórsson S., Injection of waste geothermal fluids: Chemical aspects, Proceedings World Geothermal Congress 2000, Kyushu - Tohoku, Japan, May 28 - June 10, (2000).
- [16] B. Fritz, A. Clément, Y. Amal, C. Noguera, Simulation of the nucleation and growth of simple clay minerals in weathering processes: The NANOKIN code. Geochimica et Cosmochimica Acta, 73, 1340–1358, (2009).
- [17] Badruk M. and Matsunaga I., Experimental results of silica removal from simulated solutions of geothermal brine of Kizildere field, Turkey, Geothermics, 30, 5, 561-570, (2001).
- [18] Band W., Dissociation treatment of condensing systems, The Journal of Chemical Physics, 7, 324–326, 1939a.

- [19] Band, W., Dissociation treatment of condensing systems. II, The Journal of Chemical Physics, 7, 927–931, 1939b.
- [20] Barry A.J., Daudt W.H., Domicone K.J., and Gilkey J.W., Crystalline Organosilsesquioxanes, Journal of the American Chemical Society, 77, 16, 4248-4252, (1955).
- [21] Baumann H., Solubility of silica in water, Beiträge zur Silikose-Forschung. Pneumokoniose, 37, 47, (1955).
- [22] Becker R. and Döring W., Kinetische Behandlung der Keimbildung in übersättigten Dämpfen, Annalen der Physik (Leipzig), 416, 8, 719–752, (1935).
- [23] Benning L.G. and Waychunas G.A., Nucleation, Growth, and Aggregation of Mineral Phases: Mechanisms and Kinetic Controls, In: Brantley S, Kubicki J.D. and White A.F., Kinetics of Water-Rock Interaction, 259-334, (2008).
- [24] Bergman I. and Paterson M.S., Silica powders of respirable size. I. Preliminary studies of dissolution rates in dilute sodium hydroxide, Journal of Applied Chemistry, 11, 10, 369-376, (1961).
- [25] Bergman I., Silica powders of respirable size. II. Dissolution rates in dilute hydrofluoric acid, Journal of Applied Chemistry, 12, 8, 336-341, (1962).
- [26] Bergman I., Silica powders of respirable size. IV. The long-term dissolution of silica powders in dilute hydrofluoric acid: An anisotropic mechanism of dissolution for the coarser quartz powders, Journal of Applied Chemistry, 13, 356-361, (1963).
- [27] Bertani R., World geothermal power generation in the period 2001-2005, Geothermics, 34, 6, 651-690, (2005).
- [28] Bethke C.M., Geochemical and Biogeochemical Reaction Modeling, Cambridge University Press, 543 pp, (2008).
- [29] Bethke, C.M., Geochemical Reaction Modeling, Concepts and Applications, Oxford University Press, New York, 397, (1996).
- [30] Blöcher M.G., Zimmermann G., Moeck I., Brandt W., Hassanzadegan A. and Magri F., 3D numerical modeling of hydrothermal processes during the lifetime of a deep geothermal reservoir, Geofluids, 10, 406-421, (2010).
- [31] Bloem J. and Giling L.J., Current topics in material science, (ed.) E Kaldis (Amsterdam: North-Holland), 1, (1978).
- [32] Blumberg A.A. and Stavrinou S.C., Tabulated functions for heterogeneous reaction rates: The attack of vitreous silica by hydrofluoric acid, The Journal of Physical Chemistry, 64, 10, 1438-1442, (1960).
- [33] Boer J.H., in Everett D.H. and Stone F.S., Eds., The Structure and Properties of Porous Materials, Tenth Symposium of the Colston Research Society (Univ. Bristol), Academic Press, New York, and Butterworths, London, 243, (1958).
- [34] Bradley M.S., Krech J.H. and Maurer J., Raman studies of the hydrolysis of tetramethyl orthosilicate. 1. Influence of formamide on the pH, The Journal of Physical Chemistry, 94, 13, 5402–5405, (1990).
- [35] Bricker O.P., Stability constants and Gibbs free energies of formation of magadiite and kenyaite, American Mineralogist, 54, 7-8, 1026-1033, (1969).

- [36] Brindley G.W., Unit cell of magadiite in air, in vacuo, and under other conditions, American Mineralogist, 54, 1583-1591, (1964).
- [37] Brown K., Thermodynamics and kinetics of silica scaling, Proceedings International Workshop on Mineral Scaling 2011, Manila, Philippines, 25-27 May, (2011).
- [38] Bruhn D., Manzella A., Vuataz F., Faulds J., Moeck I. and Erbas K., Exploration Methods In Geothermal Energy Systems: Exploration, Development, and Utilization, Wiley-VCH, (2010).
- [39] C. R. Chamorro, M. E. Mondejar, Ramos R., Segovia J.J., Martín M.C., Villamañán M.A., World geothermal power production status: Energy, environmental and economic study of high enthalpy technologies, Energy, 42, 1, 10-18, (2011).
- [40] Candelaria M.N.R., Garcia S.E., Baltazar Jr. A.D.J., Solis R.P., Cabel Jr. A.C., Nogara J.B., Reyes R.L., Jordan O.T., Methods of coping with silica deposition—the PNOC experience, Geothermal Resources Council Transactions, 20, 661–672, (1996).
- [41] Car R. and Parrinello M., Unified approach for molecular dynamics and density-functional theory, Physical Review Letters, 55, 22, 2471–2474, (1985).
- [42] Carmen P.C., Constitution of colloidal silica, Transactions of the Faraday Society, 36, 964-973, (1940).
- [43] Carr R.M. and Fyfe W.S., Some observations on the crystallization of amorphous silica, American Mineralogist, 43, 9-10, 908-916, (1958).
- [44] Cary L.W., de Jong B.H.W.S. and Walter Jr. E.D., A 29Si NMR study of silica species in dilute aqueous solution, Geochimica et Cosmochimica Acta, 46, 7, 1317–1320, (1982).
- [45] Chan S.H., A review on solubility and polymerization of silica, Geothermics, 18, 1-2, 49-56, (1989).
- [46] Chao E.C.T., Shoemaker E.M. and Madsen B.M., First Natural Occurrence of Coesite, Science, 132, 220-222, (1960).
- [47] Chen N.Y. and Smith F.A., Preparation of dealuminized mordenite, Inorganic Chemistry, 15, 2, 295, (1976).
- [48] Cherkinskii Y.S. and Knyazkova I.S., Dependence of SiO2 Concentration on pH over Solid Silica, Doklady Akademii Nauk SSSR, 198, 2, 358, (1971) [Engl. Transl. p. 415].
- [49] Cochran C.N. and Foster L.M., The stability of silica, The Journal of Physical Chemistry, 66, 2, 380, (1962).
- [50] Coes L., Jr., A New Dense Crystalline Silica, Science, 118, 3057, 131-132, (1953).
- [51] Coes L., Jr., U.S. Pat. 2,876,072 (Norton Co.), (1959).
- [52] Cosner S.R. and Apps J.A., A Compilation of Data on Fluids from Geothermal Resources in the United States, Report LBL-5936, Lawrence Berkeley Laboratory, May, (1978).
- [53] Dake H.C., Fleener F.L. and Wilson B.H., Quartz Family Minerals, McGraw-Hill, New York, 1938; Cameron E.N., Row R.B. and Weis P.L., Fluid inclusions in beryl and quartz from pegmatites of the Middletown District, Connecticut [Part2], American Mineralogist, 38, 3-4, 218-262, (1953).
- [54] Dalton R.L., private communication between Iler and Dalton, 19??.
- [55] Davis A.P. and Michaelides E.E., Geothermal power production from abandoned oil wells. Energy, 34, 866-872, (2009).

- [56] Depla A., Lesthaeghe D., van Erp T. S., Aerts A., Houthoofd K., Fan F., Li C., Van Speybroeck V., Waroquier M., Kirschhock C. E. A. and Martens J. A., 29Si NMR and UV–Raman Investigation of Initial Oligomerization Reaction Pathways in Acid-Catalyzed Silica Sol–Gel Chemistry, The Journal of Physical Chemistry C, 115, 9, 3562–3571, (2011).
- [57] Dhanasekaran R. and Ramasamy P., Heterogeneous nucleation and growth of polycrystalline silicon, Bulletin of Materials Science, 7, 5, 411-417, (1985).
- [58] Dmitrevskii G.E., Martynova L.G., Antoshenko E.I., and Lukomskaya Z.T., Solubility of Silicic Acid in Solutions of Alkali and Sodium and Potassium Carbonates, Russian Journal of Applied Chemistry, 44, 2381 (1971).
- [59] Edwards G.R., Evans L.F., and La Mer V.K., Ice nucleation by monodisperso silver iodide particles, Journal of Colloid Science, 17, 8, 749–758, (1962).
- [60] Efendiev Y. and Zachariah M.R., Hierarchical hybrid Monte-Carlo method for simulation of two-component aerosol nucleation, coagulation and phase segregation, Journal of Aerosol Science 34, 2, 169-188, (2003).
- [61] Elders W.A., Frðleifsson G.Ó. and Albertsson A., Drilling into magma and the implications of the Iceland Deep Drilling Project (IDDP) for high-temperature geothermal systems worldwide, Geothermics, 49, 111-118, (2014).
- [62] Elmer T.H. and Nordberg M.E., Solubility of Silica in Nitric Acid Solutions, Journal of the American Ceramic Society, 41, 12, 517-520, (1958).
- [63] Enel, Annual Financial Reports, 2007.
- [64] Eugster H.P., Science, Hydrous Sodium Silicates from Lake Magadi, Kenya: Precursors of Bedded Chert, 157, 3793, 1177-1180, (1967).
- [65] Farkas M., Fikar E., Rozsa P., and Zoltai G., Hung. Pat. 6844, (1973) [Chem. Abstr., 80, 64977h].
- [66] Featherstone J.L. and Powell D.R., Stabilization of highly saline geothermal brines, Journal of Petroleum Technology, 33, 4, 727–734, (1981).
- [67] Felipe M.A., Kubicki J.D. and Rye D.M., Hydrogen isotope exchange kinetics between H2O and H4SiO4 from ab initio calculations, Geochimica et Cosmochimica Acta, 67, 7, 1259–1276, (2003).
- [68] Feuston B.P. and Garofalini S.H., Oligomerization in silica sols, The Journal of Physical Chemistry, 94, 13, 5351–5356, (1990).
- [69] Flanigen E.M., Bennett J.M., Grose R.W., Cohen J.P., Patton R.L., Kirchner R.M. and Smith J.V., Nature, 271, 512-516, (1978).
- [70] Fletcher N.H., Active sites and ice crystal nucleation, Journal of the Atmospheric Sciences, 26, 6, 1266–1271, (1969).
- [71] Fletcher N.H., The Physics of Rainclouds, Cambridge University Press, 1962.
- [72] Fletcher, N.H., Size effect in heterogeneous nucleation, The Journal of Chemical Physics, 29, 3, 572–576, (1958).
- [73] Fokin V.M., Yuritsyn N.S. and Zanotto E.D., Nucleation and Crystallization Kinetics in Silicate Glasses: Theory and Experiment, Nucleation Theory and Applications, Wiley, 76– 83, (2005).

- [74] Fournier R.O. and Rowe J.J., Estimation of underground temperatures from the silica content of water from hot springs and wet-steam wells, American Journal of Science, 264, 9, 685-697, (1966).
- [75] Fournier R.O. and Rowe J.J., The solubility of amorphous silica in water at high temperatures and high pressures, American Mineralogist, 62, 1052-1056, (1977).
- [76] Fournier R.O. and Rowe J.J., The solubility of cristobalite along the three-phase curve, gas plus liquid plus cristobalite, American Mineralogist, 47, 897-902, (1962).
- [77] Fowler R.H. and Bernal J.D., Note on the pseudo-crystalline structure of water, Transactions of the Faraday Society, 29, 1049, (1933).
- [78] Frazier S.E., Bedford J.A., Hower J., and Kenney M.E., Inherently fibrous polymer, Inorganic Chemistry, 6, 9, 1693-1696, (1967).
- [79] Frenkel J., A General Theory of Heterophase Fluctuations and Pretransition Phenomena, The Journal of Chemical Physics, 7, 7, 538–547, (1939a).
- [80] Frenkel J., Kinetic Theory of Liquids, Oxford University Press, London, (1946).
- [81] Frenkel J., Statistical theory of condensation phenomena, The Journal of Chemical Physics, 7, 3, 200, (1939b).
- [82] Freundlich H., Capillary and colloid chemistry, Translated by H. Stafford Hatfield, B.Sc., Ph.D. pp. xv+883. London: Methuen and Co., Ltd., 1926. , Journal of the Society of Chemical Industry, 45, 44, 797–798, (1926).
- [83] Fridriksson T. and Thórhallsson S, Geothermal Utilization: Scaling and Corrosion, Iceland GeoSurvey, (2010).
- [84] Frondel C., The System of Mineralogy of DANA, 7th ed., Vol. 3, Silica Minerals, Wiley, New York, 1962.
- [85] Gallup D.L. and Featherstone J.L., Acidification of Steam Condensate for Incompatibility Control During Mixing with Geothermal Brine, US Patent 4,522,728, (1985).
- [86] Gallup D.L., Aluminum silicate scale formation and inhibition (2): scale solubilities and laboratory and field inhibition tests, Geothermics, 27, 4, 485–501, (1998).
- [87] Gallup D.L., The use of reducing agents for control of ferric silicate scale deposition, Geothermics, 22, 1, 39–48, (1993).
- [88] Gardner L.U., American Institute of Mining and Metallurgical Engineers Technical Publications, 929, 7, (1938).
- [89] Garzó G. and Hoebbel D., Gas chromatographic retention characteristics of trimethylsilylated silicate anions, Journal of Chromatography, 119, 173-179, (1976).
- [90] Geiermann J. and Schill E., 2-D Magnetotellurics at the geothermal site at Soultz-sous-Forêts: Resistivity distribution to about 3000m depth, Comptes Rendus Geoscience, 342, 7-8, 587-599, (2010).
- [91] Gérard F., Clément A. and Fritz B., Numerical validation of an Eulerian hydrochemical code using a 1-D multisolute mass transport system involving heterogeneous kineticallycontrolled reactions, Journal of Contaminant Hydrology, 30, 3–4, 199–214, (1998).
- [92] Gibbs J. W., Scientific Papers, vol. 1, Thermodynamics, Longmans Green, London, 1906.
- [93] Gibbs J.W, Collected works, Longman Green, London, (1928)

- [94] Gill J.S, Development of Scale Inhibitors, Corrosion, 96, Paper#229, 24-29 March, Denver, Colorado, (1996).
- [95] Gill J.S., and Yorke M.A, Calcium Carbonate Control in Highly Supersaturated Aqueous Environment, Corrosion, 94, paper# 195, (1994)
- [96] Gill J.S., Anderson C.D. and Varsanik R.G., Mechanism of scale inhibition by phosphonates, Proceedings of International Water Conference, IWC-83-4, (1983).
- [97] Gill J.S., Proceedings International Workshop on Mineral Scaling in Geothermal Environment 2011, Manila, Philippines, 25-27 May, (2011).
- [98] Girshick S. L. and Chiu C.-P., Kinetic nucleation theory: A new expression for the rate of homogeneous nucleation from an ideal supersaturated vapor, The Journal of Chemical Physics, 93, 2, 1273–1277, (1990).
- [99] Gomes J.R.B., Cordeiro M.N.D.S. and Jorge M., Gas-phase molecular structure and energetics of anionic silicates, Geochimica et Cosmochimica Acta, 72, 17, 4421–4439, (2008).
- [100] Goto K., States of silica in aqueous solution. II. Solubility of amorphous silica, Journal of the Chemical Society of Japan Pure Chemistry Section, 76, 1364-1366, (1955).
- [101] Gout R., Pokrovski G. S., Schott J. and Zwick A., Raman Spectroscopic Study of Aluminum Silicate Complexes at 20°C in Basic Solutions, Journal of Solution Chemistry, 29, 12, 1173– 1186, (2000).
- [102] Graham T., Anwendung der Diffusion der Flüssigkeiten zur Analyse, Justus Liebigs Annalen der Chemie, 121, 1, 1-77, (1862).
- [103] Graham T., Ueber die Eigenschaften der Kieselsäure und anderer analoger Colloïdsubstanzen, Justus Liebigs Annalen der Chemie, 135, 1, 65-79, (1865).
- [104] Greenberg S.A. and Chang T.N., Investigation of the Colloidal Hydrated Calcium Silicates. II. Solubility Relationships in the Calcium Oxide-Silica-Water System at 25°, The Journal of Physical Chemistry, 69, 1, 182-188, (1965).
- [105] Greenberg S.A. and Price E.W., The Solubility of Silica in Solutions of Electrolytes, The Journal of Physical Chemistry, 61, 11, 1539-1541, (1957).
- [106] Greenberg S.A., Thermodynamic Functions for the Solution of Silica in Water, The Journal of Physical Chemistry, 61, 2, 196-197, (1957).
- [107] Greenwood R., Thermal behavior of SiO2-X and its relation to the natural silica minerals, American Mineralogist, 52, 1662-1668, (1967).
- [108] Grigsby C.O., Tester J.W., Trujillo Jr. P.E., Counce D.A., Rock-water interactions in the Fenton Hill, new Mexico, hot dry rock geothermal systems I. fluid mixing and chemical geothermometry, Geothermics, 18, 5-6, 629-656, (1989).
- [109] Grose R.W. and Flanigen E.M., U.S. Pat. 4,061,724 (Union Carbide Corp.), (1977).
- [110] Gunnarsson I. and Arnórsson S., Amorphous silica solubility and the thermodynamic properties of H₄SiO₄ in the range of 0° to 350°C at P_{sat}, Geochimica et Cosmochimica Acta, 64, 13, 2295-2307, (1999).
- [111] Gunnarsson I. and Arnórsson S., Impact of silica scaling on the efficiency of heat extraction from high-temperature geothermal fluids, Geothermics, 34, 3, 320-329, (2005).
- [112] Haller W., Fibrous Silica, Nature, 191, 662-663, (1961).

- [113] Ham F.S., Diffusion-Limited Growth of Precipitate Particles, Journal of Applied Physics, 30, 10, 1518-1524, (1959).
- [114] Hamaker H.C., A general theory of lyophobic colloids. I, Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas, 55, 12, 1015-1026, (1936).
- [115] Hamaker H.C., A general theory of lyophobic colloids. II, Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas, 56, 1, 3-25, (1937).
- [116] Hamill P., Turco R.P., Kiang C.S., Toon O.B. and Whitten R.C., An analysis of various nucleation mechanisms for sulfate particles in the stratosphere, Journal of Aerosol Science, 13, 6, 561–585, (1982).
- [117] Harrar J.E., Locke F.E., Otto Jr. C.H., Lorsensen L.E., Monaco S.B., Frey W.P., Field tests of organic additives for scale control at the Salton Sea geothermal field, Society of Petroleum Engineers Journal, 22, 1, 17–27, (1982).
- [118] Harris R.K. and Knight C.T.G., Silicon-29 nuclear magnetic resonance studies of aqueous silicate solutions. Part 5.—First-order patterns in potassium silicate solutions enriched with silicon-29, Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2, 79, 10, 1539– 1561, (1983).
- [119] Hast N., A reaction between silica and some magnesium compounds at room temperature and at +37 °C, Arkiv För Kemi, 9, 343-360, (1956).
- [120] Heitmann H.G., Solubility of silicic acid in water and steam and its effect on silica deposits in turbines, Chemiker-Zeitung, 88, 22, 891-893, (1964).
- [121] Henley R.W., pH and silica scaling control in geothermal field development, Geothermics, 12, 4, 307–321, (1983).
- [122] Henschel H., Schneider A.M. and Prosenc M.H., Initial Steps of the Sol–Gel Process: Modeling Silicate Condensation in Basic Medium, Chemistry of Materials, 22, 17, 5105– 5111, (2010).
- [123] Herras Edwin B., Salonga N.D. and Rossel J.B., Mechanism of Calcium Carbonate Scaling in Mahanagdong Geothermal Field, Leyte, Philippines, Geothermal Resources Council Transactions, 24, 665-670, (2000).
- [124] Hibara Y., Tazaki S. and Kuragasaki M., Advanced H₂S gas treatment system for geothermal power plant—"geothermal gas injection technology", Geothermal Science and Technology, 2, 161–171, , (1990).
- [125] Holl H.G., Moeck I. and Schandelmeier H., Characterisation of the tectono-sedimentary evolution of a geothermal reservoir—implications for exploitation (Southern Permian Basin, NE Germany), Proceedings of the 2005 World Geothermal Congress, April, Antalya, Turkey, Paper 614, 5, (2005).
- [126] Hoover C.L., U.S. Pat. 2,965,448 (Du Pont), (1960).
- [127] Huang W.H. and Vogler D.L., Dissolution of opal in water and its water content, Nature, Physical Science, 235, 60, 157-158 (1972).
- [128] Hulett G., Solubility and Size of Particles, in Jerome Alexander, Colloid Chemistry, Chemical Catalog Co., New York, 637, 1926.
- [129] Huttrer, G.W., The Status of World Geothermal Power Generation 1995–2000, Proceedings World Geothermal Congress, 1, 23–37, (2000).

- [130] Icenhower J.P. and Dove P.M., The dissolution kinetics of amorphous silica into sodium chloride solutions: Effects of temperature and ionic strength, Geochimica et Cosmochimica Acta, 64, 24, 4193-4203, (2000).
- [131] IGA International Geothermal Association. Interactive web database. Available at: www.geothermal-energy.org/; (2010).
- [132] IGA International Geothermal Association. Interactive web database. Available at: www.geothermal-energy.org/; (2011).
- [133] Iglesias E., Arellano V.M., Torres R.J., Estimación del recurso y prospectiva tecnológica de la Geotermia en México. Instituto de Investigaciones Eléctricas, Reporte Interno, Proyecto No. 3753, 63 p., (2005).
- [134] Iler R.K in Bendz G. and Lindqvist I., Eds., Biochemistry of Silicon and Related Problems, Plenum Press, New York, 58, (1977).
- [135] Iler R.K. and Pinkney P.S., Polysilicic acid esters—Preparation from sodium silicate, Industrial and Engineering Chemistry Research, 39, 1379, (1947).
- [136] Iler R.K., Colloid Chemistry of Silica and Silicates, Cornell University Press, Ithaca, NY, 36-43, 87-95, (1955).
- [137] Iler R.K., Coloidal Silica, in Matijevic E., Surface and Colloid Science, Vol. 6, Wiley, NY, (1973).
- [138] Iler R.K., Effect of adsorbed alumina on the solubility of amorphous silica in water, Journal of Colloid and Interface Science, 43, 2, 399, (1973).
- [139] Iler R.K., Ion exchange properties of a crystalline hydrated silica, Journal of Colloid Science, 19, 7, 648-657, (1964).
- [140] Iler R.K., Polymerization of Silicic Acid: Catalytic Effect of Fluoride, The Journal of Physical Chemistry, 56, 6, 680-683, (1952).
- [141] Iler R.K., U.S. Pat. 2,885,336 (Du Pont), (1959).
- [142] Iler R.K., U.S. Pat. 3,492,137 (Du Pont), (1970).
- [143] Iler, R. K., The Chemistry of Silica, Plenum Press, Wiley Interscience, (1979).
- [144] Intercomp, Vertical steam-water flow in wells with heat transfer-VSTEAM, User's Manual. Resource Development and Engineering, Inc., Houston, Texas, U.S.A, (1981).
- [145] Jacobson C.A., Silica Fluff, The Journal of Physical Chemistry, 40, 3, 413-418, (1936).
- [146] Jørgensen S.S., Solubility and Dissolution Kinetics of Precipitated Amorphous Silica in 1 M NaClO4 at 25 degrees C, Acta Chemica Scandinavica, 22, 335-341, (1968).
- [147] Keat P.P., A new crystalline silica, Science, 120, 3113, 328-330, (1954).
- [148] Kelly C. P., Cramer C. J. and Truhlar D. G., Adding Explicit Solvent Molecules to Continuum Solvent Calculations for the Calculation of Aqueous Acid Dissociation Constants, The Journal of Physisical Chemistry A, 110, 2493–2499, (2006).
- [149] Kennedy G.C., A portion of the system silica-water, Economic Geology, 45, 7, 629-653, (1950).
- [150] Kennedy G.C., The solubility of some minerals in superheated steam at high pressures, Economy Geology, 46, 8, 821-835, (1951).
- [151] Kennedy G.C., Wasseberg G.J., Heard H.C. and Newton R.C., Institute of Geophysics and Planetary Physics-University of California Los Angeles Publication, (1960).

- [152] Kerminen V.-M., Anttila T., Lehtinen K.E.J. and Kulmala M., Parameterization for Atmospheric New-Particle Formation: Application to a System Involving Sulfuric Acid and Condensable Water - Soluble Organic Vapors, Aerosol Science Technology, 38, 10, 1001– 1008, (2004).
- [153] Khutorskoy M.D., Podgornych L.V., Leonov Yu.G. and Polyak B., Thermotomography As a New Tool for Studying the Geothermal Field, Georesources, 1, 8, 14–21, (2004).
- [154] Kitahara S., The solubility of quartz in water at high temperatures and pressures, Review of Physical Chemistry of Japan, 30, 109, 115-122, (1960).
- [155] Knight C.T.G., Balec R.J. and Kinrade S.D., The Structure of Silicate Anions in Aqueous Alkaline Solutions, Angewandte Chemie International Edition, 46, 43, 8148–8152, (2007).
- [156] Krauskopf K.B., Dissolution and precipitation of silica at low temperatures, Geochimica et Cosmochimica Acta, 10, 1-2, 1-26, (1956).
- [157] Kulmala, M. and Laaksonen, A., Binary nucleation of water-sulfuric acid system: Comparison of classical theories with different H2SO4 saturation vapor pressures, The Journal of Chemical Physics, 93, 1, 696–701, (1990).
- [158] LaMer V.K. and Healy T.W., Adsorption—flocculation reactions of macromolecules at the solid—liquid interface, Reviews of Pure Applied Chemistry, 13, 112, (1963).
- [159] Lazaridis M., Kulmala M., and Gorbunov B.Z., Binary heterogeneous nucleation at a nonuniform surface, Journal of Aerosol Science, 23, 5, 457–466, (1992).
- [160] Le Bihan M.-T., Kalt A., and Wey R., Etude structurale de KHSi205 et H2Si205, Bulletin de la Societe Francaise de Mineralogie et de Cristallographie, 94, 15-23, (1971).
- [161] Lichtenbelt J.W.Th., Ras H.J.M.C. and Weirsema P.H., Turbidity of coagulating lyophobic sols, Journal of Colloid Interface Science, 46, 3, 552-527, (1974).
- [162] Lichtner P.C., Continuum formulation of multicomponent-multiphase reactive transport, in
 P.C. Lichtner, C.I. Steefel, and E.H. Oelkers, Reactive Transport in Porous Media,
 Washington, D.C., Review in Mineralogy, Mineralogical Society of America, 1–82, (1996).
- [163] Lippert J.L., Melpolder S.B. and Kelts L.M., Raman spectroscopic determination of the pH dependence of intermediates in sol-gel silicate formation, Journal of Non-Crystalline Solids, 104, 1, 139–147, (1988).
- [164] Liu X., Lu X., Meijer E.J., Wang R. and Zhou H., Acid dissociation mechanisms of Si(OH)4 and Al(H2O)63+ in aqueous solution, Geochimica et Cosmochimica Acta, 74, 2, 510–516, (2010).
- [165] Lothe J. and Pound G.M., Reconsiderations of Nucleation Theory, The Journal of Chemical Physics, 36, 2080–2085, (1962).
- [166] Lund J.W. and Freeston D.H., World Wide Direct Uses of Geothermal Energy 2000, Proceedings World Geothermal Congress, vol. 1, pp. 1–21, (2000).
- [167] Lund J.W., Freeston D.H. and Boyd T.L., Direct Utilization of Geothermal Energy 2010
 Worldwide Review, Proceedings of the World Geothermal Congress 2010, Bali, Indonesia, 23, (2010).
- [168] Lyklema J., Dumont F., Watillon A., Tadros Th.F., Malati M.A., Estefan S.F., Healy T.W., Dick
 S.G., Parfitt G.D. and Kitchener J.A., General discussion, Discussions of the Faraday Society, 52, 372-380, (1971).

- [169] Mackenzie, F.T. and Gees R., Quartz: Synthesis at Earth-Surface Conditions, Science, New Series, 173, 533-535, (1971).
- [170] Makrides A.C., Turner M.J., Harvey W.W., Slaughter J., Brummer S.B., Offenhartz P. O'D. and Pearson G.F., Study of Silica Scaling from Geothermal Brines: Final Report for Period November 15, 1974 – April 30, 1977, Report COO-2607-5. EIC Corporation, 55 Chapel Street, Newton, Massachusetts 02158, January (1978).
- [171] Marshall W.L. and Warakomski J.M., Amorphous silica solubilities II. Effect of aqueous salt solutions at 25 °C, Geochimica et Cosmochimica Acta, 44, 915-924, (1980).
- [172] McAtee J.L, House L.R., and Eugster H.P., Magadiite from Trinity County, California, American Mineralogist, 53, 11-12, 2061-2069, (1968).
- [173] McCulloch L., A New Highly Silicious Soda—Silica Compound, Journal of the American Chemical Society, 74, 10, 2453-2456, (1952).
- [174] McIntosh G. J., A theoretical kinetic model of the temperature and pH dependent dimerization of orthosilicic acid in aqueous solution, Physical Chemistry Chemical Physics, 14, 2, 996–1013, (2012).
- [175] McIntosh Grant J., Theoretical investigations into the nucleation of silica growth in basic solution part I - ab Initio studies of the formation of trimers and tetramers, Physical Chemistry Chemical Physics 15, 9, 3155-3172, (2013).
- [176] Meinhold R.H., Rothbaum H.P. and Newman R.H., Polymerization of supersaturated silica solutions monitored by silicon-29 nuclear magnetic resonance, Journal of Colloid Interface Science, 108, 1, 234–236, (1985).
- [177] Mejorada A., Daimol A., Hermoso D., Hollams R., and McCormick J., Proceedings International Workshop on Mineral Scaling 2011, Manila, Philippines, 25-27 May (2011).
- [178] Mercado S., Cerro Prieto geothermoelectric project: pollution and basic protection, Geothermics, 2, 1394–1398, (1975).
- [179] Messer P.H., Pye D.S. and Gallus J.P., Injectivity restoration of a hot-brine geothermal injection well, Journal of Petroleum Technology, 30, 1225–1230, (1978).
- [180] MIT, The future of geothermal energy impact of enhanced geothermal systems (EGS) on the United States in the 21st century. Available at. Boston, USA: MIT Press, (2006).
- [181] Mitsyuk B.M., Study of the state of water in ion-substituted polysilicic acid gels by the spin-echo method, Theoretical and Experimental Chemistry, 17, 903 (1972)
- [182] Modgil M.S., Kumar S., Tripathi S.N. and Lovejoy E.R., A parameterization of ion-induced nucleation of sulphuric acid and water for atmospheric conditions, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 110, D19, 205, (2005).
- [183] Mora-Fonz M.J., Catlow C.R.A. and Lewis D.W., Oligomerization and Cyclization Processes in the Nucleation of Microporous Silicas, Angewandte Chemie International Edition, 44, 20, 3082–3086, (2005).
- [184] Morey G.W., Fournier R.O., and Rowe J.J., The solubility of amorphous silica at 25°C, Journal of Geophysical Research, 69, 10, 1995-2002, (1964).
- [185] Morey G.W., Hydrothermal Synthesis, Journal of the American Ceramic Society, 36, 9, 279-285, (1953).
- [186] Moya P., Nietzen F. and Yock A, Benefit from the utilization of a calcium carbonate Inhibition system for Production Wells at the Miravalles Geothermal Field, Proceedings World Geothermal Congress 2005, Antalya, Turkey 24-29, (2005).
- [187] Mroczek E.K., Bacon L., Graham D.J., Kotze K. and Pummer B., pH Modification Pilot Plant Trials. Proceedings World Geothermal Congress, Bali, Indonesia, (2010).
- [188] Mroczek E.K., White S.P. and Graham D.J., Deposition of amorphous silica in porous packed beds - predicting the lifetime of reinjection aquifers, Geothermics 29, 6, 737-757, (2000).
- [189] Napari I., Noppel M., Vehkamäki H. and Kulmala M., Parametrization of ternary nucleation rates for H2SO4-NH3-H2O vapors, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 107, D19, AAC 6-1_AAC 6-6, (2002).
- [190] Ngothai Y., Yanagisawa N., Pring A., Rose P., o'Neill B. and Brugger J., Mineral Scaling in Geothermal Fields: A Review, Proceedings of the Australian Geothermal Energy Conference 2010: 405-409, (2010).
- [191] Nielsen A.E., Kinetics of Precipitation, Macmillan, New York, (1964).
- [192] Nieva D. and Santoyo E., Simulación de la propiedades termodinámicas del agua, programa de computación PROPTER, IIE, (1982).
- [193] Nishida I., Shimada Y., Saito T., Okaue Y. and Yokoyama Takushi, Effect of aluminum on the deposition of silica scales in cooling water systems, Journal of colloid and Interface Science, 335, 10-23, (2009).
- [194] Noguera C., B. Fritz and Clément A., Simulation of the nucleation and growth of clay minerals coupled with cation exchange, Geochimica et Cosmochimica Acta, 75, 12, 3402– 3418, (2011).
- [195] Oehler J.H., Hydrothermal crystallization of silica gel, Geological Society of America Bulletin, 87, 1143-1152, (1976).
- [196] Okkerse C., Porous Silica, in B. G. Linsen, Physical and Chemical Aspects of Adsorbents and Catalysts, Academic, New York, Chapter 5, p. 219, (1970).
- [197] Olsson K., Crystalline organosilsesquioxanes, Arkiv För Kemi, 13, 37, 367, (1958).
- [198] Ordway F., Condensation Model Producing Crystalline or Amorphous Tetrahedral Networks, Science, 143, 800-801, (1964).
- [199] Otto M., Chemometrics. Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry, Weinheim, Wiley-VCH, 314, (1999).
- [200] Owen L.B., Precipitation of Amorphous Silica from High-Temperature Hypersaline Geothermal Brine, California University, Livermore (USA), Lawrence Livermore Lab., Technical Report, (1975).
- [201] Pabst A., The structure of leached gillespite, a sheet silicate, American Mineralogist, 43, 970-980, (1958).
- [202] Parkhurst D.L. and Appello C.A.J., User's Guide to PHREEQC (Version 2). A Computer Program for Speciation, Batch-reaction, One-dimensional Transport, and Inverse Geochemical Calculations. U.S. Department of the Interior, U.S.G.S., (1999).

- [203] Pereira J.C.G., Catlow C.R.A. and Price G.D., Ab Initio Studies of Silica-Based Clusters. Part I. Energies and Conformations of Simple Clusters, The Journal of Physical Chemistry A, 103, 17, 3252–3267, (1999a).
- [204] Pereira J.C.G., Catlow C.R.A. and Price G.D., Ab Initio Studies of Silica-Based Clusters. Part II. Structures and Energies of Complex Clusters, The Journal of Physical Chemistry A, 103, 17, 3268–3284, (1999b).
- [205] Phillips S.L., Mathur A.K. and Garrison W., Treatment methods for geothermal brines. In: Casper, L.A., Pinchback, T.R. (Eds.), Geothermal Scaling and Corrosion. ASTM Special Technical Publication 717. ASTM, Philadelphia, PA, pp. 207–224. (1980).
- [206] Place Joachim, Sausse Judith, Marthelot J.-M., Diraison M., Géraud Y. and Naville C., 3-D mapping of permeable structures affecting a deep granite basement using isotropic 3C VSP data, Geophysical Journal International, 186, 1, 245-263, (2011).
- [207] Pliego J.R.Jr. and Riveros J.M., A Theoretical Analysis of the Free-Energy Profile of the Different Pathways in the Alkaline Hydrolysis of Methyl Formate In Aqueous Solution, Chemistry – A European Journal, 8, 8, 1945–1953, (2002a).
- [208] Pliego J.R.Jr. and Riveros J.M., The Cluster–Continuum Model for the Calculation of the Solvation Free Energy of Ionic Species, The Journal of Physical Chemistry A, 105, 30, 7241– 7247, (2001).
- [209] Pliego J.R.Jr. and Riveros J.M., Theoretical Calculation of pKa Using the Cluster–Continuum Model, The Journal of Physical Chemistry A, 106, 7434–7439, (2002b).
- [210] Pliego J.R.Jr., Basic hydrolysis of formamide in aqueous solution: a reliable theoretical calculation of the activation free energy using the cluster-continuum model, Chemical Physics, 306, 1-3, 273–280, (2004).
- [211] Pliskin W.A. and Lehman H.S., Structural evaluation of silicon films, Journal of Electrochemical Society, 112, 10, 1013-1019, (1965).
- [212] Podgornykh, L.V. and Khutorskoy, M.D., Planetarnyi teplovoi potok. Karta m-ba 1: 30000000 (Planetary Heat Flow: Scale 1 : 30000000), Moscow: Orgservis, (1997).
- [213] Potapov V.V., Smyvalov S.A., Bliznyukov M.A., Gorbach V.A. and Kashpura V.N., Modeling of nucleation of orthosilicic acid in geothermal brine, Theoretical Foundations of Chemical Engineering, 40, 4, 416-422, (2006).
- [214] Pruppacher H.R. and Klett J.D., Microphysics of Clouds and Precipitation, Kluwer Acad., Norwell, Massachusett, USA, (1997).
- [215] Rao N.Z. and Gelb L.D., Molecular Dynamics Simulations of the Polymerization of Aqueous Silicic Acid and Analysis of the Effects of Concentration on Silica Polymorph Distributions, Growth Mechanisms, and Reaction Kinetics, The Journal of Physical Chemistry B, 108, 33, 12418–12428, (2004).
- [216] Rimstidt J.D. and Barnes H.L., The kinetics of silica-water reactions, Geochimica et Cosmochimica Acta, 44, 11, 1683-1699, (1980).
- [217] Rimstidt J.D., Quartz solubility at low temperatures, Geochimica et Cosmochimica Acta, 61, 13, 2553-2558, (1997).
- [218] Robinson B.A., Quartz Dissolution and Silica Deposition in Hot Dry Rock Geothermal systems, Thesis, (1982).

- [219] Roller P.S. and Ervin G.Jr., The System Calcium Oxide-Silica-Water at 30°. The Association of Silicate* Ion in Dilute Alkaline Solution, Journal of American Chemical Society, 62, 3, 461-471, (1940).
- [220] Rothbaum H.P., Anderton B.H., Removal of silica and arsenic from geothermal discharge waters by precipitation of useful calcium silicates, Proceedings of 2nd United Nations Symposium on the Development and Use of Geothermal Resources, 2, 1417–1425, (1975).
- [221] Rothbaum, H.P., Anderton, B.H., Harrison, R.F., Rohde, A.G., Slatter, A., Effect of silica polymerisation and pH on geothermal scaling, Geothermics 8, 1, 1–20, (1979).
- [222] Roy R., Silica O, a new common form of silica, Zeitschrift für Kristallographie, 111, 1-6, 185-189, (1959).
- [223] Ruehrwein R.A. and Ward D.W., Mechanism of clay aggregation by polyelectrolytes, Soil Science, 73, 5, 385-492, (1952).
- [224] Rustad J.R. and Hay B.P., A molecular dynamics study of solvated orthosilicic acid and orthosilicate anion using parameterized potentials, Geochimica et Cosmochimica Acta, 59, 7, 1251–1257, (1995).
- [225] Santoyo E.R. and Torres I.S., Escenario futuro de explotación de la energía geotérmica: hacia un desarrollo sustentable, Revista Digital Universitaria, 11, 10, 26p, (2010).
- [226] Santoyo E.R., Tesis: Simulación de procesos químicos en sistemas hidrotermales, 126, (1983).
- [227] Sanyal S.K., Future of geothermal energy, Proceedings of the Thirty-Fifth Workshop on Geothermal Reservoir Engineering, Stanford University, Stanford, California, 6, (2010).
- [228] Sausse J., Dezayes C., Louis D., Genter A. and Place J., 3D model of fracture zones at Soultzsous-Forêts based on geological data, image logs, induced microseismicity and vertical seismic profiles, Comptes Rendus Geoscience, 342, 531-545, (2010).
- [229] Schaffer C.L. and Thomson K.T., Density Functional Theory Investigation into Structure and Reactivity of Prenucleation Silica Species, The Journal of Physical Chemistry C, 112, 33, 12653–12662, (2008).
- [230] Scott D.W., Thermal Rearrangement of Branched-Chain Methylpolysiloxanes, Journal of the American Chemical Society, 68, 3, 356-358, (1946).
- [231] Shartsis L. and Spinner S., Surface tension of molten alkali silicates, Journal of Research of the National Bureau of Standards, 46, 5, 385-390, (1951).
- [232] Siever R., Silica Solubility, 0°-200° C., and the Diagenesis of Siliceous Sediments, The Journal of Geology, 70, 2, 127-150, (1962).
- [233] Siever R., The silica budget in the sedimentary cycle, American Mineralogist, 42, 11-12, 821-841, (1957).
- [234] Sigsbee R. A., Nucleation, A C Zettlemoyer (New York: Marcel Dekker), (1969).
- [235] Sjöberg S., Ingri N., Nenner A.-M. and Öhman L.-O., Equilibrium and structural studies of silicon(IV) and aluminium(III) in aqueous solution. 12. A potentiometric and 29Si-NMR study of silicon tropolonates, Journal of Inorganic Biochemistry, 24, 4, 267–277, (1985).
- [236] Skinner B.J. and Appleman D.E., Melanophlogite; a cubic polymorph of silica, American Mineralogist, 48, 854-867, (1963).

- [237] Smellie R.H. and LaMer V.K., Flocculation, subsidence and filtration of phosphate slimes: VI. A quantitative theory of filtration of flocculated suspensions, Journal of Colloid Interface Science, 13, 6, 589-599, (1958).
- [238] Smirnov Ya.B., Map of Heat Flow and Abyssal Temperatures in the Soviet Union and Adjacent Regions. Scale 1 : 10000000, Ed., Moscow: GUGK SM SSSR, (1980).
- [239] Smyslov A.A., Geotermicheskii atlas Rossii (Geothermal Atlas of Russia), Ed., St. Petersburg, (2000).
- [240] Sorokin A., Vancassel X., and Mirabel P., Kinetic model for binary homogeneous nucleation in the H2O-H2SO4 system: Comparison with experiments and classical theory of nucleation, The Journal of Chemical Physics, 123, 244508, (2005).
- [241] Sosman R.B., The Phases of Silica, American Ceramic Society Bulletin, 43, 213, (1964)
- [242] Sosman R.B., The Phases of Silica, Rutgers University Press, New Brunswick, N.J., 388, (1965).
- [243] Stapleton Mark and Weres Oleh, Proceedings International Workshop on Mineral Scaling in Geothermal Environment 2011, Manila, Philippines, 25-27 May (2011).
- [244] Steefel C. L., CrunchFlow. Software for Modeling Multicomponent Reactive Flow and Transport. User's Manual, (2008).
- [245] Stischov S.M. and Popova S.V., A new dense modification of silica, Geokhimiya, 10, 837, (1961).
- [246] Stöber W., Formation of Silicic Acid in Aqueous Suspensions of Different Silica Modifications, Advances in Chemistry, 67, 7, 161-182, (1967).
- [247] Stöber W., Silikotische Wirksamkeit und physikalisch-chemische Eigenschaften verschiedener Siliziumdioxid-Modifikationen, Beiträge zur Silikose-Forschung, 89, 1 (1966).
- [248] Straus C.M and Bauer J.M., U.S. Pat. 3,650,960 (Allied Chemical Corp.), (1972).
- [249] Strelko V.V., Mechanisms of Polymerization of Silicic Acid , Kolloidnyi zhurnal, 32 (3), 430 (1970).
- [250] Sutherland D.N., A theoretical model of floc structure, Journal of Colloid and Interface Science, 25, 3, 373-380, (1967).
- [251] Terleczky P. and Nyulászi L., The Effect of the Primary Solvate Shell on the Mechanism of the Stöber Silica Synthesis. A Density Functional Investigation, The Journal of Physical Chemistry A, 113, 6, 1096–1104, (2009).
- [252] Tobler Dominique J., Shaw Sam and Benning L.G., Quantification of initial steps of nucleation and growth of silica nanoparticles: An in-situ SAXS and DLS study, Geochimica et Cosmochimica Acta, 73, 18, 5377-5393, (2009).
- [253] Treadwell W.D. and Wieland W., Zur Kenntnis der Kieselsäurehydrate, Helvetica Chimica Acta, 13, 5, 842-864, (1930).
- [254] Trinh T.T., Jansen A.P.J. and Van Santen R. A., Mechanism of Oligomerization Reactions of Silica, The Journal of Physical Chemistry B, 110, 46, 23099–23106, (2006).
- [255] Trinh T.T., Jansen A.P.J., van. Santen R.A. and Meijer E.J., Role of Water in Silica Oligomerization, The Journal of Physical Chemistry C, 113, 7, 2647–2652, (2009b).
- [256] Trinh T.T., Jansen A.P.J., Van. Santen R.A. and Meijer E.J., The role of water in silicate oligomerization reaction, Physical Chemistry Chemical Physics, 11, 5092–5099, (2009a).

- [257] Ueda A., Kato K., Abe K., Furukawa T., Mogi K., Ishimi K., Recovery of silica from the Sumikawa geotermal fluids by addition of cationic reagents, Journal of the Geothermal Research Society of Japan, 22, 4, 249–258, (2000).
- [258] Van Der Lee J. and De Windt L., CHESS tutorial and cookbook. User's Guide Nr. LHM/RD/99/05, Ecole des Mines de Paris, Fontainebleau, France, (2000).
- [259] Van Lier J.A., De Bruyn P.L. and Overbeek Th. G., The solubility of quartz, The Journal of Physical Chemistry, 64, 11, 1675-1682, (1960).
- [260] Van Lier J.A., The Solubility of Quartz, Drukkerji en Uitgeversmij v/h Kemink en Zoon n.v. Dom Plein, Utrecht, Netherlands, (1965).
- [261] Van Olphen H. and Mysels K.J., Physical Chemistry Enriching Topics from Colloid and Surface Science IUPAC Commission 1.6, Theorex Inc., La Jolla, Calif., p. 12, (1975).
- [262] Vehkamäki H., Kulmala M., Napari I., Lehtinen K.E.J., Timmreck C., Noppel M. and Laaksonen A., An improved parameterization for sulfuric acid/water nucleation rates for tropospheric and stratospheric conditions, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 107, D22, AC 3-1-AAC 3-10, (2002).
- [263] Vehkamäki H., Määttänen A., Lauri A., Napari I. and Kulmala M., The heterogeneous Zeldovich factor, Atmospheric Chemistry and Physics Discussions, 7, 309-313, (2007).
- [264] Verma S.P., Estadística Básica para el Manejo de Datos Experimentales: Aplicación en la Geoquímica (Geoquimiometría), Universidad Nacional Autónoma de México, México, D.F., 186p, (2005).
- [265] Villaseñor L.B. and Calibugan A.A., Silica Scaling in Tiwi Current Solutions, Proceedings International Workshop on Mineral Scaling 2011, Manila, Philippines, 25-27, May, (2011).
- [266] Vogt C., Kosack C. and Marquart G., Stochastic inversion of the tracer experiment of the enhanced geothermal system demonstration reservoir in Soultz-sous-Forêts Revealing pathways and estimating permeability distribution, Geothermics, 42, 1, 1-12, (2012).
- [267] Volmer M. and Weber A., Keimbildung in übersättigten Gebilden, Zeitschrift für Physikalische Chemie, 119, 277–301, (1925).
- [268] Vysotskii Z.Z., Galinskaya V.I., Kolychev V.I., Strelko V.V., and Strazhesko D.N., The Role of Polymerization and Depolymerization Reactions of Silicic Acid, etc., in Program form Scientific Translations, Jerusalem, p. 75, (1974).
- [269] Walter J.V. and Helgeson H.C., Calculation of the thermodynamic properties of aqueous silica and the solubility of quartz and its polymorphs at high pressures and temperatures, American Journal of Science, 277, 10, 1315-1351, (1977).
- [270] Walton A.G., The Formation and Properties of Precipitates, Wiley-Interscience, New York, p. 155, (1967).
- [271] Wander M.C.F., Rustad J.R. and Casey W.H., Influence of Explicit Hydration Waters in Calculating the Hydrolysis Constants for Geochemically Relevant Metals, The Journal of Physical Chemistry A, 114, 4, 1917–1925, (2010).
- [272] Wang B. and Cao Z., Mechanism of Acid-Catalyzed Hydrolysis of Formamide from Cluster-Continuum Model Calculations: Concerted versus Stepwise Pathway, The Journal of Physical Chemistry A, 114, 12918–12927, (2010).

- [273] Weiss A. and Weiss A., Über Siliciumchalkogenide. VI. Zur Kenntnis der faserigen Siliciumdioxyd-Modifikation, Naturwissenschaften, 41, 12 (1954); Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie, 276, 1-2, 95-112, (1954).
- [274] Wells A.F., Structural Inorganic Chemistry, 4th ed., Clarendon Press, Oxford, (1975).
- [275] Weres O., Tsao L. and Iglesias E., Chemistry of silica in Cierro Prieto brines, LBL-10166, Contract W-7405-ENG-48, 62p (1980).
- [276] Weres O., Yee A. and Tsao L., Kinetics of Silica Polymerization, Prepared for the U.S. Department of Energy under Contract W-7405-ENG-48, Laurence Berkeley Laboratory, University of California, Berkeley, May, (1980).
- [277] Weyl W.A., A New Approach to Surface Chemistry and to Heterogeneous Catalysis, Mineral Industries Experiment Station. Bulletin, Pennsylvania State College, State College, Pa., 45, 25, (1951).
- [278] Weyl, W. A. and Marboe, E. C., The constitution of glasses: a dynamic interpretation. New York: Interscience Publishers, (1962-1967).
- [279] White D.E., Brannock W.W., and Murata K.J., Silica in hot-spring waters, Geochimica et Cosmochimica Acta, 10, 1-2, 27-59, (1956).
- [280] Willey J.D., The effect of pressure on the solubility of amorphous silica in seawater at 0°C, Marine Chemistry, 2, 4, 239-250, (1974).
- [281] Willis-Richards J. and Wallroth T., Approaches to the modelling of hdr reservoirs: A review, Geothermics, 24, 3, 307-332, (1995).
- [282] Wise S.S., Margrave J.L., Feder H.M. and Hubbard W.N., Fluorine bomb calorimetry. V. The heats of formation of silicon tetrafluoride and silica, The Journal of Physical Chemistry, 67, 4, 815-821, (1963).
- [283] Wise S.S., Margrave J.L., Feder H.M. and Hubbard W.N., The heat of formation of silica and silicon tetrafluoride, The Journal of Physical Chemistry, 66, 2, 381, (1962).
- [284] Wyart J. and Sabatier G., Transformations mutuelles des feldspaths alcalins. Reproduction du microcline et de l'albite. Ibid, Compte Rendu de l'Académie Sciences, 238, 702 (1954).
- [285] Xiao Y. and Lasaga A. C., Ab initio quantum mechanical studies of the kinetics and mechanisms of quartz dissolution: OH– catalysis, Geochimica et Cosmochimica Acta, 60, 13, 2283–2295, (1996).
- [286] Xu D. and Johnson W.L. Geometric Model for the Critical-Value Problem of Nucleation Phenomena Containing the Size Effect of Nucleating Agent. Physical Review B, 72, Brief Reports 052101, 1-4, (2005).
- [287] Xu T., Sonnenthal E., Spycher N. and Kartsen Prues, TOUGHREACT—A simulation program for non-isothermal multiphase reactive geochemical transport in variably saturated geologic media: Applications to geothermal injectivity and CO2 geological sequestration, Computers and Geosciences, 32, 145-165, (2006).
- [288] Yanagase T., Suginohara Y. and Yanagase K., The properties of scales and methods to prevent them, Geothermics, 2, 2, 1619–1623, (1970).
- [289] Yu F., Effect of ammonia on new particle formation: A kinetic H2SO4-H2O-NH3 nucleation model constrained by laboratory measurements, Journal of Geophysical Research, 111, D1, (2006).

- [290] Yue G.K. and Hamill P., The homogeneous nucleation rates of H2SO4-H2O aerosol particles in air, Journal of Aerosol Science, 10, 6, 609–614, (1979).
- [291] Zeldovich J., Theory of the formation of a new phase, Cavitation, Journal of Experimental and Theoretical Physics, 12, 525–538, (1942).
- [292] Zhang X.-Q., Trinh T.T., Van Santen R.A. and Jansen A.P.J., Mechanism of the Initial Stage of Silicate Oligomerization, Journal of American Chemical Society, 133, 17, 6613–6625, (2011).

Web

- [@-1] http://www.mathworks.com/help/symbolic/control-accuracy-of-numericcomputations.html
- [@-2] http://www.itl.nist.gov/div898/handbook/eda/section3/eda35h.htm
- [@-3] http://www.statistics4u.com/fundstat_eng/ee_nalimov_outliertest.html
- [@-4] http://www.statistics4u.com/fundstat_eng/ee_pearson_outliertest.html
- [@-5] http://www.graphpad.com/quickcalcs/grubbs2/

ÍNDICE DE FIGURAS, IMÁGENES Y TABLAS

FIGURAS

- Figura 1.1- Origen de los sistemas geotérmicos [Figura tomada de (Arellano, 1999)]. p. 4
- Figura 1.2- Fuentes de calor y pérdidas en el núcleo y manto de la tierra [Datos de (Jaupart, Labrosse, and Mareschal, 2007)]. p. 6
- Figura 1.3- Evolución de la capacidad energética geotérmica instalada desde 1975 al 2010 y capacidad planeada para 2015 [Datos (Chamorro et al., 2011)]. p. 12
- Figura 2.1 Partículas elementales en formas comunes de sílice coloidal. La agregación es de hecho en 3 dimensiones pero aquí está representada solo en 2. A, Sol; B, Gel; C, Polvo (Agregado) [Figura modificada de (Iler, 1979)]. p. 24
- Figura 2.2 Solubilidad en ppm de diversas formas de sílice en soluciones de agua y sal de 0-500 °C a presión autógena a menos que se indique lo contrario. Cuarzo: A, Ecuación de Van Lier (línea discontinua); B, Morey; C, Morey, Fournier, y Rowe. Cristobalita: G, Fournier y Rowe. Amorfa: H, Stöber; I, Elmer y Nordberg; J, Lagerström, en 0.5 M NaClO₄; K, Willey; L, Jones and Pytkowicz; M, Goto; N, Okkerse; O, Jørgensen, en 1.0 M NaClO₄ [Figura tomada de (Iler, 1979)]. p. 26
- Figura 2.3 Solubilidad de la sílice amorfa en ppm contra pH a diferentes temperaturas [Figura tomada de (Goto, 1955)]. p. 31
- Figura 2.4 Variación en la solubilidad de la sílice con respecto al radio de curvatura de la superficie. Los radios positivos de curvatura se muestran en corte transversal como partículas y proyecciones de una superficie de sílice. Los radios negativos se muestran como depresiones o agujeros en la superficie de la sílice, y en la grieta entre dos partículas [Figura modificada de (Iler, 1979)]. p. 32
- Figura 2.5 Relación entre solubilidad de la sílice amorfa en ppm a 25 °C en agua y tamaño de partícula en nm a pH=8: A, partículas hechas entre 80-100 °C; B, partículas hechas entre 25-50 °C [Figura tomada de (Iler, 1979)]. p. 33
- Figura 2.6 Relación entre el log de la solubilidad de la sílice amorfa en ppm a 25 °C en agua y el reciproco del tamaño de partícula a pH=8: A, partículas hechas de 80-100 °C; B, partículas hechas de 25-50 °C [Figura tomada de (Iler, 1979)]. p. 34
- Figura 2.7 Densidad (g/cm³) contra índice refractivo promedio de varias formas de sílice (Skinner and Appleman, 1963) [Figura modificada de (Iler, 1979)]. p. 37
- Figura 2.8 Mecanismo propuesto de disolución de sílice en agua en presencia de iones hidroxilo. La línea punteada representa la interfase entre la sílice a la izquierda y el agua a la derecha [Figura tomada de (Iler, 1979)]. p. 38
- Figura 2.9 Todos los grupos silicatos posible, hasta e incluyendo tetrámeros [Figura tomada de (McIntosh, 2013)]. p. 42
- Figura 2.10 Mecanismo de formación de enlaces Si-O-Si en solución básica; demostrado con la reacción de dimerización como un escenario prototipo [Figura tomada de (McIntosh, 2013)]. p. 43
- Figura 2.11 Rutas de crecimiento de los silicatos en solución básica previamente estudiadas que han sido consideradas explícitamente a través de técnicas ab-initio [Figura tomada de (McIntosh, 2013)]. p. 45
- Figura 2.12 Gel de sílice contra precipitado: a) sol, b) gel, c) floculación y precipitación [Figura modificada de (Brown, 2011)]. p. 47
- Figura 2.13 Efectos del pH en el sistema sílice coloidal-agua [Figura modificada de (Iler, 1979)]. p. 48
- Figura 2.14 Evaporación de la película de sol de sílice a gel y secado: sección transversal esquemática. a) sol; b) sol concentrado-comienza la agregación; c) gel comprimido por la tensión superficial; d) fractura del gel por encogimiento; e) fragmentos de gel seca separados. A, superficie del agua; S, sustrato sólido [Figura modificada de (Iler, 1979)]. p. 49

- Figura 2.15 Gel densa fuerte formada a partir de la mezcla de partículas grandes y pequeñas [Figura tomada de (Iler, 1979)]. p. 49
- Figura 2.16 Posible enlace entre las partículas de sílice a través de la coordinación con los cationes metalicos floculantes. (a) Los iones hidroxilo transfieren cargan negativa a la capa de agua enlazada al hidrogeno de los grupos silanol en la superficie de la partícula; equivalente a la adsorción de un ion hidroxilo; (b) El ion sodio hidratado es adsorbido en un sitio negativo formando un complejo neutro; (c) la colisión con un área sin carga de una segunda partícula permite al ion sodio coordinarse con los oxígenos del silanol y la superficie enlazada al agua, formando una coordinación de enlaces entre las partículas. Nota: los círculos representan a los átomos de oxigeno. Las partículas coloidales son mucho más grandes con respecto a los átomos representados aquí. Se pueden formar varios de puentes de sodio [Figura tomada de (Iler, 1979)].
 p. 52
- Figura 2.17 Floculación de partículas de sílice: puenteo por 1), micelas catiónicas surfactantes (por ejemplo, iones cetiltrimetilamonio); 2) moléculas poliméricas catiónicas tridimensionales (por ejemplo, almidón catiónico); 3) polímeros cationicos lineales (por ejemplo, polietilen imina) (Iler, 1979). p. 53
- Figura 2.18 Floculación de partículas de sílice por partículas coloidales de carga iónica opuesta [Figura tomada de (Iler, 1979)]. p. 54
- Figura 2.19 Floculación y coacervación de partículas de sílice a pH bajo por hidrogeno enlazado a éteres, alcoholes y amidas [Figura tomada de (Iler, 1979)]. p. 54
- Figura 2.20 Comportamiento de polimerización de la sílice. En solución básica (B) las partículas en el sol crecen en tamaño y decrecen en número; en solución acida o en presencia de sales floculantes (A), las partículas se agregan en redes tridimensionales y forman geles [Figura modificada de (Iler, 1979)]. p. 58
- Figura 2.21 Posibles intermediarios en la polimerización de sílice: A, complejo aniónico de dos silicios participando con un ion OH⁻; B, complejo catiónico de 3 silicios participando con un ion H⁺; C y D, propuestas alternas a A; E, intermediario en la superficie de la sílice [Figura tomada de (Iler, 1979)]. p. 64
- Figura 2.22 Pasos concebibles en la polimerización de la sílice a especies cíclicas. Sin embargo, la consideración de los ángulos de enlace hace que la formación del trímero cíclico sea mucho menos probable que la del tetrámero cíclico [Figura tomada de (Iler, 1977)]. p. 66
- Figura 2.23 Modelos moleculares de ácidos silícicos de la Figura 2-20. Las esferas representan a los átomos de oxígeno; los puntos negros, a los átomos de hidrogeno. Los átomos de silicio dentro del tetraedro de oxigeno no son visibles. No todos los átomos de hidrogeno y oxigeno son visibles. (1) Si(OH)₄; (2) (OH)₃OSiOSi(OH)₃; (3) (OH)₃SiOSi(OH)₂OSi(OH)₃; (4) [(OH)₂SiO]₃; (5) [(OH)₂SiO]₄ [Figura tomada de (Iler, 1977)]. p. 66
- Figura 2.24 Modelos de (A)ácido trisilícico cíclico, (B) ácido octasilícico cúbico, y (C) y (D) las partículas coloidales teóricas formadas por la condensación del monómero para formar anillos cerrados hasta que las especies originales estén completamente rodeadas por una capa de sílice depositada cubriendo los grupos silanol. Cuando se forma por arriba de pH7 la sílice interna contiene pocos grupos silanol. Diferentes tipos de oligomeros sin condensar por completo pueden formar los núcleos de las partículas coloidales. No existe evidencia de que A y B estén específicamente involucrados. Las esferas son los átomos de oxigeno; los puntos negros, los átomos de hidrogeno. Los átomos de silicio no son visibles [Figura tomada de (Iler, 1977)]. p. 66
- Figura 2.25 Figura esquemática de la forma de la curva de energía libre de formación de un sistema de un componente como una función de (a) numero de moléculas en el grupo, y (b) radio del grupo [Figura modificada de (Antti, 2006)]. p. 71
- Figura 2.26 Teoría clásica de la geometría del embrión en un sustrato de superficie (a) plana y (b) esférica [Figura modificada de (Antti, 2006)]. p. 75

| Figura 2.27 | Acción floculante del ion calcio seguido por el efecto de cementación espontánea a través de la |
|-------------|---|
| | disolución y re-deposición de la sílice soluble [Figura modificada de (Iler, 1979)]. p. 87 |
| Figura 3.1 | Solubilidad de sílice como función de la temperatura [Datos de (Gill, 2011)]. p. 92 |
| Figura 3.2 | Dosis de GEO980 como función del índice de saturación de sílice [Datos de (Gill, 2011)]. p. 93 |
| Figura 4.1 | Diagrama del programa SILNUC en su versión original de Weres et al. p. 97 |
| Figura 5.1 | Diagrama del programa SILNUC actualizado en FORTRAN 77. p. 112 |
| Figura 5.2 | Diagrama del programa SILNUC actualizado en MATLAB 7. p. 116 |
| Figura 6.1 | Variación de la concentración de sílice según resultados obtenidos por el Grupo No. 1 de simulaciones. p. 133 |
| Figura 6.2 | Variación de la concentración de sílice según resultados obtenidos por el Grupo No. 2 de simulaciones. p. 137 |
| Figura 6.3 | Variación de la concentración de sílice según resultados obtenidos por el Grupo No. 3 de simulaciones. p. 142 |

IMÁGENES

| lmágen 1.1 | Cabeza de pozo abandonada por incrustación. p. 15 |
|------------|--|
| Imágen 1.2 | Precipitación de Calcita en liners de los pozos productores [Imagen tomada de (Fridriksson and |
| | Thórhallsson, 2010)]. p. 16 |
| Imágen 1.3 | Separador de vapor con incrustación de sílice y corrosión [Imagen tomada de (Villaseñor and |
| | Calibugan, 2011)]. p. 16 |
| Imágen 1.4 | a) y b) Tuberías de transporte con incrustación de sílice, c) Tubería de pozo reinyector [Imágenes |
| | tomada de (Villaseñor and Calibugan, 2011)]. p. 17 |
| Imágen 5.1 | Párrafo tomado de la hoja de descripción del producto "Compaq Visual Fortran v 6.5" p. 117 |
| Imágen 5.2 | Párrafo tomado de la página oficial de MATLAB [@-1], p. 117 |

TABLAS

- Tabla-1.1PlantasGeotérmicasenoperación,capacidadinstaladayelectricidadgeneradaanualmente por país y mundial total en 2011 [Datos (IGA, 2011)].p. 10
- Tabla-1.2 Capacidad instalada por país y mundial total hasta el 2013 [Datos (AGM, 2014)]. p. 11
- Tabla-1.3Evolución de la capacidad total energética geotérmica instalada en el mundo desde 1975 al
2010 y pronóstico para el 2015 [Datos (Chamorro et al., 2011)]. p. 11
- Tabla-1.4Distribución mundial de las centrales eléctricas por tipo de planta [Datos (Chamorro et al.,
2011)]. p. 12
- Tabla-2.1Clasificación de las fases comunes de sílice cristalina anhidra según su estabilidad
termodinámica [Tabla modificada de (Iler, 1979)]. p. 22
- Tabla-2.2Fases de sílice formada a altas temperaturas y presiones [Tabla modificada de (Iler, 1979)].p. 22
- Tabla-2.3Solubilidad de sílice a 2 diferentes temperaturas según Fournier y Rowe [Tabla tomada de
(Iler, 1979)]. p. 30
- Tabla-2.4Solubilidad de la sílice amorfa a 25 °C a diferentes pH [Tabla tomada de (Iler, 1979)]. p. 31
- Tabla-2.5Entropía de la sílice amorfa según varios autores [Tabla tomada de (Iler, 1979)]. p. 36

- Tabla-2.6
 Entalpía de formación de la sílice amorfa según varios autores [Tabla tomada de (Iler, 1979)]. p. 36
- Tabla-2.7Entalpía del equilibrio de la sílice según varios autores [Tabla tomada de (Iler, 1979)]. p. 36
- Tabla-2.8 Tasas relativas de disolución de diferentes formas de sílice a un pH de 8.5 [Tabla tomada de (Iler, 1979)]. p. 39
- Tabla-2.9Tasa relativas de disolución de sílice propuestas por varios autores [Tabla tomada de (Iler,
1979)]. p. 39
- Tabla-2.10 Clases de agentes floculantes [Tabla tomada de (ller, 1979)]. p. 53
- Tabla-3.1 Composición de la salmuera sintética [Tabla tomada de (Gill, 2011)]. p. 93
- Tabla-4.1Concentraciones de sílice, relaciones de saturación y velocidades de deposición, obtenidas
de agua evaporada sobresaturada con cuarzo [Tabla modificada de (Santoyo, 1983)]. p.
101
- Tabla-6.1 Análisis químico de una salmuera geotérmica [Tabla modificada de (Santoyo, 1983)]. p. 121
- Tabla-6.2Parámetros de tiempo de residencia, fracción de agua evaporada, temperatura y pH. p.123
- Tabla-6.3Constantes especificas para cada especie según la ecuación de Debye-Hückel [Tabla
modificada de (Santoyo, 1983)]. p. 127
- Tabla-6.4Resultados obtenidos del primer grupo de simulaciones a diferentes valores de radio de
partícula. p. 133
- Tabla-6.5Resultados obtenidos del segundo grupo de simulaciones a diferentes valores de
concentración inicial de sílice coloidal. p. 137
- Tabla-6.6 Resultados obtenidos del tercer grupo de simulaciones a diferentes valores de pH. p. 141
- Tabla-6.7 Datos de entrada: TARJETA 1 Y 2, y TARJETA 3. p. 144
- Tabla-6.8 Datos de entrada: TARJETA 4. p. 144
- Tabla-6.9 Datos de entrada TARJETA 5. p. 144
- Tabla-6.10 Resultados obtenidos del cuarto grupo de simulaciones. p. 145-146
- Tabla-6.11 Resultados de la prueba F de Fisher. p. 152
- Tabla-6.12 Resultados de la prueba t de Student. p. 155

ÍNDICE DE ECUACIONES Y REACCIONES QUÍMICAS

CAPÍTULO I

| (1.1) | Reacción de formación de Calcita. p. 17 |
|--------------------|---|
| (1.2a) | Reacción iónica de la deposición de Carbonato de Calcio – 1. p. 17 |
| (1.2b) | Reacción iónica de la deposición de Carbonato de Calcio – 2. p. 18 |
| (1.3) | Reacción general de la sílice. p. 19 |
| CAPÍTULO II | |
| (2.1) | Reacción de dilución de sílice. p. 20 |
| (2.2) | Reacción de equilibrio de sílice – éter. p. 20 |
| (2.3a) | Reacción de disolución y disposición de sílice – 1. p. 21 |
| (2.3b) | Reacción de disolución y disposición de sílice – 2. p. 21 |
| (2.3c) | Reacción de disolución y disposición de sílice – 3. p. 21 |
| (2.4) | Ecuación de solubilidad del cuarzo de Van Lier (1965). p. 25 |
| (2.5a) | Ecuación de solubilidad de la sílice en ácido nítrico de Elmer y Nordberg – 1. p. 29 |
| (2.5b) | Ecuación de solubilidad de la sílice en ácido nítrico de Elmer y Nordberg – 2. p. 29 |
| (2.5c) | Ecuación de solubilidad de la sílice en ácido nítrico de Elmer y Nordberg – 3. p. 29 |
| (2.6) | Ecuaciones de solubilidad de sílice y de Fournier y Rowe (1977). p. 30 |
| (2.7) | Ecuaciones de solubilidad de sílice a presión constante = 1039 bar de Fournier y Rowe |
| | (1977). p. 30 |
| (2.8a) | Reacción de equilibrio de solubilidad de la sílice amorfa – 1. p. 30 |
| (2.8b) | Reacción de equilibrio de solubilidad de la sílice amorfa – 2. p. 30 |
| (2.9a) | Reacción de sílice total soluble. p. 31 |
| (2.9b) | Ecuación de sílice total soluble. p. 31 |
| (2.10a) | Ecuación de Ostwald – Freundlich – 1. p. 34 |
| (2.10b) | Ecuación de Ostwald – Freundlich – 2. p. 34 |
| (2.10c) | Ecuación de Ostwald – Freundlich – 3. p. 34 |
| (2.11) | Ecuación de formación de sílice. p. 36 |
| (2.12) | Ecuación del equilibrio global de la sílice. p. 36 |
| (2.13a) | Ecuación diferencial de la sílice amorfa de Rimstid y Barnes 1980. p. 38 |
| (2.13b) | Constante de la tasa de precipitación. p. 38 |
| (2.13c) | Constante de la tasa de disolución. p. 38 |
| (2.14) | Reacción de condensación de los grupos silanol. p. 57 |
| (2.15) | Reacción de auto condensación del monómero de sílice. p. 62 |
| (2.15a) | Tasa de polimerización de Strelko – 1. p. 64 |
| (2.15b) | Tasa de polimerización de Strelko – 2. p. 64 |
| (2.17) | Reacción de condensación de los grupos silanol ionizadas y no ionizadas. p. 65 |
| (2.18) | Reacción entre un monómero y un dimero ionizado. p. 65 |
| (2.19) | Ecuación de distribución de equilibrio de Cluster. p. 68 |
| (2.20) | Ecuación de energia libre necesaria para formar un grupo esferico de radio r. p. 70 |
| (2.21) | Ecuación de energía libre de formación de la nucleación homogénea. p. 70 |
| (2.22) | Ecuación de energia libre de formación de la nucleación homogenea (representación |
| (2.22) | convencional). p. 70 |
| (2.23) | Ecuación de radio crítico. p. 71 |
| (2.23a) (2.23b) | Ecuación de la energía libre calculada con el radio crítico – 1. p. 71 |
| (2.250) | Ecuación desalesada del radio srítico, p. 71 |
| (2.25) | Ecuación de energía libro exítico. p. 71 |
| (2.20) | Ecuación de energía libre de formación de un volumen de núcleos 1 n 72 |
| (2.20d) (2.26h) | Ecuación de energía libre de formación de un volumen de núcleos $= 1. \mu. 72$ |
| (2.200) (2.26c) | Ecuación de energía libre de formación de un volumen de núcleos $= 2$, p. 72 Ecuación, de energía libre de formación de un volumon de núcleos $= 2$, p. 72 |
| (2.200) | Ecuación de energía libre de formación de un volumen de núcleos $= 3. p. 72$ |
| (2.200) | Ecuación del radio crítico súper enfriado n. 72 |
| (2.20) | Economical radio critico super crimado, p. 72 |

- (2.29) Ecuación de la energía libre crítica súper enfriada. p. 72
- (2.30) Ecuación de la energía libre de la nucleación heterogénea. p. 73
- (2.31) Ecuación de funcionamiento del ángulo de contacto. p. 73
- (2.32) Ecuación de la energía libre de la nucleación heterogénea desglosada. p. 74
- (2.33) Energía libre interfacial neta. p. 74
- (2.34) Ángulo de contacto. p. 74
- (2.35) Volumen del embrión sustrato plano. p. 75
- (2.36) Área de la base del embrión sustrato plano. p. 75
- (2.37) Área de la tapa del embrión sustrato plano. p. 75
- (2.38) Relación de los volúmenes de la gota en el sustrato y una gota esférica. p. 75
- (2.39) Barrera energética de la nucleación heterogénea. p. 75
- (2.40) Energía libre de la nucleación heterogénea sustrato plano p. 75
- (2.41) Volumen del embrión sustrato esférico. p. 76
- (2.42) Área de la base del embrión sustrato esférico. p. 76
- (2.43) Área de la tapa del embrión sustrato esférico. p. 76
- (2.44) Ángulo de contacto φ . p. 76
- (2.45) Ángulo de contacto ψ . p. 76
- (2.46) Distancia d. p. 76
- (2.47) Energía libre de la nucleación heterogénea sustrato esférico. p. 76
- (2.48) Energía libre de formación crítica. p. 76
- (2.48a) Ecuación de parámetro de contacto 1. p. 76
- (2.48b) Ecuación de parámetro de contacto 2. p. 77
- (2.48c) Ecuación de parámetro de contacto 3. p. 77
- (2.50) Tasa de nucleación. p. 77
- (2.51) Número promedio de grupos críticos. p. 77
- (2.52) Concentración de núcleos críticos. p. 78
- (2.53) Tasa de nucleación expresión genérica. p. 78
- (2.54) Tasa de nucleación en términos de la energía libre crítica de formación. p. 78
- (2.55) Tasa de adición. p. 78
- (2.56) Tasa de nucleación desarrollada. p. 78
- (2.57) Tiempo para un estado de nucleación estable. p. 79
- (2.58) Tasa de nucleación de Hamill. p. 79
- (2.59) Número total de molé culas adsorbidas por unidad de área en el núcleo sólido. p. 04
- (2.60) Tasa de incidencia. p. 80
- (2.61) Tasa mínima de nucleación. p. 80
- (2.62) Tasa máxima de nucleación. p. 80
- (2.63) Tasa de condensación promedio. p. 80
- (2.64) Factor de no equilibrio de Zeldovich. p. 81
- (2.65) Factor de Zeldovich de la nucleación homogénea. p. 81
- (2.65a) Factor de Zeldovich de la nucleación heterogénea 1. p. 81
- (2.65b) Factor de Zeldovich de la nucleación heterogénea 2. p. 81
- (2.67) Energía libre crítica teoría de nucleación autoconsciente. p. 82
- (2.68) Tasa de nucleación teoría de la nucleación autoconsciente. p. 82
- (2.69) Energía libre de Dillmann y Meier. p. 82
- CAPÍTULO III (N/A)

CAPÍTULO IV

- (4.1) Ecuación de la cinética de la sílice. p. 101
- (4.2) Tasa de nucleación estado transitorio. p. 102
- (4.3) Tiempo constante de Collins. p. 102
- (4.4) Factor de Zeldovich. p. 103
- (4.5) Número de unidades de sílice en cada una de las partículas recién nucleadas. p. 103
- (4.6) Energía libre de formación de núcleos críticos. p. 105
- (4.7) Radio crítico. p. 105

| (4.8)Área crítica. p. 105(4.9)Velocidad estacionaria de la nucleación. p. 105(4.10)Variación del tiempo de inducción. p. 107(4.11)Tiempo de inducción de Makrides. p. 107(4.12)Energía libre de formación Lothe Pound. p. 108(4.13)Ecuación del factor de Lothe Pound. p. 109(4.14)Función de partición configuracional. p. 109(4.15)Número de posiciones dentro de un volumen de agua dado. p. 110(4.16)Factor de Lothe Pound. p. 110(4.17)Tasa de nucleación de Lothe Pound. p. 110(4.17)Tasa de nucleación de Lothe Pound. p. 110 CAPITULO V (5.1a)(5.1a)Variable de control SILNUC – 1. p. 113(5.1c)Variable de control SILNUC – 2. p. 113(5.1c)Variable de control SILNUC – 3. p. 113(5.1d)Variable de control SILNUC – 4. p. 113 CAPÍTULO VI (6.1)(6.2)Calidad de vapor de la mezcla. p. 120(6.3)Concentración de las sales a 70°C. p. 121(6.4)Balance de entalpías. p. 121(6.5)Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122(6.6)Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122(6.7a)Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración nicial de F - 1. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración nicial de F - 2. p. 122(6.7b)Cálculo de la | |
|--|------------|
| (4.9)Velocidad estacionaria de la nucleación. p. 105(4.10)Variación del tiempo de inducción. p. 107(4.11)Tiempo de inducción de Makrides. p. 107(4.12)Energía libre de formación Lothe Pound. p. 108(4.13)Ecuación del factor de Lothe Pound. p. 109(4.14)Función de partición configuracional. p. 109(4.15)Número de posiciones dentro de un volumen de agua dado. p. 110(4.16)Factor de Lothe Pound. p. 110(4.17)Tasa de nucleación de Lothe Pound. p. 110(4.17)Tasa de nucleación de Lothe Pound. p. 110 CAPITULO V (5.1a)(5.1a)Variable de control SILNUC – 1. p. 113(5.1b)Variable de control SILNUC – 2. p. 113(5.1c)Variable de control SILNUC – 3. p. 113(5.1d)Variable de control SILNUC – 4. p. 113 CAPÍTULO VI (6.1)Gasto total. p. 119(6.2)Calidad de vapor de la mezcla. p. 120(6.3)Concentración de las sales a 70°C. p. 121(6.4)Balance de entalpías. p. 121(6.5)Cálculo del factor de corrección. p. 122(6.6)Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122(6.7a)Cálculo de la concentración inicial de F – 1. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F – 2. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F – 2. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F – 1. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F – 2. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F – 2. p. 122 <td></td> | |
| (4.10)Variación del tiempo de inducción. p. 107(4.11)Tiempo de inducción de Makrides. p. 107(4.12)Energía libre de formación Lothe Pound. p. 108(4.13)Ecuación del factor de Lothe Pound. p. 109(4.14)Función de partición configuracional. p. 109(4.15)Número de posiciones dentro de un volumen de agua dado. p. 110(4.16)Factor de Lothe Pound. p. 110(4.17)Tasa de nucleación de Lothe Pound. p. 110(5.1a)Variable de control SILNUC – 1. p. 113(5.1b)Variable de control SILNUC – 2. p. 113(5.1c)Variable de control SILNUC – 3. p. 113(5.1d)Variable de control SILNUC – 4. p. 113CAPÍTULO VI(6.1)Gasto total. p. 119(6.2)Calidad de vapor de la mezcla. p. 120(6.3)Concentración de las sales a 70°C. p. 121(6.4)Balance de entalpías. p. 121(6.5)Cálculo del factor de corrección. p. 122(6.7a)Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F – 1. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F – 2. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F – 2. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F – 1. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F – 1. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F – 2. p. 122 <t< td=""><td></td></t<> | |
| (4.11)Tiempo de inducción de Makrides. p. 107(4.12)Energía libre de formación Lothe Pound. p. 108(4.13)Ecuación del factor de Lothe Pound. p. 109(4.14)Función de partición configuracional. p. 109(4.15)Número de posiciones dentro de un volumen de agua dado. p. 110(4.16)Factor de Lothe Pound. p. 110(4.17)Tasa de nucleación de Lothe Pound. p. 110 CAPITULO V (5.1a)Variable de control SILNUC – 1. p. 113(5.1b)Variable de control SILNUC – 2. p. 113(5.1c)Variable de control SILNUC – 3. p. 113(5.1d)Variable de control SILNUC – 4. p. 113 CAPÍTULO V (6.1)Gasto total. p. 119(6.2)Calidad de vapor de la mezcla. p. 120(6.3)Concentración de las sales a 70°C. p. 121(6.4)Balance de entalpías. p. 121(6.5)Cálculo del factor de corrección. p. 122(6.6)Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122(6.7a)Cálculo de la concentración inicial de F ⁻ – 1. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F ⁻ – 2. p. 122(6.8a)Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos – 1. p. 127 | |
| (4.12)Energía libre de formación Lothe Pound. p. 108 (4.13) Ecuación del factor de Lothe Pound. p. 109 (4.14) Función de partición configuracional. p. 109 (4.15) Número de posiciones dentro de un volumen de agua dado. p. 110 (4.16) Factor de Lothe Pound. p. 110 (4.17) Tasa de nucleación de Lothe Pound. p. 110 (4.17) Tasa de nucleación de Lothe Pound. p. 110CAPITULO V $(5.1a)$ Variable de control SILNUC – 1. p. 113 $(5.1b)$ Variable de control SILNUC – 2. p. 113 $(5.1c)$ Variable de control SILNUC – 3. p. 113 $(5.1d)$ Variable de control SILNUC – 4. p. 113CAPÍTULO VI (6.1) Gasto total. p. 119 (6.2) Calidad de vapor de la mezcla. p. 120 (6.3) Concentración de las sales a 70°C. p. 121 (6.4) Balance de entalpías. p. 121 (6.5) Cálculo del factor de corrección. p. 122 (6.6) Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122 $(6.7a)$ Cálculo de la concentración inicial de F – 1. p. 122 $(6.7b)$ Cálculo de la concentración inicial de F – 2. p. 122 $(6.8a)$ Cálculo de la concentración inicial de F – 2. p. 122 $(6.8a)$ Cálculo de la concentración inicial de F – 2. p. 122 | |
| (4.13)Ecuación del factor de Lothe Pound. p. 109 (4.14) Función de partición configuracional. p. 109 (4.15) Número de posiciones dentro de un volumen de agua dado. p. 110 (4.16) Factor de Lothe Pound. p. 110 (4.17) Tasa de nucleación de Lothe Pound. p. 110 CAPITULO V $(5.1a)$ Variable de control SILNUC – 1. p. 113 $(5.1b)$ Variable de control SILNUC – 2. p. 113 $(5.1c)$ Variable de control SILNUC – 3. p. 113 $(5.1c)$ Variable de control SILNUC – 4. p. 113 CAPÍTULO VI (6.1) Gasto total. p. 119 (6.2) Calidad de vapor de la mezcla. p. 120 (6.3) Concentración de las sales a 70°C. p. 121 (6.4) Balance de entalpías. p. 121 (6.5) Cálculo del factor de corrección. p. 122 (6.6) Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122 $(6.7a)$ Cálculo de la concentración inicial de F ⁻ – 1. p. 122 $(6.7b)$ Cálculo de la concentración inicial de F ⁻ – 2. p. 122 $(6.8a)$ Cálculo de la concentración inicial de solidos disueltos – 1. p. 127 | |
| (4.14)Función de partición configuracional. p. 109 (4.15) Número de posiciones dentro de un volumen de agua dado. p. 110 (4.16) Factor de Lothe Pound. p. 110 (4.17) Tasa de nucleación de Lothe Pound. p. 110 CAPITULO V $(5.1a)$ Variable de control SILNUC – 1. p. 113 $(5.1b)$ Variable de control SILNUC – 2. p. 113 $(5.1c)$ Variable de control SILNUC – 3. p. 113 $(5.1c)$ Variable de control SILNUC – 4. p. 113 CAPÍTULO VI (6.1) Gasto total. p. 119 (6.2) Calidad de vapor de la mezcla. p. 120 (6.3) Concentración de las sales a 70°C. p. 121 (6.4) Balance de entalpías. p. 121 (6.5) Cálculo del factor de corrección. p. 122 (6.6) Cálculo de la concentración inicial de F – 1. p. 122 $(6.7a)$ Cálculo de la concentración inicial de F – 2. p. 122 $(6.8a)$ Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos – 1. p. 127 | |
| (4.15)Número de posiciones dentro de un volumen de agua dado. p. 110 (4.16) Factor de Lothe Pound. p. 110 (4.17) Tasa de nucleación de Lothe Pound. p. 110 CAPITULO V $(5.1a)$ Variable de control SILNUC – 1. p. 113 $(5.1b)$ Variable de control SILNUC – 2. p. 113 $(5.1c)$ Variable de control SILNUC – 3. p. 113 $(5.1d)$ Variable de control SILNUC – 4. p. 113 CAPÍTULO VI (6.1) Gasto total. p. 119 (6.2) Calidad de vapor de la mezcla. p. 120 (6.3) Concentración de las sales a 70°C. p. 121 (6.4) Balance de entalpías. p. 121 (6.5) Cálculo del factor de corrección. p. 122 (6.6) Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122 $(6.7a)$ Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122 $(6.7b)$ Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122 $(6.7a)$ Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122 $(6.7b)$ Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122 $(6.7b)$ Cálculo de la concentración inicial de F - 1. p. 122 $(6.7b)$ Cálculo de la concentración inicial de F - 2. p. 122 $(6.8a)$ Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos - 1. p. 127 | |
| (4.16)Factor de Lothe Pound. p. 110 (4.17) Tasa de nucleación de Lothe Pound. p. 110 CAPITULO V $(5.1a)$ Variable de control SILNUC – 1. p. 113 $(5.1b)$ Variable de control SILNUC – 2. p. 113 $(5.1c)$ Variable de control SILNUC – 3. p. 113 $(5.1d)$ Variable de control SILNUC – 4. p. 113 CAPÍTULO VI (6.1) Gasto total. p. 119 (6.2) Calidad de vapor de la mezcla. p. 120 (6.3) Concentración de las sales a 70°C. p. 121 (6.4) Balance de entalpías. p. 121 (6.5) Cálculo del factor de corrección. p. 122 (6.6) Cálculo de la concentración inicial de F – 1. p. 122 $(6.7a)$ Cálculo de la concentración inicial de F – 2. p. 122 $(6.8a)$ Cálculo del factor de correctión de sólidos disueltos – 1. p. 127 | |
| (4.17)Tasa de nucleación de Lothe Pound. p. 110CAPITULO V(5.1a)Variable de control SILNUC – 1. p. 113(5.1b)Variable de control SILNUC – 2. p. 113(5.1c)Variable de control SILNUC – 3. p. 113(5.1d)Variable de control SILNUC – 4. p. 113CAPÍTULO VI(6.1)Gasto total. p. 119(6.2)Calidad de vapor de la mezcla. p. 120(6.3)Concentración de las sales a 70°C. p. 121(6.4)Balance de entalpías. p. 121(6.5)Cálculo del factor de corrección. p. 122(6.6)Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122(6.7a)Cálculo de la concentración inicial de F ⁻ – 1. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F ⁻ – 2. p. 122(6.8a)Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos – 1. p. 127 | |
| CAPITULO V $(5.1a)$ Variable de control SILNUC – 1. p. 113 $(5.1b)$ Variable de control SILNUC – 2. p. 113 $(5.1c)$ Variable de control SILNUC – 3. p. 113 $(5.1d)$ Variable de control SILNUC – 4. p. 113CAPÍTULO VI (6.1) Gasto total. p. 119 (6.2) Calidad de vapor de la mezcla. p. 120 (6.3) Concentración de las sales a 70°C. p. 121 (6.4) Balance de entalpías. p. 121 (6.5) Cálculo del factor de corrección. p. 122 (6.6) Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122 $(6.7a)$ Cálculo de la concentración inicial de F ⁻ – 1. p. 122 $(6.7b)$ Cálculo de la concentración inicial de F ⁻ – 2. p. 122 $(6.8a)$ Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos – 1. p. 127 | |
| $(5.1a)$ Variable de control SILNUC - 1. p. 113 $(5.1b)$ Variable de control SILNUC - 2. p. 113 $(5.1c)$ Variable de control SILNUC - 3. p. 113 $(5.1d)$ Variable de control SILNUC - 4. p. 113CAPÍTULO VI (6.1) Gasto total. p. 119 (6.2) Calidad de vapor de la mezcla. p. 120 (6.3) Concentración de las sales a 70°C. p. 121 (6.4) Balance de entalpías. p. 121 (6.5) Cálculo del factor de corrección. p. 122 (6.6) Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122 $(6.7a)$ Cálculo de la concentración inicial de F $^-$ - 1. p. 122 $(6.7b)$ Cálculo de la concentración inicial de F $^-$ - 2. p. 122 $(6.8a)$ Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos - 1. p. 127 | |
| (5.1b)Variable de control SILNUC - 2. p. 113(5.1c)Variable de control SILNUC - 3. p. 113(5.1d)Variable de control SILNUC - 4. p. 113 CAPÍTULO VI (6.1)Gasto total. p. 119(6.2)Calidad de vapor de la mezcla. p. 120(6.3)Concentración de las sales a 70°C. p. 121(6.4)Balance de entalpías. p. 121(6.5)Cálculo del factor de corrección. p. 122(6.6)Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122(6.7a)Cálculo de la concentración inicial de F ⁻ - 1. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F ⁻ - 2. p. 122(6.8a)Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos - 1. p. 127 | |
| (5.1c)Variable de control SILNUC - 3. p. 113(5.1d)Variable de control SILNUC - 4. p. 113 CAPÍTULO VI (6.1)Gasto total. p. 119(6.2)Calidad de vapor de la mezcla. p. 120(6.3)Concentración de las sales a 70°C. p. 121(6.4)Balance de entalpías. p. 121(6.5)Cálculo del factor de corrección. p. 122(6.6)Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122(6.7a)Cálculo de la concentración inicial de F ⁻ - 1. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F ⁻ - 2. p. 122(6.8a)Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos - 1. p. 127 | |
| (5.1d)Variable de control SILNUC - 4. p. 113CAPÍTULO VI(6.1)Gasto total. p. 119(6.2)Calidad de vapor de la mezcla. p. 120(6.3)Concentración de las sales a 70°C. p. 121(6.4)Balance de entalpías. p. 121(6.5)Cálculo del factor de corrección. p. 122(6.6)Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122(6.7a)Cálculo de la concentración inicial de F ⁻ - 1. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F ⁻ - 2. p. 122(6.8a)Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos - 1. p. 127 | |
| CAPÍTULO VI(6.1)Gasto total. p. 119(6.2)Calidad de vapor de la mezcla. p. 120(6.3)Concentración de las sales a 70°C. p. 121(6.4)Balance de entalpías. p. 121(6.5)Cálculo del factor de corrección. p. 122(6.6)Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122(6.7a)Cálculo de la concentración inicial de F ⁻ - 1. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F ⁻ - 2. p. 122(6.8a)Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos - 1. p. 127 | |
| (6.1) Gasto total. p. 119 (6.2) Calidad de vapor de la mezcla. p. 120 (6.3) Concentración de las sales a 70°C. p. 121 (6.4) Balance de entalpías. p. 121 (6.5) Cálculo del factor de corrección. p. 122 (6.6) Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122 (6.7a) Cálculo de la concentración inicial de F⁻ – 1. p. 122 (6.7b) Cálculo de la concentración inicial de F⁻ – 2. p. 122 (6.8a) Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos – 1. p. 127 | |
| (6.2)Calidad de vapor de la mezcla. p. 120(6.3)Concentración de las sales a 70°C. p. 121(6.4)Balance de entalpías. p. 121(6.5)Cálculo del factor de corrección. p. 122(6.6)Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122(6.7a)Cálculo de la concentración inicial de F - 1. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F - 2. p. 122(6.8a)Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos - 1. p. 127 | |
| (6.3)Concentración de las sales a 70°C. p. 121(6.4)Balance de entalpías. p. 121(6.5)Cálculo del factor de corrección. p. 122(6.6)Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122(6.7a)Cálculo de la concentración inicial de F - 1. p. 122(6.7b)Cálculo de la concentración inicial de F - 2. p. 122(6.8a)Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos - 1. p. 127 | |
| (6.4) Balance de entalpías. p. 121 (6.5) Cálculo del factor de corrección. p. 122 (6.6) Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122 (6.7a) Cálculo de la concentración inicial de F⁻ - 1. p. 122 (6.7b) Cálculo de la concentración inicial de F⁻ - 2. p. 122 (6.8a) Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos - 1. p. 127 | |
| (6.5) Cálculo del factor de corrección. p. 122 (6.6) Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122 (6.7a) Cálculo de la concentración inicial de F⁻ – 1. p. 122 (6.7b) Cálculo de la concentración inicial de F⁻ – 2. p. 122 (6.8a) Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos – 1. p. 127 | |
| (6.6) Cálculo de la concentración de las sales a 150°C. p. 122 (6.7a) Cálculo de la concentración inicial de F⁻ - 1. p. 122 (6.7b) Cálculo de la concentración inicial de F⁻ - 2. p. 122 (6.8a) Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos - 1. p. 127 | |
| (6.7a) Cálculo de la concentración inicial de F⁻ – 1. p. 122 (6.7b) Cálculo de la concentración inicial de F⁻ – 2. p. 122 (6.8a) Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos – 1. p. 127 | |
| (6.7b) Cálculo de la concentración inicial de F⁻ – 2. p. 122 (6.8a) Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos – 1. p. 127 | |
| (6.8a) Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos – 1. p. 127 | |
| · · · · · · · · · · · · · · · · · · · | |
| (6.8b) Cálculo del factor de concentración de sólidos disueltos – 2. p. 127 | |
| (6.9) Concentración inicial de sílice. p. 127 | |
| (6.10) Concentración inicial de sales. p. 127 | |
| (6.11) Concentración inicial de Flúor. p. 127 | |
| (6.12) Ecuación de Debye – Hückel. p. 127 | |
| (6.13) Coeficiente de actividad del Na ⁺ . p. 127 | |
| (6.14) Coeficiente de actividad del F ⁻ . p. 127 | |
| (6.15) Coeficiente de actividad del SiO ₂ . p. 127 | |
| (6.16a) Cálculo de la fracción de sílice monomérica en forma iónica – 1. p. 128 | |
| (6.16b) Cálculo de la fracción de sílice monomérica en forma iónica – 2. p. 128 | |
| (6.17a) Cálculo de la solubilidad de la sílice amorfa en agua pura – 1. p. 128 | |
| (6.17b) Cálculo de la solubilidad de la sílice amorfa en agua pura – 2. p. 128 | |
| (6.17c) Cálculo de la solubilidad de la sílice amorfa en agua pura – 3. p. 128 | |
| (6.18a) Cálculo de la actividad del agua y de la solubilidad del NaCl – 1. 128 | |
| (6.18b) Cálculo de la actividad del agua y de la solubilidad del NaCl – 2. 128 | |
| (6.18c) Cálculo de la actividad del agua y de la solubilidad del NaCl – 3. p. 128 | |
| (6.18d) Cálculo de la actividad del agua y de la solubilidad del NaCl – 4. p. 128 | |
| (6.19a) Cálculo de las relaciones de saturación de sílice – 1. p. 128 | |
| (6.19b) Cálculo de las relaciones de saturación de sílice – 2. p. 128 | |
| (6.20a) Cálculo del pH nominal – 1. p. 128 | |
| (6.20b) Cálculo del pH nominal – 2. p. 128 | |
| (6.20c) Cálculo del pH nominal – 3. p. 128 | |
| (6.21a) Cálculo de la tensión superficial de la interfaz (sílice – agua) – 1. p. 129 | |
| (6.21b) Cálculo de la tensión superficial de la interfaz (sílice – agua) – 2. p. 129 | |
| (6.21c) Cálculo de la tensión superficial de la interfaz (sílice – agua) – 3. p. 129 | |
| (6.22) Ecuación de la velocidad de deposición molecular en presencia de todas las sale | es. p. 129 |
| (6.23a) Parámetro $F_f(S_a)$ en función de S_a y S_t – 1. p. 129 | |
| (6.23b) Parámetro $F_f(S_a)$ en función de S_a y S_t – 2. p. 129 | |

- (6.24a) Cálculo de la relación de saturación 1. p. 129
- (6.24b) Cálculo de la relación de saturación 2. p. 129
- (6.24c) Cálculo de la relación de saturación 3. p. 129
- (6.25) Cálculo de la constante de equilibrio $K_{OH}(T)$. p. 129
- (6.26) Cálculo de la constante de equilibrio $K_{HF}(T)$. p. 130
- (6.27) Cálculo de la constante de equilibrio $K_{F^-}(T)$. p. 130
- (6.28a) Cálculo de la fracción de fluoruro como $F^- 1$. p. 130
- (6.28b) Cálculo de la fracción de fluoruro como F⁻ 2. p. 130
 (6.29) Cálculo de la ecuación de deposición molecular. p. 130
- (6.30a) Cálculo del radio del núcleo crítico 1. p. 130
- (6.30b) Cálculo del radio del núcleo crítico -2. p. 130
- (6.30c) Cálculo del radio del núcleo crítico 3. p. 130
- (6.31) Cálculo del área superficial del núcleo crítico. p. 130
- (6.32) Cálculo de la energía libre de formación crítica. p. 130
- (6.33) Cálculo del número de unidades de sílice en el núcleo crítico. p. 131
- (6.34) Cálculo del factor de Zeldovich. p. 131
- (6.35) Cálculo del tamaño de partículas de radio crítico. p. 131
- (6.36a) Cálculo de la función de partición total 1. p. 131
- (6.36b) Cálculo de la función de partición total 2. p. 131
- (6.37) Cálculo de la velocidad de deposición monomérica sobre el núcleo. p. 131
- (6.38) Cálculo de la tasa de nucleación homogénea. p. 131
- (6.39) Cálculo del tiempo constante de nucleación. p. 131
- (6.40) Cálculo del incremento DELTH. p. 132
- (6.41) Ecuación de la cinética de la sílice de SILNUC. p. 132
- (6.42) Ecuación del factor Z modificado. p. 147
- (6.43) Ecuación de Nalimov. p. 148
- (6.44) Ecuación de Pearson and Hartley. p. 148
- (6.45) Ecuación de Grubb. p. 149
- (6.46) Ecuación de condición de outlier de Grubb. p. 149
- (6.47) Ecuación del estadístico F de Fisher. p. 151
- (6.48a) Grados de libertad de la prueba F de Fisher 1. p. 151
- (6.48b) Grados de libertad de la prueba F de Fisher 2. p. 151
- (6.49) Ecuación del estadístico t de Student. p. 153
- (6.50) Ecuación de la desviación estándar combinada cuando se conocen los datos. p. 153
- (6.51) Ecuación de la desviación estándar combinada cuando no se conocen los datos. p. 153

ABREVIATURAS Y NOMENCLATURA

| 2-D | Dos dimensiones | kJ | Kilo Joules |
|--------------------------------|--|---------|---------------------------------------|
| 3-D | Tres Dimensiones | Km | Kilómetros |
| А | Área | КОН | Hidróxido de Potasio |
| Å | Armstrong | L | Litros |
| A* | Área crítica | Μ | Concentración Molar |
| atm | Atmósferas | m | Metros |
| Bar | Unidades de presión del sistema ingles | MD | Molecular Dynamic or Molecular |
| BLYP | Becke, Lee, Yang, and Parr | | Deposition |
| Btu | Unidades de trabajo del sistema inglés | mdd | Millones de dólares |
| С | Concentración | mg | Miligramos |
| CaCO ₃ | Calcita | min | Minutos |
| $CaSO_4$ | Anhidrita | MIT | Masachussets Institute of Techonology |
| CFE | Comisión Federal de Electricidad | ml | Mili litros |
| cm | Centímetros | Mol | Unidad de cantidad de sustancia |
| CO2 | Dióxido de Carbono | MW | Mega Watts |
| CO_{3}^{-2} | Carbonato | mW | mili Watts |
| COSMO | COnductor-like Screening MOdel | MWe | Mega Watts eléctricos |
| CPU | Central Processing Unit | MWt | Mega Watts térmicos |
| DFT | Density Functional theory | Ν | Concentración normal |
| DNP | Dinamic Nuclear Polarization | NaOH | Hidróxido de Sodio |
| EGS | Enhanced Geothermal Systems o | nm | Nano metros |
| | Engineered Geothermal Systems | NMR | Nuclear Magnetic Resonance |
| erg | Ergios | °C | Grados Celsius o Centígrados |
| ft | Pies | OH | Hidróxido |
| g o gr | Gramos | рН | Potencial de hidrogeno |
| GB | Giga Byte | рКа | Potencial de acidez |
| GHz | Giga Hertz | ppm | Partes por millón |
| GWh | Giga Watts hora | QIP | Factor Lothe-Pound |
| GWT | Giga Watts Térmicos | r | radio |
| h o hr | Horas | r* | radio crítico |
| Ho | Hipótesis Nula | Rmd | Tasa de deposición molecular |
| - H₁ | Hipótesis Alterna | S | Desviación Estándar |
| H ₂ CO ₂ | Ácido carbónico | S | Supersaturación |
| HCI | Ácido Clorhídrico | Si(OH)₄ | sílice Monomérica |
| HCO | Bicarbonato | SiO | Sílice |
| HDR | Hot Dry Rock-Roca Seca Caliente | T | Temperatura |
| het | heterogene@ | t | Tiempo |
| H, | Entalpia del liquido | Ton | Toneladas |
| hom | homogéne@ | TW | Tera Watts |
| H., | Entalnia del vanor | Z | Factor de no equilibrio de Zeldovich |
| | Tasa de nucleación | ΔG | Energía libre de Gibbs |
| | Integral-Equation-Formalism | ∆G* | Energía libre crítica de Gibbs |
| | Polarizable Continuum Model | ΔH | Cambio de la entalpia |
| IED | Instituto de Energías Renovables | ΔS | Cambio de la entropía |
| | Instituto de Effergias Renovables | 0 | Densidad |
| | | r Ta | Tiempo constante de Collins |
| in | | ·. | |
| K | Constante de Roltzman | | |
| ''B Khar | Constante de Doltzman | | |
| Kudi Kcal | | | |
| NUAL | | | |

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77

A

```
PROGRAM SILNUC
  LOGICAL LTH, LTD, LNSC
  CHARACTER FNAMEA*50, FNAMEB*50, FNAMEC*50, FNAMED*50
  COMMON /CALCSIL/ CSILV(3),CFIM(3,3),TCV(3),CSFV(3)
  COMMON /CLVAR/ CLDV(1200),CLMV(300),CLNV(300),CLRV(600),NCLC,DCSIL
  COMMON /CVALS/ PI, PI4, DENSN, DENSM, UMASS, CKB, ALN10, AVN, SILMW
  COMMON /GAMMA/ GAMC,GAMT,GAMZ,GAMMA,CAREA
  COMMON /KINCON/ HCMA,HCMI,TCMA,EPSIL,EPR,KRGC,IMAX,RLIM,ICCL,RRMN
  COMMON /NUCL/ FNCAP,ZLD,CN,QCAP,QT,RNUC,ANNUC,TAUC,RANUC,QLP
  COMMON /PH/ PH, PHL, PHN, PHNL, AH, FPH, FINT, DQS, DGAMQ, FF
  COMMON /PRINOUT/ NDP, DTP, TPN, KPN, IPR, IPR2, TCP, CLP, KLP, CDP, KDP
  COMMON /RKCS/ RK21, RK22, RK31, RK32, RK41, RK42
  COMMON /SALT/ PHI,SML,SMLI,GNA,ANA,AKSIL,ALPSIL,SCR,GSIL,GH
  COMMON /SETPAR/ DHCMA, DHCMI, DDH, TMAXM, DTPM
  COMMON /SILBUF/ CSI,CSII
  COMMON /SILKC/ ALPHAK, EK, AK, AKINC, AKINT, DKINC, DKINT
  COMMON /SILKF/ TOTFI, TOTF, PKF, RKF1, RKF2, ALPF, RATEKF, RATEKT, GF
  COMMON /SILKFC/ CKF1,TKF1,CKF2,TKF2
  COMMON /SILKEN/RATEK,RCF,RDEPF,FKINL,CSILS,SRA,SRR,CLAST,AKIN,DKIN
  COMMON /SPECIN/ TSPEC, TEMP, TEMPL, FLASH, GLASH, FLC, FLCL
  COMMON /SPECPAR/ NREF, ICALL, I1, I2, T1, T2
  COMMON /SPECS/ TREFV(50), FLASHRV(50), TEMPRV(50), PHRV(50)
  COMMON /START/ SILIN, SILOUT, ICX, INX, TSTART, TAUCS
  COMMON /STEPS/KSTP,THL,DELTC,DELTH,LTH,LTD,LNSC
  COMMON /WATERE/ DENS, EPSD, ADH, BDH, PKW, TK, ALNT, TKB
*THE FOLLOWING ARE PHYSICAL AND MATHEMATICAL CONSANTS.
*LEAVE THEM ALONE.
  DATA PI,CKB,AVN,SILMW/3.14159265359,1.38054E-16,6.02252E23,60.085/
  DATA VMOLE/27.2/
  DATA RK21, RK22, RK31, RK32, RK41, RK42/0., 0.5, 0., 1., 2., 2./
  DATA GAMC, GAMT, DQS, FF, QLP/50.30, -0.049, 6.84E14, 0.45, 3.34E25/
  DATA ALPHAK, EK, AK/5., 4296.6, 3.1171/
  DATA AKINC, AKINT, DKINC, DKINT /0.0977, 75.84, 0., 0./
  DATA CKF1, TKF1, CKF2, TKF2 / -11.723, 4039., -2.647, 1183. /
*THE FOLLOWING ARE PRESET CONTROL VARIABLES.
*CHANGE THEM IF YOU DARE.
  DATA EPSIL, EPR, RRMN / 0.02, 0.02, 0.001/
*THE FOLLOWING ARE DEFAULT VALUES FOR INPUT VARAIBLES.
  DATA IPR, IPR2, KDP, NDP, IMAX / 3, 3, 10, 50, 1000 /
  DATA PHI, SMLI, TCP, CDP / 0.92, 0.088, 1E10, 0.001/
  DATA DHCMA, DHCMI, DDH, TMAXM / 4., 2048., 64., 64. /
  UMASS=SILMW/AVN
  DENSN=AVN/VMOLE
  DENSM=DENSN*UMASS
  PI4=4.*PI
  ALN10=ALOG(10.)
```

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77

ANEXO

А

```
WRITE(UNIT=*, FMT=*) 'Enter data file name:'
   READ(UNIT=*, FMT='(A)') FNAMEA
   OPEN(UNIT=1, FILE=FNAMEA, STATUS='OLD')
   READ(UNIT=1, FMT=*) NRUN
   DO 5, KRUN = 1,NRUN
   READ(UNIT=1, FMT=*)NREF,NCLC,INX,IPRI,IPRI2,KDPI,NDPI,ITPM,IMAXI,
  1 IHCMA, IHCMI, IDH, IMAXM
   ICX=1
   IF(IPRI.NE.0) IPR=IPRI
   IF(IPRI2.NE.0) IPR2=IPRI2
   IF(KDPI.GT.0) KDP=KDPI
   IF(NDPI.GT.0) NDP=NDPI
   DTPM=2.**ITPM
   IF(IMAXI.GT.0) IMAX=IMAXI
   IF(IHCMA.GT.0) DHCMA=2.**IHCMA
   IF(IHCMI.GT.0) DHCMI=2.**IHCMI
   IF(IDH.GT.0) DDH=2.**IDH
   IF(IMAXM.GT.0) TMAXM=2.**IMAXM
   PRINT 12, NREF, NCLC, INX, IPR, IPR2, KDP, NDP, ITPM, IMAX, IHCMA, IHCMI, IDH,
  1 IMAXM
   PRINT 14, DTPM, DHCMA, DHCMI, DDH, TMAXM
   WRITE(UNIT=*, FMT=*) 'Enter data file name:'
   READ(UNIT=*, FMT='(A)') FNAMEB
   OPEN(UNIT=3, FILE=FNAMEB, STATUS='OLD')
   READ(UNIT=3, FMT=*)SILIN, SILOUT, PHIIN, SMLIIN, TOTFI, CSII, TCPI, CDPI
   IF(PHIIN.NE.0) PHI=PHIIN
   IF(SMLIIN.NE.0) SMLI=SMLIIN
   IF(TCPI.GT.0) TCP=TCPI
   IF(CDPI.GT.0) CDP=CDPI
   PRINT 6, SILIN, SILOUT, PHI, SMLI, TOTFI, CSII, TCP, CDP
   IF(CSII.GT.0) PRINT 13
   WRITE(UNIT=*, FMT=*) 'Enter data file name:'
   READ(UNIT=*, FMT='(A)') FNAMEC
   OPEN(UNIT=3, FILE=FNAMEC, STATUS='OLD')
   PRINT 7
   DO 2, K = 1,NREF
   READ(UNIT=3, FMT=*) TREFV(K), FLASHRV(K), TEMPRV(K), PHRV(K)
   PRINT 8, TREFV(K), FLASHRV(K), TEMPRV(K), PHRV(K)
2 CONTINUE
   TSTART=TREFV(1)
   KSTP=0
   IF(NCLC.LE.0) GO TO 9
   WRITE(UNIT=*, FMT=*) 'Enter data file name:'
   READ(UNIT=*, FMT='(A)') FNAMED
   OPEN(UNIT=3, FILE=FNAMED, STATUS='OLD')
   PRINT 10
   DO 4, K = 1,NCLC
   READ(UNIT=3, FMT=*) CLR,CLM
   CLR=CLR*1E-7
   PM=PI4/3.*DENSM*CLR**3
   CLNV(K)=CLM/PM
   CLMV(K)=CLM
   CLRV(K)=CLR
```

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77

А

| PRINT | 11,K | ,CLR, | ,CLM, | CLNV | (K) |
|-------|------|-------|-------|------|-----|
|-------|------|-------|-------|------|-----|

- 4 CONTINUE 9 CONTINUE
- CALL SETUP(IBORT) IF(IBORT.GT.0) GO TO 5 CALL MASTER
- 5 CONTINUE
 - 1 FORMAT(16I5)
 - 3 FORMAT(8F10.6)
 - 6 FORMAT(' SILIN, SILOUT =', 2F8.4, 3X, 'PHI, SMLI =', F8.4, 1PE12.4, 3X,/
 - 1 ' TOTFI =',1PE12.4,3X,' CSII =',0PF8.4,3X,'TCP =',1PE12.4,3X,
 - 2 'CDP =',0PF8.4/)
 - 7 FORMAT(6X,'TREF',5X,'FLASH',6X,'TEMP',8X,'PH'/)
- 8 FORMAT(1X,4F10.4) 10 FORMAT(1H0,3X,'K',6X,'RADIUS',8X,'MASS',6X,'NUMBER'/)
- 11 FORMAT(1X,I5,1P3E12.4)
- 12 FORMAT('NREF,NCLC,INX =',I3,I4,I3,2X,'IPR,IPR2 =',2I3,2X,
- 1 'KDP,NDP =',2I4,2X,/' ITPM,IMAX =',I3,I5,2X,'IHCMA,IHCMI,IDH,IMAX

```
2M=',4I3/)
```

- 13 FORMAT(' MONOSILICIC ACID BUFFERIN IS ASSUMED.'/)
- 14 FORMAT(1X, 'DTPM =',1PE11.3,3X, 'DHCMA,DHCMI =',1P2E11.3,3X,/
- 1 ' DDH,TMAXM =',1P2E11.3/)

```
END
```

SUBROUTINE MASTER LOGICAL LTH, LTD, LNSC COMMON /CALCSIL/ CSILV(3),CFIM(3,3),TCV(3),CSFV(3) COMMON /CLVAR/ CLDV(1200),CLMV(300),CLNV(300),CLRV(600),NCLC,DCSIL COMMON /CVALS/ PI,PI4,DENSN,DENSM,UMASS,CKB,ALN10,AVN,SILMW COMMON /KINCON/ HCMA, HCMI, TCMA, EPSIL, EPR, KRGC, IMAX, RLIM, ICCL, RRMN COMMON /NUCL/ FNCAP,ZLD,CN,QCAP,QT,RNUC,ANNUC,TAUC,RANUC,QLP COMMON /PRINOUT/ NDP, DTP, TPN, KPN, IPR, IPR2, TCP, CLP, KLP, CDP, KDP COMMON /SETPAR/ DHCMA, DHCMI, DDH, TMAXM, DTPM COMMON /SILKEN/RATEK, RCF, RDEPF, FKINL, CSILS, SRA, SRR, CLAST, AKIN, DKIN COMMON /SPECIN/ TSPEC, TEMP, TEMPL, FLASH, GLASH, FLC, FLCL COMMON /START/ SILIN, SILOUT, ICX, INX, TSTART, TAUCS COMMON /STEPS/KSTP,THL,DELTC,DELTH,LTH,LTD,LNSC CSF(DT)=CSFV(1)+CSFV(2)*DT+CSFV(3)*DT*DT PRINT 102 RNMX=0. LNSC=.TRUE. IF(IPR.GE.2) CALL OUTPUT PRINT 1 DO 4, KSTEP = 1, IMAX KSTP=KSTEP CALL DEPOSIT(ILOSS) IF(ILOSS.LT.0) GO TO 5 IF(ILOSS.NE.0) LNSC=.TRUE. IF(ILOSS.GT.0) GO TO 39 IF(INX.EQ.0) GO TO 39 TAU=1.08E-6/RDEPF*(ZLD*QT*RNUC*RNUC)**(-0.25) DHN=TAU/DDH

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77

| 21 | CONTINUE |
|----|---|
| | THN=THL+DELTH |
| | IF(DHN.GE.DELTH) GO TO 15 |
| | THN=THL+0.5*(DELTH+DHN) |
| | IF(THN.GT.TCV(1)) GO TO 39 |
| | DELTH=DHN |
| | TAUCS=TAUC |
| | IF(IPR.GE.3) PRINT 19, DELTH, TAUCS, TCV(1), THN |
| | IF(IPR.GE.3) PRINT 1 |
| 15 | CONTINUE |
| | IF(THN.GT.TCV(1)) GO TO 39 |
| | THL=THN |
| | IF(NCLC.EO.300) GO TO 38 |
| | TSPEC=THL |
| | CALL SPECIFY |
| | INSC=.TRUF. |
| | DT=THI-TCV(1) |
| | CSII = CSE(DT) |
| | KRGC=0 |
| | CALL SILKIN(CSIL) |
| | AN=ANNUC+0.5/ZLD |
| | ARG=3./(PI4*DENSN)*AN |
| | CLR=EXP(ALOG(ARG)/3.) |
| | CF=1EXP(-(THL-TSTART)/TAUCS) |
| | RANUCC=RANUC*CF |
| | CLN=RANUCC*DELTH |
| | IF(RANUCC.GT.RNMX) RNMX=RANUCC |
| | IF(RANUCC.LT.RRMN [*] RNMX) GO TO 37 |
| | NCLC=NCLC+1 |
| | CLRV(NCLC)=CLR |
| | CLNV(NCLC)=CLN |
| | CLM=PI4/3.*DENSM*CLR**3 |
| | CLM=CLM*CLN |
| | CLMV(NCLC)=CLM |
| | CSILV(1)=CSILV(1)-CLM |
| | IF(IPR.LT.5) GO TO 27 |
| | PRINT 2 |
| | PRINT 17,KSTEP,CLR,CLN,CLM,THL,NCLC |
| | PRINT 18,CSILV(1),ANNUC,AN,QT,RANUC,RANUCC,CF |
| 27 | CONTINUE |
| | CS1=CSILV(1) |
| | CS2=CSILV(2) |
| | CS3=CSILV(3) |
| | CSFV(1)=CFIM(1,1)*CS1+CFIM(1,2)*CS2+CFIM(1,3)*CS3 |
| | CSFV(2)=CFIM(2,1)*CS1+CFIM(2,2)*CS2+CFIM(2,3)*CS3 |
| | CSFV(3)=CFIM(3,1)*CS1+CFIM(3,2)*CS2+CFIM(3,3)*CS3 |
| | GO TO 21 |
| 39 | CONTINUE |
| | IF(.NOT.LTH) GO TO 12 |
| | DELTC=0.5*DELTC |
| | IF(IPR.GE.3) PRINT 13,DELTC,KSTEP |
| | IF(IPR.GE.3) PRINT 1 |
| | ICCL=KSTEP |
| | IF(IPR.GE.3) PRINT 1 ICCL=KSTEP |

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77

| | GO TO 16 |
|----|--|
| 12 | CONTINUE |
| | IF(.NOT.(LTD.AND.1.99*DELTC.LE.HCMA)) GO TO 16 |
| | IF(INX.GT.0.AND.DELTC.GT.0.5*DELTH) GO TO 16 |
| | DELTC=2.*DELTC |
| | IF(IPR.GE.3) PRINT 13.DELTC.KSTEP |
| | IF(IPR GE 3) PRINT 1 |
| | |
| 16 | CONTINUE |
| 10 | |
| | |
| | |
| | |
| | CO TO 42 |
| 77 | |
| 37 | |
| | IF(INX.EQ.0) GO TO 42 |
| | PRINT 3 |
| | PRINT 41,RANUCC,RRMN,RNMX |
| | IF(IPR.GE.2) CALL OUTPUT |
| | INX=0 |
| | GO TO 28 |
| 38 | CONTINUE |
| | IF(INX.EQ.0) GO TO 42 |
| | PRINT 3 |
| | PRINT 40 |
| | IF(IPR.GE.2) CALL OUTPUT |
| | INX=0 |
| | GO TO 28 |
| 43 | CONTINUE |
| | IF(INX.EQ.0) GO TO 42 |
| | PRINT 3 |
| | PRINT 11 |
| | IF(IPR.GE.2) CALL OUTPUT |
| | INX=0 |
| | GO TO 28 |
| 9 | CONTINUE |
| | PRINT 20 |
| | PRINT 10,SILOUT |
| | IF(IPR.GE.2) CALL OUTPUT |
| | ICX=0 |
| | GO TO 28 |
| 32 | CONTINUE |
| | PRINT 25 |
| | PRINT 33 |
| | IF(IPR.GE.2) CALL OUTPUT |
| | ICX=0 |
| | GO TO 28 |
| 6 | CONTINUE |
| | PRINT 26 |
| | PRINT 35 |
| | IF(IPR.GE.2) CALL OUTPUT |
| | ICX=0 |
| | GO TO 28 |

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77

А

```
5 CONTINUE
   PRINT 7
   PRINT 14
   ICX=0
   IF(IPR.GE.2) CALL OUTPUT
28 CONTINUE
   IF(IPR.LT.2) PRINT 36,KSTEP,TCV(1),CSILV(1)
   IF(ICX.GT.0) PRINT 1
42 CONTINUE
   IF(ICX.EQ.0) GO TO 8
   IF(TCV(1).GT.TCP) IPR=IPR2
   IF(IPR.LT.4) GO TO 4
   IF(KSTEP.GE.KPN) CALL OUTPUT
   IF(TCV(1).GE.TPN) CALL OUTPUT
4 CONTINUE
8 CONTINUE
  1 FORMAT(' KSTEP',5X,'TIME',3X,'CSIL',4X,'SRR',4X,'FLC',3X,'TEMP',
  1 4X, 'PH', 3X, 'PHN', 4X, 'FPH', 6X, 'RDEPF', 3X, 'NUC.RATE', 6X, 'CAREA', 3X,
  2 'NUC.FLUX',3X,'DEP.RATE',6X,'ALPSIL'/)
  2 FORMAT(26(' NUC ')/)
  3 FORMAT(//16(' ENDNUC ')/)
  7 FORMAT(//13(' ALL GONE ')/)
 10 FORMAT(' SILICA CONCENTRATION HAS DROPPED BELOW SILOUT =',F8.4/)
 11 FORMAT(' DENUCLEATION STARTED AND NUCLEATION ENDED'/)
 13 FORMAT(' NEW DELTC =',1PE12.4,' AT STEP =',15/)
 14 FORMAT(' ALL COLLOID CLASSES HAVE DISSOLVED AWAY. PROBLEM ENDED.'
  1/)
 17 FORMAT(' A NEW COLLOID CLASS HAS NUCLEATED AT KSTEP =', I5//
  1 ' RADIUS, NUMBER, TOT. MASS =', 1P3E12.3, 5X, 'TIME =', 1PE12.3, 3X,
  2 'NCLC =',15/)
 18 FORMAT(1X, 'CSIL, ANNUC, AN =', F8.4, 2F8.1, 3X, 'NUC.PF, S.S.RATE, CORR.RA
  1TE =',1P3E13.4,3X,'CORR.FACTOR =',0PF8.4/)
 19 FORMAT(' NEW DELTH, TAUCS =', 1P2E12.4, 3X, 'AT TCV(1), THN =', 1P2E12.4
  1/)
 20 FORMAT(//16(' SILOUT ')/)
 25 FORMAT(//18(' TIMEX ')/)
 26 FORMAT(//18(' CONEX ')/)
 33 FORMAT(' MAXIMUM TIME REACHED'/)
 35 FORMAT(' MAXIMUM NUMBER OF CONDENSATION STEPS COMLETED'/)
 36 FORMAT(' KSTEP =',I5,3X,'TCV(1) =',1PE12.3,3X,'CSIL =',0PF8.4/)
 40 FORMAT(' MAXIMUM NUMBER OF COLLOID CLASSES REACHED. NUCLEATION END
  1ED.'/)
 41 FORMAT(' PRECEEDING NUCLEATION RATE (',1PE12.4,') LESS THAN (',
  1 1PE12.4,') OF RECORDED MAXIMUM RATE (',1PE12.4,'). NUCLEATION END
  2ED'/)
 102 FORMAT(/)
   RETURN
   END
```

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77

А

SUBROUTINE SETUP(IBORT) LOGICAL LTH, LTD, LNSC REAL(8) TAUD, TAUN COMMON /CALCSIL/ CSILV(3),CFIM(3,3),TCV(3),CSFV(3) COMMON /CLVAR/ CLDV(1200),CLMV(300),CLNV(300),CLRV(600),NCLC,DCSIL COMMON /CVALS/ PI, PI4, DENSN, DENSM, UMASS, CKB, ALN10, AVN, SILMW COMMON /GAMMA/ GAMC,GAMT,GAMZ,GAMMA,CAREA COMMON /KINCON/ HCMA, HCMI, TCMA, EPSIL, EPR, KRGC, IMAX, RLIM, ICCL, RRMN COMMON /NUCL/ FNCAP,ZLD,CN,QCAP,QT,RNUC,ANNUC,TAUC,RANUC,QLP COMMON /PRINOUT/ NDP, DTP, TPN, KPN, IPR, IPR2, TCP, CLP, KLP, CDP, KDP COMMON /SETPAR/ DHCMA, DHCMI, DDH, TMAXM, DTPM COMMON /SILKEN/RATEK, RCF, RDEPF, FKINL, CSILS, SRA, SRR, CLAST, AKIN, DKIN COMMON /SPECIN/ TSPEC, TEMP, TEMPL, FLASH, GLASH, FLC, FLCL COMMON /SPECPAR/ NREF, ICALL, I1, I2, T1, T2 COMMON /SPECS/ TREFV(50), FLASHRV(50), TEMPRV(50), PHRV(50) COMMON /START/ SILIN, SILOUT, ICX, INX, TSTART, TAUCS COMMON /STEPS/KSTP,THL,DELTC,DELTH,LTH,LTD,LNSC IF(NCLC.LE.O.AND.INX.EQ.0) GO TO 9 LNSC=.TRUE. IBORT=0 ICALL=0 ICCL=0 KPN=0 CLP=1000. KLP=-100 KRGC=0 TSPEC=TSTART PRER=3./(4.*PI*DENSN) 1 CONTINUE TAUD=1.D80 TAUN=1.D80 CALL SPECIFY CSIL=SILIN*FLC CALL SILKIN(CSIL) TEST=ZLD*QT*RNUC*RNUC IF(TEST.GT.0) GO TO 2 IF(INX.EQ.0.AND.SRR.GT.1.) GO TO 2 IF(NREF.LE.1) GO TO 7 5 CONTINUE TSTART=T2 TSPEC=TSTART IF(TSPEC.GE.TREFV(NREF)) GO TO 7 GO TO 1 2 CONTINUE IF(INX.NE.0) TAUN=1.08E-6/RDEPF*TEST**(-0.25) IF(NCLC.LE.0) GO TO 11 CAREA=0. DO 12, K = 1,NCLC CR=CLRV(K) IF(CR.GT.RNUC) CAREA=CAREA+CR*CR*CLNV(K) 12 CONTINUE CAREA=CAREA*PI4*FLC IF(CAREA.GT.0) TAUD=(CSIL-CSILS)/(CAREA*RDEPF)

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77

| 11 | CONTINUE |
|----|--|
| | TAU=TAUN |
| | IF(TAUD.IT.TAUN) TAU=TAUD |
| | IF(TAU GT 9 9D79) GO TO 5 |
| | |
| | IF(NRFE F 1) GO TO 4 |
| | IE(DELTH GT (T2-T1)) GO TO 5 |
| л | |
| - | $HI = AI \cap G(TAII)/AI \cap G(2) + 0.5$ |
| | RTALI-2 **IHI |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | IF(INREF.GT.I.AND.TCIMA.GT.TREFV(INREF)) TCIVIA-TREFV(INREF) |
| | |
| | AIN-AININOC+0.5/2LD |
| | RLINI=EXP(ALOG(PRER AN)/3.) |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | C = R V (N C + C) = R + M |
| | |
| | |
| | |
| | PRINT 6 HCMA HCMI DELTH TCMA DTP NDP |
| | PRFC=PI4/3 *DENSM |
| | |
| | DO(3) K = 1 NCLC |
| | |
| | |
| | IE(K = O NCLC) CLNV/(K) = 1 |
| | $\Gamma(X, UQ, NOLO) CLIVV(K) = 1.$ |
| | CAPEA-CAPEA+DIA*CP*CP*CIAIV(K) |
| | $IE(K \mid T \mid N \cap C) \leq I \mid N - \leq I \mid N \mid + \cap M \setminus (K) \leq I \cap C$ |
| 2 | |
| 5 | |
| | CEIM(1, 1) - 1 |
| | CEIM(1,2) = 0 |
| | CFIM(1,2)=0. |
| | DFITC=HCMI |
| | TCV(1)=TSTART |
| | TCV(2)=TSTART-DFLTC |
| | IF(INX FO 0) RETURN |
| | TKB=CKB*(TFMP+273 15) |
| | DEB=1 /(DENSN*TKB*ALOG(SBB)) |
| | DER=4.*PI/(3.*TKB)*DER*DFR/AIN10 |
| | DERI=1./DER |
| | GAMCUB=GAMMA**3 |
| | PRINT 13.DER.DERI.GAMMA.GAMCUB |
| | RETURN |

А

| ANEXO | | CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77 |
|-------|--|--|
| 7 | CONTINUE IBORT=1 PRINT 8 | |
| 9 | CONTINUE IBORT=1 PRINT 10 RETLIBN | |
| | 6 FORMAT(' HCM 1 ' DTP,NDP =',1 | /A,HCMI =',1P2E12.4,3X,'DELTH,TCMA =',1P2E12.4,3X,/ PE12.4,I5/) |
| | 8 FORMAT(' INIT 1ED.'/) | IATION CONDITIONS NEVER REACHED. PROBLEM BEING ABORT |
| | 10 FORMAT(' NO 1EING ABORTED | COLLOID ADDED AND NUCLEATION NOT SPECIFIED. PROBLEM B |
| | 13 FORMAT(' D L 1 1PE13.5,3X,/' | OG10 TAU/D GAMMA 3 =',1PE13.5,3X,'RECIPROCAL =', GAMMA =',0PF7.2,3X,'GAMMA CUBED =',1PE13.5/) |
| | 14 FORMAT(1X/' 1 1P2E13.4/) | KNUC =',I5,3X,'ANNUC,AN =',2F8.1,3X,'ZLD,RLIM =', |
| | 15 FORMAT(' TAI END | JN,TAUD =',1P2E13.4,3X,'TAU,RTAU =',1P2E13.4/) |

SUBROUTINE DEPOSIT(ILOSS) LOGICAL LTH, LTD, LNSC COMMON /CALCSIL/ CSILV(3),CFIM(3,3),TCV(3),CSFV(3) COMMON /CLVAR/ CLDV(1200),CLMV(300),CLNV(300),CLRV(600),NCLC,DCSIL COMMON /CVALS/ PI, PI4, DENSN, DENSM, UMASS, CKB, ALN10, AVN, SILMW COMMON /GAMMA/ GAMC,GAMT,GAMZ,GAMMA,CAREA COMMON /KINCON/ HCMA,HCMI,TCMA,EPSIL,EPR,KRGC,IMAX,RLIM,ICCL,RRMN COMMON /NUCL/ FNCAP,ZLD,CN,QCAP,QT,RNUC,ANNUC,TAUC,RANUC,QLP COMMON /PH/ PH, PHL, PHN, PHNL, AH, FPH, FINT, DQS, DGAMQ, FF COMMON /PRINOUT/ NDP, DTP, TPN, KPN, IPR, IPR2, TCP, CLP, KLP, CDP, KDP COMMON /RKCS/ RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42 COMMON /SALT/ PHI,SML,SMLI,GNA,ANA,AKSIL,ALPSIL,SCR,GSIL,GH COMMON /SILKEN/RATEK,RCF,RDEPF,FKINL,CSILS,SRA,SRR,CLAST,AKIN,DKIN COMMON /SPECIN/ TSPEC, TEMP, TEMPL, FLASH, GLASH, FLC, FLCL COMMON /START/ SILIN, SILOUT, ICX, INX, TSTART, TAUCS COMMON /STEPS/KSTP,THL,DELTC,DELTH,LTH,LTD,LNSC **DIMENSION DCSV(4)** NCND=KSTP CSIL=CSILV(1) CSILN=CSIL TSPEC=TCV(1) DO 7, K = 1,4 KRGC=K IF(KRGC.EQ.1.OR.KRGC.EQ.3) GO TO 38 TSPEC=TSPEC+0.5*DELTC CALL SPECIFY 38 CONTINUE DCSIL=CSILN*GLASH*DELTC DCS=DCSIL CALL SILKIN(CSILN) DCSV(K)=DCSIL

| AN | EXO CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77 |
|----|---|
| | IF(KRGC.EQ.1) CSILN=CSIL+0.5*DCSIL |
| | IF(KRGC.EQ.2) CSILN=CSIL+RK21*DCSV(1)+RK22*DCSIL |
| | IF(KRGC.EQ.3) CSILN=CSIL+RK31*DCSV(2)+RK32*DCSIL |
| 7 | CONTINUE |
| | CSILN=DCSV(1)+RK41*DCSV(2)+RK42*DCSV(3)+DCSV(4) |
| | CSILN=CSIL+CSILN/6. |
| | TCV(3)=TCV(2) |
| | TCV(2) = TCV(1) |
| | TCV(1)=TSPEC |
| | IF(NCND GT 1) GO TO 11 |
| | CSUV(1)=CSU |
| | |
| | CSIIV(2)=CSII - DEISII |
| | CSILV(2) = CSILV(2) - DELSIL |
| 11 | CONTINUE |
| | C(1)/(3)=C(1)/(2) |
| | CSILV(2)=CSILV(2) |
| | |
| | CSIL=CSILV(2) |
| | |
| | TESTH=(CSIE CSIE) |
| | C(1)/(1)-C(1) |
| | |
| | ITD-2 *TESTH IT EDSI |
| | PREC-DIA/3 * DENSM |
| | |
| | SUNCW-U. |
| | |
| | PO 14 K = 1 NCIC |
| | CP - CL D V(K) |
| | CR = CLRV(R) |
| | |
| | $CLIVI-PREC CR^{-5} CLIVV(R)$ |
| | $ \Gamma(CP, CT, Q, 2*PL, MA) \subset Q, TQ, A2$ |
| | CSU_CSU_CSU_CSU |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| h | |
| 3 | |
| | |
| | |
| | CLRV(K)=0. |
| | |
| 40 | |
| 43 | |
| | |
| | |
| | TESTH=(CR-CRP)/CRP |
| | IESIH=ABS(TESTH) |

```
ANEXO
                         CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77
   SUMCW=SUMCW+CLM
   STEST=STEST+CLM*TESTH
14 CONTINUE
   IF(SUMCW.GT.0.) GO TO 2
   ILOSS=-1
   RETURN
2 CONTINUE
   TESTH=STEST/SUMCW
   LTH=LTH.OR.TESTH.GT.EPR
   LTD=LTD.AND.2.*TESTH.LT.EPR
   IF(IPR.LT.1) GO TO 5
   IF(CSILV(1).GT.(CLP-CDP).AND.NCND.LT.(KLP+KDP)) GO TO 5
   ARG=-(TCV(1)-TSTART)/TAUCS
   RANUCC=RANUC*(1.-EXP(ARG))
   FMN=PI4*DENSM/3.*RNUC**3*RANUCC
   FMC=-(DCSV(4)-DCS)/DELTC
   PRINT 4, NCND, TCV(1), CSILV(1), SRR, FLC, TEMP, PH, PHN, FPH, RDEPF
  1,RANUCC,CAREA,FMN,FMC,ALPSIL
   RANUC=0.
   CLP=CSILV(1)
   KLP=NCND
5 CONTINUE
   IF(INX.EQ.0) RETURN
   IF((NCND-ICCL).GE.3) GO TO 17
   T2=TCV(2)-TSPEC
   T3=TCV(3)-TSPEC
   D=T2*T3*(T3-T2)
   CFIM(2,1)=(T2*T2-T3*T3)/D
   CFIM(2,2)=T3*T3/D
   CFIM(2,3)=-T2*T2/D
   CFIM(3,1)=(T3-T2)/D
   CFIM(3,2)=-T3/D
   CFIM(3,3)=T2/D
17 CONTINUE
   CS1=CSILV(1)
   CS2=CSILV(2)
```

```
CS3=CSILV(3)
 CSFV(1)=CFIM(1,1)*CS1+CFIM(1,2)*CS2+CFIM(1,3)*CS3
 CSFV(2)=CFIM(2,1)*CS1+CFIM(2,2)*CS2+CFIM(2,3)*CS3
 CSFV(3)=CFIM(3,1)*CS1+CFIM(3,2)*CS2+CFIM(3,3)*CS3
 IF(IPR.LT.6) RETURN
 PRINT 100, NCND, TCV, CSILV, CSFV
1 FORMAT(19(' DENUC ')/)
4 FORMAT(1X,I4,1PE11.3,0P3F7.4,F7.2,2F6.2,F7.4,1P5E11.3,1PE12.4)
36 FORMAT(' KSTEP =',I5,3X,'TCV(1) =',1PE12.3,3x,'CSIL =',0PF8.4/)
44 FORMAT(' A COLLOID CLASS HAS DENUCLEATED. K, RADIUS, NUMBER, TOTAL M
 1ASS =',I5,1P3E12.4/)
100 FORMAT(1X,I5,1P9E13.4)
```

```
RETURN
END
```

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77

ANEXO

| | SUBROUTINE SILKIN(CSIL) |
|----|---|
| | LOGICAL LSKIP |
| | |
| | COMMON /CLVAR/ CLDV(1200) CLMV(300) CLNV(300) CLRV(600) NCLC DCSIL |
| | |
| | COMMON /CVRLS/ 11,114,0E10510,0E10510,0MR35,0E0,RE1010,RV10,51E10100 |
| | |
| | COMMON / NINCON/ HCIVIA, HCIVIA, HCIVIA, EPSIL, EPR, KROC, IIVIAA, KLIIVI, ICCL, KRIVIN |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | COMMON /SILBUF/ CSI,CSII |
| | |
| | COMMON /SILKF/ TOTFI, TOTF, PKF, KKF1, KKF2, ALPF, KATEKF, KATEKT, GF |
| | COMMON /SILKEC/ CKF1, IKF1, CKF2, IKF2 |
| | COMMON /SILKEN/RATEK,RCF,RDEPF,FKINL,CSILS,SRA,SRR,CLAST,AKIN,DKIN |
| | COMMON /SPECIN/ TSPEC, TEMP, TEMPL, FLASH, GLASH, FLC, FLCL |
| | COMMON /STEPS/KSTP,THL,DELTC,DELTH,LTH,LTD,LNSC |
| | COMMON /WATERE/ DENS,EPSD,ADH,BDH,PKW,TK,ALNT,TKB |
| | ALG10(X)=EXP(ALN10*X) |
| | TC=TEMP |
| | TK=TC+273.15 |
| | TKB=CKB*TK |
| | LSKIP=KRGC.EQ.1.OR.KRGC.EQ.3 |
| | IF(LNSC) LSKIP=.FALSE. |
| | IF(KRGC.EQ.1) LNSC=.FALSE. |
| | IF(LSKIP) GO TO 9 |
| | IF(TEMP.EQ.TEMPL) GO TO 13 |
| | ALNT=ALOG(TK) |
| | CALL WATER |
| | PKSIL=2.34669E3/TK+2.57979*ALNT-18.4014 |
| | PKSIL=-PKSIL+PKW |
| | AKSIL=ALG10(-PKSIL) |
| | PKF=-1.892+403.6/TK+0.012465*TK |
| | AKF=ALG10(-PKF) |
| | CSILL=-731./TK+1.52 |
| | CSILS=ALG10(CSILL) |
| | RATEKT=ALG10(AK-EK/TK) |
| | AKIN=ALG10(AKINC+AKINT/TK) |
| | DKIN=ALG10(DKINC+DKINT/TK) |
| | RKF1=ALG10(CKF1+TKF1/TK) |
| | RKF2=ALG10(CKF2+TKF2/TK) |
| | AKINP=AKIN**ALPHAK |
| 13 | CONTINUE |
| | IF(FLC.EQ.FLCL.AND.TEMP.EQ.TEMPL) GO TO 14 |
| | SI=SML |
| | SRSI=SQRT(SI) |
| | GSIL=ALG10(-ADH*SRSI/(1.+4.*BDH*SRSI)) |
| | GNA=ALG10(0.075*SI)*GSIL |
| | GF=-ADH*SRSI/(1.+3.*BDH*SRSI)+0.2*SI |
| | GF=ALG10(GF) |
| | ANA=GNA*SML |
| 14 | CONTINUE |

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77

А

IF(CSI.LE.0) ALPSIL=1./(1.+AH*GSIL/AKSIL) IF(CSI.LE.0) GO TO 1 ALPSIL=CSI/CSIL AH=AKSIL/GSIL*(1./ALPSIL-1.) PH=-ALOG10(AH) 1 CONTINUE ALPF=1./(1.+AH*GF/AKF) PHN=PH+ALOG10(ANA/0.069) CALL PHF RATEKF=TOTF*(RKF1*(1.-ALPF)+RKF2*ALPF) RATEK=RATEKT*(FPH+RATEKF) 9 CONTINUE SRA=CSIL/CSILS*(1.-ALPSIL) GAMZ=GAMC+GAMT*TC DGAMQ=-ALN10*DQS*TKB*FINT GAMMA=GAMZ+DGAMQ SCR=EXP(0.036031*PHI*SML) SRR=SRA*SCR SRRL=ALOG(SRR) SRAL=ALOG(SRA) FKINL=2.*GAMMA/(DENSN*TKB) IF(SRA.LT.AKIN) RCF=RATEK*EXP(ALPHAK*SRAL) IF(SRA.LT.AKIN) GO TO 7 RCFA=RATEK*AKINP DRCFA=RCFA*ALPHAK/AKIN DIF=SRA-AKIN RCF=DRCFA*DIF+RCFA 7 CONTINUE RDEPF=RCF*(1.-1./SRR) IF(SRR.LT.1.) RCF=0. IF(SRR.LT.1.) RDEPF=RATEK*DKIN*(SRR-1.) RCFN=RCF/UMASS IF(KRGC.GT.0) GO TO 15 IF(SRR.GT.1.) GO TO 2 RNUC=0. ANUC=0. ANNUC=0. ZLD=0. QT=0. RANUC=0. TAUC=0. RETURN 2 CONTINUE RNUC=FKINL/SRRL ANUC=4.*PI*RNUC*RNUC FNCAP=ANUC*GAMMA/3. QCAP=EXP(-FNCAP/TKB) ANNUC=PI4/3.*DENSN*RNUC**3 ZLD=3./(PI4*DENSN*ANNUC*ANNUC) ZLD=2./3.*EXP(ALOG(ZLD)/3.) ZLD=ZLD*SQRT(GAMMA/TKB) CN=RCFN*ANUC QT=QLP*QCAP

RETURN 15 CONTINUE

> CAREA=0. DO 4, K = 1,NCLC CR=CLRV(K)

K1=K+300 K2=K+600 FDRL=FKINL/CR CLD=RDEPF

RANUC=ZLD*QT*CN TAUC=1./(4.*CN*ZLD*ZLD)

KBASE=300*(KRGC-1) FCR=FLC/FLCL

IF(CR.EQ.0) GO TO 4

CLD=CLD*DELDENS CLDV(K+KBASE)=CLD CLN=CLNV(K)*FCR

CLRV(K1)=CR

CLNV(K)=CLN 4 CONTINUE

> RETURN END

10 CONTINUE

DELDENS=DELTC/DENSM

IF(FDRL.GT.SRRL) CLD=RATEK*DKIN*(SRR-EXP(FDRL))

DCSIL=DCSIL-PI4*CLN*CLD*DENSM*CR*CR

CAREA=CAREA+PI4*CLN*CR*CR IF(KRGC.NE.1) GO TO 10

CLRV(K)=CR+0.5*CLDV(K)

IF(KRGC.NE.4) GO TO 4

CLRV(K)=CLRV(K1)+SUM/6.

IF(KRGC.EQ.4) FLCL=FLC

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77

А

SUBROUTINE PHF COMMON /PH/ PH, PHL, PHN, PHNL, AH, FPH, FINT, DQS, DGAMQ, FF DATA PHL, PHNL/2*0./ ALG10(XX)=EXP(2.302585093*XX) IF(PHN.EQ.PHNL.AND.PH.EQ.PHL) RETURN PHL=PH PHNL=PHN Y=PH DO 3, K = 1,2 X=Y-7.6 IF(X.GT.1.12915) X=2.2583-X IF(X.GT.-1.63) GO TO 1 FPH=ALG10(X) FINT=ALOG10(1.+6.2*FPH)/6.2 FPH=FPH/(1+6.2*FPH) GO TO 4

IF(KRGC.EQ.2) CLRV(K)=CLRV(K1)+RK21*CLDV(K)+RK22*CLDV(K1) IF(KRGC.EQ.3) CLRV(K)=CLRV(K1)+RK31*CLDV(K1)+RK32*CLDV(K2)

SUM=CLDV(K)+RK41*CLDV(K1)+RK42*CLDV(K2)+CLDV(K+900)

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77

А

- 1 CONTINUE ARG=1.+ALG10(X/2.113) FPH=-X/(9.6538+X*(1.7901+4.1811*X)) FPH=X-2.113*ALOG10(ARG)+FPH FPH=ALG10(FPH) FINT=-0.75924+0.58993*X-0.11292*X*X FINT=ALG10(FINT) 4 CONTINUE
- IF(Y.LT.8.72915) GO TO 2 FPH=1.-FPH FINT=FINT+Y-8.72915
- 2 CONTINUE FPH=FPH/0.11891321 IF(K.GT.1) GO TO 3 FINTF=FINT FPHF=FPH Y=PHN

KK=6-K

3 CONTINUE FPH=FF*FPHF+(1.-FF)*FPH FINT=FF*FINTF+(1.-FF)*FINT RETURN END

SUBROUTINE WATER COMMON /WATERE/ DENS, EPSD, ADH, BDH, PKW, TK, ALNT, TKB DIMENSION ADV(6) PKW=94.9734*ALNT-0.097611*TK-606.522 PKW=PKW+(3.1286E4-2.17087E6/TK)/TK PKW=-PKW TC=TK-273.15 TCA=0.01*TC IF(TC.GT.150) GO TO 11 ADV(1)=0.9998396 ADV(2)=18.224944E-1 ADV(3)=-7.922210E-2 ADV(4)=-55.44846E-3 ADV(5)=149.7562E-4 ADV(6)=-393.2952E-5 BD=18.159725E-1 GO TO 13 11 CONTINUE ADV(1)=1.007708 ADV(2)=-1.52729E-2 ADV(3)=-4.33281E-2 ADV(4)=1.22917E-2 ADV(5)=-2.34375E-3 ADV(6)=2.6E-11 BD=0. 13 CONTINUE SUM=ADV(6) DO 14, K = 1,5

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77

А

| | SUM=ADV(KK)+SUM*TCA |
|----|------------------------------------|
| 14 | CONTINUE |
| | DENS=SUM/(1.+BD*TCA) |
| | IF(TC.GT.100) GO TO 15 |
| | SUM=9.398E-4-1.410E-6*TC |
| | SUM=-0.40008+SUM*TC |
| | EPSD=87.740+SUM*TC |
| | GO TO 16 |
| 15 | CONTINUE |
| | SUM=0.1417E-2-0.8292E-6*TK |
| | SUM=-0.9297+SUM*TK |
| | EPSD=5321./TK+233.76+SUM*TK |
| 16 | CONTINUE |
| | TEPSD=TK*EPSD |
| | SQRTE=SQRT(TEPSD) |
| | SQRDEN=SQRT(DENS) |
| | ADH=1.82483E6*SQRDEN/(TEPSD*SQRTE) |
| | BDH=50.2916*SQRDEN/SQRTE |
| | RETURN |
| | END |

SUBROUTINE SPECIFY

COMMON /CLVAR/ CLDV(1200),CLMV(300),CLNV(300),CLRV(600),NCLC,DCSIL COMMON /CVALS/ PI, PI4, DENSN, DENSM, UMASS, CKB, ALN10, AVN, SILMW COMMON /PH/ PH,PHL,PHN,PHNL,AH,FPH,FINT,DQS,DGAMQ,FF COMMON /SALT/ PHI,SML,SMLI,GNA,ANA,AKSIL,ALPSIL,SCR,GSIL,GH COMMON /SILBUF/ CSI,CSII COMMON /SILKF/ TOTFI, TOTF, PKF, RKF1, RKF2, ALPF, RATEKF, RATEKT, GF COMMON /SPECIN/ TSPEC, TEMP, TEMPL, FLASH, GLASH, FLC, FLCL COMMON /SPECPAR/ NREF, ICALL, 11, 12, T1, T2 COMMON /SPECS/ TREFV(50), FLASHRV(50), TEMPRV(50), PHRV(50) COMMON /START/ SILIN, SILOUT, ICX, INX, TSTART, TAUCS ALG10(X)=EXP(ALN10*X) ICALL=ICALL+1 IF(SMLI.GT.0.) GO TO 7 SMLI=-SMLI SMLR=SMLI DO 8, K = 1,3 PHIVL=(16.40+2.153*SQRT(SMLI))*0.001 CRF=1.003/(1.-PHIVL*SMLR) SMLI=SMLR*CRF 8 CONTINUE SILIN=SILIN*CRF SILOUT=SILOUT*CRF CSII=CSII*CRF TOTFI=TOTFI*CRF IF(NCLC.EQ.0) GO TO 7 DO 2, K = 1,NCLC CLNV(K)=CLNV(K)*CRF 2 CONTINUE

7 CONTINUE IF(NREF.GT.1) GO TO 6

IF(ICALL.GT.2) RETURN IF(ICALL.EQ.1) GO TO 4

TEMPL=TEMP RETURN 4 CONTINUE

GLASH=0.

FLCL=FLC SML=SMLI*FLC TOTF=TOTFI*FLC CSI=CSII*FLC AH=ALG10(-PH) RETURN 6 CONTINUE

TEMP=TEMPRV(1) TEMPL=-1000. PH=PHRV(1) FLASH=FLASHRV(1)

FLC=1./(1.-FLASH)

IF(ICALL.GT.1) GO TO 9

IF(TSPEC.LT.T2) GO TO 3

TFAC=(TSPEC-T1)/(T2-T1)

FLC=1./(1.-FLASH) GLASH=GLASH*FLC SML=SMLI*FLC TOTF=TOTFI*FLC CSI=CSII*FLC AH=ALG10(-PH) RETURN END

TEMP=TEMPRV(I1)+(TEMPRV(I2)-TEMPRV(I1))*TFAC

FLASH=FLASHRV(I1)+(FLASHRV(I2)-FLASHRV(I1))*TFAC

PH=PHRV(I1)+(PHRV(I2)-PHRV(I1))*TFAC

GLASH=(FLASHRV(I2)-FLASHRV(I1))/(T2-T1)

TEMP=-1000.

11=0 12=1 T2=-1E10 FLCL=1. 9 CONTINUE 1 CONTINUE

11=11+1 12=12+1 T1=TREFV(I1) T2=TREFV(I2) GO TO 1 **3 CONTINUE** TEMPL=TEMP CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77

А

SUBROUTINE OUTPUT LOGICAL LTH, LTD, LNSC COMMON /CALCSIL/ CSILV(3),CFIM(3,3),TCV(3),CSFV(3) COMMON /CLVAR/ CLDV(1200),CLMV(300),CLNV(300),CLRV(600),NCLC,DCSIL COMMON /CVALS/ PI, PI4, DENSN, DENSM, UMASS, CKB, ALN10, AVN, SILMW COMMON /GAMMA/ GAMC,GAMT,GAMZ,GAMMA,CAREA COMMON /KINCON/ HCMA,HCMI,TCMA,EPSIL,EPR,KRGC,IMAX,RLIM,ICCL,RRMN COMMON /NUCL/ FNCAP,ZLD,CN,QCAP,QT,RNUC,ANNUC,TAUC,RANUC,QLP COMMON /PH/ PH, PHL, PHN, PHNL, AH, FPH, FINT, DQS, DGAMQ, FF COMMON /PRINOUT/ NDP, DTP, TPN, KPN, IPR, IPR2, TCP, CLP, KLP, CDP, KDP COMMON /SALT/ PHI,SML,SMLI,GNA,ANA,AKSIL,ALPSIL,SCR,GSIL,GH COMMON /SILBUF/ CSI,CSII COMMON /SILKF/ TOTFI, TOTF, PKF, RKF1, RKF2, ALPF, RATEKF, RATEKT, GF COMMON /SILKEN/RATEK,RCF,RDEPF,FKINL,CSILS,SRA,SRR,CLAST,AKIN,DKIN COMMON /SPECIN/ TSPEC, TEMP, TEMPL, FLASH, GLASH, FLC, FLCL COMMON /START/ SILIN, SILOUT, ICX, INX, TSTART, TAUCS COMMON /STEPS/KSTP,THL,DELTC,DELTH,LTH,LTD,LNSC COMMON /WATERE/ DENS, EPSD, ADH, BDH, PKW, TK, ALNT, TKB TSPEC=TCV(1) KPN=KSTP+NDP TPN=TSPEC+DTP CALL SPECIFY CSIL=CSILV(1) KRGC=0 CALL SILKIN(CSIL) PRINT 100 PKSIL=-ALOG10(AKSIL) PRINT 2,KSTP,TSPEC,TEMP,PH,FLASH,GLASH,CSIL,FLC PRINT 22, SML, SCR, ANA, PHN, FPH, FINT PRINT 3, GAMZ, GAMMA, DQS, AKIN, DKIN PRINT 23, TOTF, ALPF, RKF1, RKF2, RATEKF, RATEKT PRINT 24, PKW, PKSIL, PKF, GSIL, GF, GNA, EPSD, DENS, ADH, BDH PRINT 4, CSILS, ALPSIL, CSI, SRA, SRR, RATEK, RDEPF, FKINL PRINT 5, RNUC, ANNUC, ZLD, CN, QLP, QT, RANUC, TAUC IF(ICX.EQ.0) GO TO 1 SUMN=0. SUMR=0. CAREA=0. AMC=0. DO 13 K=1,NCLC CR=CLRV(K) CLN=CLNV(K) SUMN=SUMN+CLN SUMR=SUMR+CLN*CR CAREA=CAREA+PI4*CR*CR*CLN AMC=AMC+CLMV(K) 13 CONTINUE RCAV=SUMR/SUMN ACAV=CAREA/SUMN CMAV=AMC/SUMN AMT=SILIN*FLC AMTC=CSIL+AMC DELM=AMTC-AMT

```
ANEXO CODI
```

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO EN FORTRAN 77

А

```
PRINT 14, NCLC, SUMN, CAREA, RCAV, ACAV, CMAV
   DELM=DELM/AMT*100
   PRINT 21, AMC, CSIL, AMTC, AMT, DELM
   PRINT 16, (CLNV(K), K=1, NCLC)
   PRINT 12
   PRINT 17,(CLRV(K),K=1,NCLC)
   PRINT 12
   PRINT 18,(CLMV(K),K=1,NCLC)
   PRINT 12
1 CONTINUE
   PRINT 100
  2 FORMAT(' KSTEP =', I5, 3X, 'TSPEC, TEMP, PH =', 1PE12.4, 0PF8.2, F7.2, 2X,/
  1 ' FLASH,GLASH =',F8.4,1PE12.4,3X,'CSIL =',0PF8.4,3X,'FLC =',
  2 F8.4/)
  3 FORMAT(' GAMZ, GAMMA =', 2F6.2, 2X, 'DQS =', 1PE10.3, 2X, 'AKIN, DKIN =',
  1 OP2F7.3/)
  4 FORMAT(' CSILS, ALPSIL, CSI =', 3F7.4, 2X, 'SRA, SRR =', 2F8.4, 2X, /
  1 ' RATEK, RDEPF =', 1P2E12.4, 3X, 'FKINL =', 1PE12.4/)
 5 FORMAT(' RNUC, ANNUC =', 1P2E10.3, 2X, 'ZLD, CN =', 1P2E10.3, 2X, /
  1 'QLP,QT =',1P2E10.3,2X,'RANUC =',1PE10.3,2X,'TAUC =',1PE10.3/)
 12 FORMAT(/)
 14 FORMAT(' NCLC =',I5,' TOTAL NO.,AREA =',1P2E11.4,/
  1 'AVER.RAD., AREA, MASS =', 1P3E12.4/)
 16 FORMAT(' NUMBER OF PARTICLES IN EACH CLASS'//30(1X,1P10E13.5/))
 17 FORMAT(' PARTICLE RADII'//30(1X,1P10E13.5/))
 18 FORMAT(' TOTAL MASS IN EACH CLASS'//30(1X,1P10E13.5/))
 21 FORMAT(' COLL.MASS,DIS.SIL. =',2F8.4,3X,'SUM =',F8.4,3X,/
  1 ' SHOULD BE =',F8.4,3X,'PERCENT DIF. =',F8.4/)
 22 FORMAT(' SALT MOLALITY, SOL.CORR.FACTOR =',1PE12.4,0PF8.4,3X,
  1 'SOD. ACT. =',1PE13.4,2X,'PHN,FPH,FINT =',0P3F8.4/)
 23 FORMAT(' TOTF, ALPF =', 1PE10.3, 0PF8.4, 2X, 'RKF1, RKF2 =', 1P2E10.3,
  1 2X,/' RATEKF,RATEKT =',1P2E10.3/)
 24 FORMAT(' PKW, PKSIL, PKF =', 3F7.3, 2X, 'GSIL, GF, GNA =', 3F7.4, 2X, /
  1 ' EPSD, DENS =', F6.2, F7.4, 2X, 'ADH, BDH =', 2F7.4/)
 100 FORMAT(//1X,26('#####')//)
   RETURN
   END
```
| ANEXO CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLA | Β7 |
|---|----|
|---|----|

E

| %Programa de simulacion de nucleación de silice en salmueras geotermicas |
|--|
| doar all |
| |
| |
| format long |
| 0/************************************ |
| % / |
| |
| %DATOS DE ENTRADA |
| 70 0/*********************************** |
| %Valores globales de la iteración |
| %Constantes Fisicas v Matematicas |
| PI=3.14159265359: |
| CKB=1.38054e-16; |
| AVN=6.02252e23: |
| SILMW=60.085: |
| VMOLE=27.2; |
| RK21=0; |
| RK22=0.5; |
| RK31=0; |
| RK32=1; |
| RK41=2; |
| RK42=2; |
| GAMC=50.30; |
| GAMT=-0.049; |
| DQS=6.84e14; |
| FF=0.45; |
| QLP=3.34e25; |
| ALPHAK=5; |
| EK=4296.6; |
| AK=3.1171; |
| AKINC=0.0977; |
| AKINT=75.84; |
| DKINC=0; |
| DKINT=0; |
| CKF1=-11.723; |
| TKF1=4039; |
| CKF2=-2.647; |
| TKF2=1183; |
| %VARIABLES DE CONTROL PREEESTABLECIDAS |
| EPSIL=0.02; |
| EPR=0.02; |
| RRMN=0.001; |
| %VALORES PREDETERMINADOS PARA LAS VARIABLES DE ENTRADA |
| IPR=3; |
| IPR2=3; |
| KDP=10; |
| NDP=50; |
| IMAX=1000; |
| PHI=0.92; |
| SIVILI=U.U88; |
| ICP=1010; |

в

ANEXO CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7

DDH=64;

CDP=0.001; DHCMA=4; DHCMI=2048; TMAXM=64; %------UMASS=SILMW/AVN; DENSN=AVN/VMOLE; DENSM=DENSN*UMASS; PI4=4*PI; ALN10=log(10); %Seleccion de Lectura de datos en interfaz o manual sldiom=input('Seleccione forma de Lectura de datos en interfaz o manual(previo ingreso de datos al codigo) [0=interfaz / 1=manual]= '); if eq(sldiom,0) %Numero de problemas a resolver NRUN=input('Ingrese el Numero de problemas = '); $fprintf('\n')$ for i=1:NRUN fprintf('Ingreso de datos Pozo %d',i) $fprintf('\n')$ $fprintf('\n')$ NREF=input('Ingrese el numero de valores de base de tiempo con los cuales \n se interpolara la temperatura y la fraccion de agua perdida por flasheo = '); $fprintf('\n')$ NCLC=input('Ingrese el numero de clases de coloides inicialmente presentes = '); fprintf('\n') INX=input('Determine si ocurre o no nucleacion homogenea (0=NO/1=SI) = '); fprintf('\n') IPRI=input('Determine el nivel de la salida impresa generada n(>1 o preferentemenete dejar en blancopara asignar un valor predeterminado) = '); $fprintf('\n')$ IPRI2=input('Determine el valor al cual el nivel de la salida impresa \n generada se iguala (>1 o preferentemenete dejar en blanco para asignar un valor predeterminado) = '); fprintf('\n') KDPI=input('Determine el numero de etapas de deposicion molecular entre \n las lineas de salida generadas por el programa \n (>1 o preferentemente dejar en blanco para asignar un valor predeterminado) = '); fprintf('\n') NDPI=input('Determine el numero-frecuencias de las llamadas a la subrutina \n OUTPUT generadas por el programa \n (>1 o preferentemente dejar en blanco para asignar un valor predeterminado) = '); $fprintf('\n')$ ITPM=input('Determine un numero adicional para el numero-frecuencias de \n las llamadas a la subrutina OUTPUT generadas por el programa \n (>1 o preferentemente dejar en blanco para asignar un valor predeterminado) = '); $fprintf('\n')$ IMAXI=input('Determine el numero maximo de pasos de deposicion molecular \n permitidos \n (>1 o preferentemente dejar en blanco para asignar un valor predeterminado de 1000) = '); fprintf('\n') IHCMA=input('Oprima enter para continuar'); $fprintf('\n')$ IHCMI=input('Oprima enter para continuar'); fprintf('\n')

```
IDH=input('Oprima enter para continuar');
    fprintf('\n')
    IMAXM=input('Oprima enter para continuar');
    fprintf('\n')
    fprintf('\n')
    %-----
    ICX=1;
    if ne(IPRI,0)
      IPR=IPRI;
    end
    if ne(IPRI2,0)
      IPR2=IPRI2;
    end
    if gt(KDPI,0)
      KDP=KDPI;
    end
    if gt(NDPI,0)
      NDP=NDPI;
    end
    %-----
    DTPM=2^ITPM;
    %-----
    if gt(IMAXI,0)
      IMAX=IMAXI;
    else
    IMAXI=0;
    end
    if gt(IHCMA,0)
      DHCMA=2^IHCMA;
    else
    IHCMA=0;
    end
    if gt(IHCMI,0)
      DHCMI=2^IHCMI;
    else
    IHCMI=0;
    end
    if gt(IDH,0)
      DDH=2^IDH;
    else
    IDH=0;
    end
    if gt(IMAXM,0)
      TMAXM=2^IMAXM;
    else
    IMAXM=0;
    end
    %IMPRESION VARIABLES DE ENTRADA TARJETAS 1 Y 2
    fprintf('NREF = %3d \t\t NCLC = %4d \t INX = %3d \t\t IPR = %3d \t\t\t IPR2 = %3d
\n',NREF,NCLC,INX,IPR,IPR2)
    fprintf('KDP = %4d \t\ NDP = %4d \t ITPM = %3d \t IMAX = %5d \t\t IHCMA = %3d \t
\n',KDP,NDP,ITPM,IMAX,IHCMA)
```

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS

| | HOMOGENEA F DEPOSICION MOLECULAR DE SILICE EN SISTEMAS GEOTERMICOS |
|-----------------|---|
| NEXO | CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7 B |
| fprintf('IHC | MI = %3d \t IDH = %3d \t\t IMAXM = %3d \t DTPM = %11.3E \t DHCMA = %11.3E |
| ',IHCMI,IDH,II | MAXM,DTPM,DHCMA) |
| fprintf('DH0 | CMI = %11.3E \t\t DDH = %11.3E \t\t\t\t\t\t TMAXM = %11.3E \n',DHCMI,DDH,TMAXM) |
| fprintf('\n') | |
| fprintf('\n') | |
| %DATOS DI | E LA CONCENTRACION INICIAL DE LA SALMUERA |
| SILIN=input | ('Ingrese el valor de la concentracion inicial total de silice disuelta en g/Kg H2O = '); |
| fprintf('\n') | |
| SILOUT=inp | ut ('Ingrese el valor de la concentracion de silice final con la cual desee terminar los calculos |
| Kg = '); | |
| fprintf('\n') | |
| PHIIN=inpu | t('Ingrese el valor de el coeficiente osmotico practico mol/Kg \n(puede dejar este campo |
| ore y se asigna | ra el valor predeterminado de 0.92 \n el cual funciona bastante bien para la mayoria de los |
| sos) = '); | |
| fprintf('\n') | |
| SMLIIN=inp | ut('Ingrese el valor de la concentracion inicial de NaCl en mol/Kg = '); |
| fprintf('\n') | |
| TOTFI=inpu | t('Ingrese el valor de la concentracion inicial Fluor mol/Kg = '); |
| fprintf('\n') | |
| CSII=input(| Ingrese el valor de la concentracion inicial de silice disuelta presente en forma ionica en g/Kg |
| '); | |
| fprintf('\n') | |
| TCPI=input | ('Oprima enter para continuar'); |
| fprintf('\n') | |
| CDPI=input | ('Oprima enter para continuar'); |
| fprintf('\n') | |
| fprintf('\n') | |
| if ne(PHIIN. | 0) |
| PHI=PHII | N: |
| end | , |
| if ne(SMLIII | ۷,0) |
| SMLI=SM | ILIIN: |
| end | , , |
| if gt(TCPI.0) | |
| TCP=TCP | : |
| end | |
| if gt(CDPI,0 | |
| CDP=CDF | / //; |
| end | |
| %IMPRESIC | N VARIABLES DE ENTRADA TARJETA 3 |
| fprintf('SILI | N = %8.4f \t\t SILOUT = %8.4f \t PHI = %8.4f \t\t SMLI = %12.4E\n',SILIN,SILOUT,PHI,SMLI) |
| fprintf('TOT | FI = %12.4E \t CSII = %8.4f \t TCP = %12.4E \t CDP = %8.4f\n',TOTFI,CSII,TCP,CDP) |
| fprintf('\n') | |
| fprintf('\n') | |
| % | |
| if gt(CSII,0) | |
| fprintf(' | MONOSILICIC ACID BUFFERING IS ASSUMED\n') |
| end | |
| fprintf('\n') | |
| fprintf('\n') | |
| % | |
| for k=1:NR | :F |
| | |

fprintf('Ingrese el valor %i de tiempo en minutos en sistema decimal con el cual \n se interpolara la

ANEXO CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7

```
В
```

temperatura y la fraccion de agua perdida por flasheo',k) TREFV(k)=input(' = '); fprintf('\n') MATPLOT(k,1)=TREFV(k); dat(k,1)={TREFV(k)}; fprintf('Ingrese el valor %i de la fraccion de agua perdida por flasheo en el tiempo %i',k,k) FLASHRV(k)=input(' = '); fprintf('\n') MATPLOT(k,2)=FLASHRV(k); dat(k,2)={FLASHRV(k)}; fprintf('Ingrese el valor %i de la temperatura correspondiente al tiempo %i en ºC',k,k) TEMPRV(k)=input(' = '); fprintf('\n') MATPLOT(k,3)=TEMPRV(k); dat(k,3)={TEMPRV(k)}; fprintf('Ingrese el valor %i de pH correspondiente al tiempo %i',k,k) PHRV(k)=input(' = '); fprintf('\n') MATPLOT(k,4)=PHRV(k); dat(k,4)={PHRV(k)}; fprintf('*********** end MaTPlot=[TREFV; FLASHRV; TEMPRV; PHRV]; dat; %IMPRESION EN PANTALLA MatPlot=fopen('matplot.txt','w'); fprintf(MatPlot,'%9s %10s %8s %8s\n','TREF','FLASH','TEMP','PH'); fprintf(MatPlot,'%10.4f %10.4f %10.4f %10.4f\n',MaTPlot); fclose(MatPlot); type matplot.txt ***************************/n') %CREACION DE TABLA COMO FIGURA f = figure('Position', [100 100 752 350]); t = uitable('Parent', f, 'Position', [25 25 700 200]); set(f,'Name','Tabla 1') set(f,'NumberTitle','off') cnames = {'TREF', 'FLASH', 'TEMP', 'PH'}; set(t,'ColumnName',cnames) set(t,'Data',dat) %-----%Calculo de temperaturas geoquimicas para cada pozo TSTART=TREFV(1); KSTP=0; if gt(NCLC,0)

for k=1:NCLC K(k)=k;

```
ANEXO CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7
```

```
в
```

```
MATPLOT1(k,1)=K(k);
       dat1(k,1)={K(k)};
       fprintf('Ingrese el radio de las particulas del coloide de la clase numero %i en nm',k)
       CLR(k)=input(' = ');
       CLR(k)=CLR(k)*1e-7;
       CLRV(k)=CLR(k);
       fprintf('\n')
       MATPLOT1(k,2)=CLR(k);
       dat1(k,2)={CLR(k)};
       PM=PI4/3*DENSM*CLR(k)^3;
       fprintf('Ingrese la cantidad de silice del coloide de la clase numero %i en g SiO2/kg H2O',k)
       CLM(k)=input(' = ');
       CLMV(k)=CLM(k);
       MATPLOT1(k,3)=CLM(k);
       dat1(k,3)={CLM(k)};
       CLNV(k)=CLM(k)/PM;
       MATPLOT1(k,4)=CLNV(k);
       dat1(k,4)={CLNV(k)};
       fprintf('\n')
                       *****
fprintf('********
*************************************/n')
end
     MaTPlot1=[K; CLR; CLM; CLNV];
     dat1;
     %IMPRESION EN PANTALLA
     MatPlot1=fopen('matplot1.txt','w');
     fprintf(MatPlot1,'%5s %11s %9s %11s\n','K','RADIO','MASA','NUMERO');
     fprintf(MatPlot1,'%5d %12.4E %12.4E %12.4E\n',MaTPlot1);
     fclose(MatPlot1);
     type matplot1.txt
fprintf('**
                                   *****************
               ************\n')
                                %CREACION DE TABLA COMO FIGURA
     f = figure('Position', [100 100 752 350]);
     t = uitable('Parent', f, 'Position', [25 25 700 200]);
     set(f,'Name','Tabla 2')
     set(f,'NumberTitle','off')
     cnames = {'K', 'RADIO', 'MASA', 'NUMERO DE PARTICULAS'};
     set(t,'ColumnName',cnames)
     set(t,'Data',dat1)
   end
   %CALL setup(ibort)
[RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICCL,CAREA,KLP,DCSIL,THL,ALPF,RKF1,RKF2,RATE
KF,RATEKT,SRA,ALPSIL,GNA,GF,GSIL,PKF,AKIN,DKIN,GAMZ,ANA,SCR,AKSIL,PHN,TK,ALNT,CLN,RANUC,FPH,FIN
T,TC,PKW,ADH,BDH,EPSD,DENS,FLASH,GLASH,PH,AH,TOTF,CSI,SML,FLCL,SILOUT,RATEK,FKINL,CN,GAMMA,T
EMP,TAUC,ANNUC,T1,CSILS,CSIL,RDEPF,T2,SRR,RNUC,QT,ZLD,FLC,TEMPL,IBORT,DELTH,TCV,AN,TSTART,TAU
CS,NCLC,CSILV,CFIM,DELTC,HCMA,TCMA,KPN,TPN,ICALL,CLNV,TSPEC,KRGC,CLRV,RLIM,CLP,DTP,SILIN,CLMV]
```

=SETUP(RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,UMASS,PHI,DQS,GAMT,GAMC,ALPHAK,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,DKI NT,DKINC,AKINT,AKINC,EK,AK,FF,FLASHRV,PHRV,TEMPRV,TOTFI,CSII,SILOUT,SMLI,TSTART,PI,DENSN,SILIN,IN

в

X,NREF,TREFV,NCLC,CLRV,DHCMA,DHCMI,DTPM,TMAXM,PI4,DENSM,CKB,ALN10,DDH,CLNV,NDP,QLP,CLMV)

if le(IBORT,0)

;

%CALL master

[PHL,PHNL,CN,FKINL,RATEK,SRA,ALPSIL,GNA,GF,GSIL,PKF,DKIN,AKIN,GAMZ,ANA,SCR,AKSIL,PH,PHN,TK,ALNT, CLN,RANUC,GAMMA,TAUC,ANNUC,CSILS,RDEPF,SRR,RNUC,QT,ZLD,FPH,FINT,TC,PKW,ADH,BDH,EPSD,DENS,S ILIN,FLC,T2,T1,TEMP,SILOUT,TEMPL,FLCL,SML,CSI,TOTF,AH,GLASH,FLASH,KPN,TPN,PKSIL,dat2,MaTPlot3,PKS TEP,PTIME,PCSIL,PSRR,PFLC,PTEMP,PPH,PPHN,PFPH,PRDEPF,PNUCRATE,PCAREA,PNUCFLUX,PDEPRATE,PALP SIL,CSFV,ILOSS,TCV,CFIM,LTD,LTH,CLM,TSPEC,KRGC,LNSC,CSIL,DELTC,CLRV,KSTP,CSILV,IPR,CLNV,NCLC,CLMV]=MASTER(CLMV,CN,FKINL,RATEK,SRA,ALPSIL,BDH,ADH,DENS,EPSD,GNA,GF,GSIL,PKF,PKW,RATEKT,RATEKF, RKF1,RKF2,ALPF,DKIN,AKIN,GAMZ,FINT,FPH,PHN,ANA,SCR,FLASH,PH,AKSIL,DTP,TSPEC,QLP,CLP,RLIM,EPSIL,G LASH,AH,TOTF,CSI,SML,ICALL,UMASS,TEMPRV,TOTFI,KSTP,CSII,PHRV,FLASHRV,FF,TEMPL,EK,AK,AKINC,AKINT ,DKINC,DKINT,TKF2,CKF2,TKF1,CKF1,ALPHAK,GAMC,GAMT,DQS,PHI,RK41,RK42,RK31,RK32,RK21,RK22,TMAX M, DTPM, DHCMI, DHCMA, CLRV, TREFV, NREF, SILIN, PI, SMLI, IMAX, INX, RDEPF, ANNUC, DDH, THL, DELTH, T2, SRR, F LC,FLCL,ALN10,CKB,CSIL,T1,GAMMA,TEMP,KRGC,NDP,CLNV,CSILS,TCV,TAUC,IPR,ZLD,QT,RNUC,PI4,DENSN,A N,TSTART,TAUCS,RANUC,RRMN,NCLC,CLR,CLN,CSILV,CFIM,DENSM,CLM,DELTC,HCMA,SILOUT,TCMA,ICX,IPR 2,KPN,TPN,TCP,DCSIL,TC,TK,ALNT,EPR,CDP,KLP,KDP,CAREA,ICCL,I1,I2,PHL,PHNL,AKF,AKINP,LNSC,CLDV,RCF);

end

%IMPRESION EN PANTALLA DE TABLA

MatPlot3=fopen('matplot3.txt','w');

fprintf(MatPlot3, '%5s %7s %8s %6s %6s %6s %5s %6s %5s %9s %11s %9s %11s %11s %9s\n','KSTEP','TIME','CSIL','SRR','FLC','TEMP','PH','PHN','FPH','RDEPF','NUC. RATE','CAREA','NUC.

FLUX', 'DEP. RATE', 'ALPSIL');

fprintf(MatPlot3,'%5d %11.3E %7.4f %7.4f %7.4f %7.2f %6.2f %6.2f %7.4f %11.3E %11.3E %11.3E

%11.3E %11.3E %12.4E\n',MaTPlot3);

fclose(MatPlot3); type matplot3.txt %CREACION DE TABLA COMO FIGURA f = figure('Position', [100 100 752 350]); t = uitable('Parent', f, 'Position', [25 25 700 200]); set(f,'Name','Tabla 3') set(f,'NumberTitle','off') cnames = {'KSTEP','TIME','CSIL','SRR','FLC','TEMP','PH','PHN','FPH','RDEPF','NUC.

RATE', 'CAREA', 'NUC. FLUX', 'DEP. RATE', 'ALPSIL'};

set(t,'ColumnName',cnames)

set(t,'Data',dat2)

%%%%%%%%%%%%%%%%CREACION DE

f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 1') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP, PTIME) title('PASO VS TIEMPO') xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION TIEMPO') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 2') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP, PCSIL) title('PASO VS CONCENTRACION DE SILICE DISUELTA')

в

xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION CONCENTRACION DE SILICE DISUELTA') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 3') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP, PSRR) title('PASO VS TASA DE SATURACION Y SOLUBILIDAD DE SA') xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION TASA DE SATURACION Y SOLUBILIDAD DE SILICE AMORFA') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 4') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP, PFLC) title('PASO VS FACTOR DE CONCENTRACION POR FLASHEO') xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION FACTOR DE CONCENTRACION POR FLASHEO') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 5') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP, PTEMP) title('PASO VS TEMPERATURA') xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION TEMPERATURA') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 6') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP, PPH) title('PASO VS pH') xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION pH') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 7') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP, PPHN) title('PASO VS pH NOMINAL') xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION pH NOMINAL') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 8') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP, PFPH)

в

title('PASO VS F(pH,pHnom)') xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION FUNCION F(pH,pHnom)') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 9') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP,PRDEPF) title('PASO VS TASA DE DEPOSICION MOLECULAR') xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION TASA DE DEPOSICION MOLECULAR') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 10') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP, PNUCRATE) title('PASO VS TASA DE NUCLEACION') xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION TASA DE NUCLEACION') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 11') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP,PCAREA) title('PASO VS AREA SUPERFICIAL DE SC') xlabel('Numero de Paso') vlabel('Valores') legend('EVOLUCION AREA SUPERFICIAL DE LA SILICE COLOIDAL') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 12') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP, PNUCFLUX) title('PASO VS TASA DE CONVERSION DE SD A SC POR NUCLEACION DE NUEVAS PARTICULAS') xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION TASA DE CONVERSION DE SD A SC POR NUCLEACION DE NUEVAS PARTICULAS') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 13') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP, PDEPRATE) title('PASO VS TASA DE DEPOSICION') xlabel('Numero de Paso') vlabel('Valores') legend('EVOLUCION TASA DE DEPOSICION') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 14') set(f,'NumberTitle','off')

В

```
plot(PKSTEP, PALPSIL)
        title('PASO VS FRACCION DE SILICE MONOMERICA EN FORMA IONICA')
        xlabel('Numero de Paso')
        ylabel('Valores')
        legend('EVOLUCION FRACCION DE SILICE MONOMERICA EN FORMA IONICA')
  end
else
  %Ingresar Numero de problemas a resolver
  NRUN=1;
  for i=1:NRUN
    %Ingreso de datos Pozo
    %Ingrese el numero de valores de base de tiempo con los cuales \n se interpolara la temperatura y la
fraccion de agua perdida por flasheo
    NREF=13;
    %Ingrese el numero de clases de coloides inicialmente presentes
    NCLC=2;
    %Determine si ocurre o no nucleacion homogenea (0=NO/1=SI)
    INX=1:
    %Determine el nivel de la salida impresa generada \n(>1 o
    %preferentemenete dejar en cero "0" para asignar un valor predeterminado)
    IPRI=0:
    %Determine el valor al cual el nivel de la salida impresa
    %generada se iguala (>1 o preferentemenete dejar en cero "0"
    %para asignar un valor predeterminado)
    IPRI2=0;
    %Determine el numero de etapas de deposicion molecular entre \n las
    %lineas de salida generadas por el programa \n (>1 o preferentemente
    %dejar en cero "0" para asignar un valor predeterminado)
    KDPI=0:
    %Determine el numero-frecuencias de las llamadas a la subrutina \n
    %OUTPUT generadas por el programa \n (>1 o preferentemente dejar en
    %cero "0" para asignar un valor predeterminado)
    NDPI=0;
    %Determine un numero adicional para el numero-frecuencias de \n las
    %llamadas a la subrutina OUTPUT generadas por el programa \n (>1 o
    %preferentemente dejar en cero "0" para asignar un valor predeterminado)
    ITPM=0;
    %Determine el numero maximo de pasos de deposicion molecular \n
    %permitidos \n (>1 o preferentemente dejar en cero "0" para asignar
    %un valor predeterminado de 1000)
    IMAXI=0;
    %
    IHCMA=0;
    %
    IHCMI=0;
    %
    IDH=0;
    %
    IMAXM=0;
    %----
    ICX=1;
    if ne(IPRI,0)
      IPR=IPRI;
```

```
CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7
ANEXO
    end
    if ne(IPRI2,0)
      IPR2=IPRI2;
    end
    if gt(KDPI,0)
      KDP=KDPI;
    end
    if gt(NDPI,0)
      NDP=NDPI;
    end
    %--
        _____
    DTPM=2^ITPM;
    %-----
    if gt(IMAXI,0)
      IMAX=IMAXI;
    else
    IMAXI=0;
    end
    if gt(IHCMA,0)
      DHCMA=2^IHCMA;
    else
    IHCMA=0;
    end
    if gt(IHCMI,0)
      DHCMI=2^IHCMI;
    else
    IHCMI=0;
    end
    if gt(IDH,0)
      DDH=2^IDH;
    else
    IDH=0;
    end
    if gt(IMAXM,0)
      TMAXM=2^IMAXM;
    else
    IMAXM=0;
    end
    %IMPRESION VARIABLES DE ENTRADA TARJETAS 1 Y 2
    fprintf('NREF = %3d \t\t NCLC = %4d \t INX = %3d \t\t IPR = %3d \t\t\t\t IPR2 = %3d
\n',NREF,NCLC,INX,IPR,IPR2)
    fprintf('KDP = %4d \t\t NDP = %4d \t ITPM = %3d \t IMAX = %5d \t\t\t IHCMA = %3d \t
\n',KDP,NDP,ITPM,IMAX,IHCMA)
    fprintf('IHCMI = %3d \t IDH = %3d \t\t IMAXM = %3d \t DTPM = %11.3E \t DHCMA = %11.3E
\n',IHCMI,IDH,IMAXM,DTPM,DHCMA)
    fprintf('DHCMI = %11.3E \t\t\ DDH = %11.3E \t\t\t\t\t\t\t\t\TMAXM = %11.3E \n',DHCMI,DDH,TMAXM)
    fprintf('\n')
    fprintf('\n')
    %DATOS DE LA CONCENTRACION INICIAL DE LA SALMUERA
    %Ingrese el valor de la concentracion inicial total de silice
    %disuelta en g/Kg H2O
    SILIN=0.597;
    %Ingrese el valor de la concentracion de silice final con la cual
```

ANEXO

```
В
```

```
%desee terminar los calculos g/Kg
SILOUT=0.25;
%Ingrese el valor de el coeficiente osmotico practico mol/Kg
%\n(puede dejar este campo libre y se asignara el valor predeterminado de 0.92
%el cual funciona bastante bien para la mayoria de los casos)
PHIIN=0:
%Ingrese el valor de la concentracion inicial de NaCl en mol/Kg
SMLIIN=0.18;
%Ingrese el valor de la concentracion inicial Fluor mol/Kg
TOTFI=0.0006;
%Ingrese el valor de la concentracion inicial de silice disuelta
%presente en forma ionica en g/Kg
CSII=0.0075;
%
TCPI=0;
%
CDPI=0;
%
%-----
if ne(PHIIN,0)
  PHI=PHIIN;
end
if ne(SMLIIN,0)
  SMLI=SMLIIN;
end
if gt(TCPI,0)
 TCP=TCPI;
end
if gt(CDPI,0)
  CDP=CDPI;
end
%IMPRESION VARIABLES DE ENTRADA TARJETA 3
fprintf('SILIN = %8.4f \t\t SILOUT = %8.4f \t PHI = %8.4f \t\t SMLI = %12.4E\n',SILIN,SILOUT,PHI,SMLI)
fprintf('TOTFI = %12.4E \t CSII = %8.4f \t TCP = %12.4E \t CDP = %8.4f\n',TOTFI,CSII,TCP,CDP)
fprintf('\n')
fprintf('\n')
%-----
if gt(CSII,0)
  fprintf('-----MONOSILICIC ACID BUFFERING IS ASSUMED------\n')
end
fprintf('\n')
fprintf('\n')
%-----
  %Ingrese los valores de tiempo en minutos en sistema decimal con los cuales
  %se interpolara la temperatura y la fraccion de agua perdida por flasheo
  TREFV=[0 0.25 0.50 0.75 1.0 1.50 1.75 2.25 2.75 12.75 17.75 27.75 77.75];
  %
  %Ingrese los valores de la fraccion de agua perdida por flasheo
  %con respecto del tiempo
  FLASHRV=[0 0.085 0.151 0.206 0.254 0.297 0.337 0.387 0.410 0.410 0.410 0.410 0.410];
  %
  %Ingrese los valores de la temperatura correspondiente a cada
  %punto de tiempo en ºC
```

```
в
ANEXO
              CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7
    TEMPRV=[300 275 250 225 200 175 150 125 100 100 75 50 30];
    %
    %Ingrese los valores de pH correspondientes a cada punto de tiempo
    PHRV=[000000000000];
    %
******
    %*********CREA MATRIZ**********
   MaTPlot=[TREFV; FLASHRV; TEMPRV; PHRV];
   %************************CREA MATRIZ ESPECIAL PARA CREAR TABLA*******************
   for k=1:NREF
    dat(k,1)={TREFV(k)};
    dat(k,2)={FLASHRV(k)};
    dat(k,3)={TEMPRV(k)};
    dat(k,4)={PHRV(k)};
   end
   dat;
   %IMPRESION EN PANTALLA
   MatPlot=fopen('matplot.txt','w');
   fprintf(MatPlot,'%9s %10s %8s %8s\n','TREF','FLASH','TEMP','PH');
   fprintf(MatPlot,'%10.4f %10.4f %10.4f %10.4f\n',MaTPlot);
   fclose(MatPlot);
   type matplot.txt
fprintf('***********
                          ·*************************\n')
********
%CREACION DE TABLA COMO FIGURA
   f = figure('Position', [100 100 752 350]);
   t = uitable('Parent', f, 'Position', [25 25 700 201]);
   set(f,'Name','Tabla 1')
   set(f,'NumberTitle','off')
   cnames = {'TREF', 'FLASH', 'TEMP', 'PH'};
   set(t,'ColumnName',cnames)
   set(t,'Data',dat)
   %-----
   %Calculo de temperaturas geoquimicas para cada pozo
   TSTART=TREFV(1);
   KSTP=0;
   if gt(NCLC,0)
      %Ingrese el radio de las particulas del coloide de la clase numero %i en nm
      CLR=[3.57];
      %*******
               ******
      CLR=CLR*1e-7;
      CLRV=CLR;
      %Ingrese la cantidad de silice del coloide de la clase numero %i en g SiO2/kg H2O
      CLM=[0.005 0.005];
      %******
                          ******
      CLMV=CLM;
      %*****************CREA MATRIZ ESPECIAL PARA CREAR TABLA********
    for k=1:NCLC
```

```
ANEXO
                CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7
                                                                                   в
       K(k)=k;
       dat1(k,1)={K(k)};
       dat1(k,2)=\{CLR(k)\};
       PM=PI4/3*DENSM*CLR(k)^3;
       dat1(k,3)=\{CLM(k)\};
       CLNV(k)=CLM(k)/PM;
       dat1(k,4)={CLNV(k)};
     end
       %**********CREA MATRIZ**********
     MaTPlot1=[K; CLRV; CLMV; CLNV];
     dat1;
     %IMPRESION EN PANTALLA
     MatPlot1=fopen('matplot1.txt','w');
     fprintf(MatPlot1,'%5s %11s %9s %11s\n','K','RADIO','MASA','NUMERO');
     fprintf(MatPlot1,'%5d %12.4E %12.4E %12.4E\n',MaTPlot1);
     fclose(MatPlot1);
     type matplot1.txt
****************/n')
%CREACION DE TABLA COMO FIGURA
     f = figure('Position', [100 100 752 350]);
     t = uitable('Parent', f, 'Position', [25 25 700 200]);
     set(f,'Name','Tabla 2')
     set(f,'NumberTitle','off')
     cnames = {'K','RADIO','MASA','NUMERO DE PARTICULAS'};
     set(t,'ColumnName',cnames)
     set(t,'Data',dat1)
   end
   %CALL setup(ibort)
[RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICCL,CAREA,KLP,DCSIL,THL,ALPF,RKF1,RKF2,RATE
KF,RATEKT,SRA,ALPSIL,GNA,GF,GSIL,PKF,AKIN,DKIN,GAMZ,ANA,SCR,AKSIL,PHN,TK,ALNT,CLN,RANUC,FPH,FIN
T,TC,PKW,ADH,BDH,EPSD,DENS,FLASH,GLASH,PH,AH,TOTF,CSI,SML,FLCL,SILOUT,RATEK,FKINL,CN,GAMMA,T
EMP,TAUC,ANNUC,T1,CSILS,CSIL,RDEPF,T2,SRR,RNUC,QT,ZLD,FLC,TEMPL,IBORT,DELTH,TCV,AN,TSTART,TAU
CS,NCLC,CSILV,CFIM,DELTC,HCMA,TCMA,KPN,TPN,ICALL,CLNV,TSPEC,KRGC,CLRV,RLIM,CLP,DTP,SILIN,CLMV]
=SETUP(RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,UMASS,PHI,DQS,GAMT,GAMC,ALPHAK,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,DKI
NT, DKINC, AKINT, AKINC, EK, AK, FF, FLASHRV, PHRV, TEMPRV, TOTFI, CSII, SILOUT, SMLI, TSTART, PI, DENSN, SILIN, IN
X,NREF,TREFV,NCLC,CLRV,DHCMA,DHCMI,DTPM,TMAXM,PI4,DENSM,CKB,ALN10,DDH,CLNV,NDP,QLP,CLMV)
;
   if le(IBORT,0)
     %CALL master
[PHL,PHNL,CN,FKINL,RATEK,SRA,ALPSIL,GNA,GF,GSIL,PKF,DKIN,AKIN,GAMZ,ANA,SCR,AKSIL,PH,PHN,TK,ALNT,
CLN,RANUC,GAMMA,TAUC,ANNUC,CSILS,RDEPF,SRR,RNUC,QT,ZLD,FPH,FINT,TC,PKW,ADH,BDH,EPSD,DENS,S
ILIN,FLC,T2,T1,TEMP,SILOUT,TEMPL,FLCL,SML,CSI,TOTF,AH,GLASH,FLASH,KPN,TPN,PKSIL,dat2,MaTPlot3,PKS
```

ILIN,FLC,T2,T1,TEMP,SILOUT,TEMPL,FLCL,SML,CSI,TOTF,AH,GLASH,FLASH,KPN,TPN,PKSIL,dat2,MaTPlot3,PKS TEP,PTIME,PCSIL,PSRR,PFLC,PTEMP,PPH,PPHN,PFPH,PRDEPF,PNUCRATE,PCAREA,PNUCFLUX,PDEPRATE,PALP SIL,CSFV,ILOSS,TCV,CFIM,LTD,LTH,CLM,TSPEC,KRGC,LNSC,CSIL,DELTC,CLRV,KSTP,CSILV,IPR,CLNV,NCLC,CLMV]=MASTER(CLMV,CN,FKINL,RATEK,SRA,ALPSIL,BDH,ADH,DENS,EPSD,GNA,GF,GSIL,PKF,PKW,RATEKT,RATEKF, RKF1,RKF2,ALPF,DKIN,AKIN,GAMZ,FINT,FPH,PHN,ANA,SCR,FLASH,PH,AKSIL,DTP,TSPEC,QLP,CLP,RLIM,EPSIL,G LASH,AH,TOTF,CSI,SML,ICALL,UMASS,TEMPRV,TOTFI,KSTP,CSII,PHRV,FLASHRV,FF,TEMPL,EK,AK,AKINC,AKINT ,DKINC,DKINT,TKF2,CKF2,TKF1,CKF1,ALPHAK,GAMC,GAMT,DQS,PHI,RK41,RK42,RK31,RK32,RK21,RK22,TMAX M,DTPM,DHCMI,DHCMA,CLRV,TREFV,NREF,SILIN,PI,SMLI,IMAX,INX,RDEPF,ANNUC,DDH,THL,DELTH,T2,SRR,F

```
В
```

LC,FLCL,ALN10,CKB,CSIL,T1,GAMMA,TEMP,KRGC,NDP,CLNV,CSILS,TCV,TAUC,IPR,ZLD,QT,RNUC,PI4,DENSN,A N,TSTART,TAUCS,RANUC,RRMN,NCLC,CLR,CLN,CSILV,CFIM,DENSM,CLM,DELTC,HCMA,SILOUT,TCMA,ICX,IPR 2,KPN,TPN,TCP,DCSIL,TC,TK,ALNT,EPR,CDP,KLP,KDP,CAREA,ICCL,I1,I2,PHL,PHNL,AKF,AKINP,LNSC,CLDV,RCF); end %IMPRESION EN PANTALLA DE TABLA MatPlot3=fopen('matplot3.txt','w'); fprintf(MatPlot3, '%5s %7s %8s %6s %6s %6s %5s %6s %5s %9s %11s %9s %11s %11s %9s\n','KSTEP','TIME','CSIL','SRR','FLC','TEMP','PH','PHN','FPH','RDEPF','NUC. RATE','CAREA','NUC. FLUX', 'DEP. RATE', 'ALPSIL'); fprintf(MatPlot3, '%5d %11.3E %7.4f %7.4f %7.4f %7.2f %6.2f %6.2f %7.4f %11.3E %11.3E %11.3E %11.3E %11.3E %12.4E\n',MaTPlot3); fclose(MatPlot3); type matplot3.txt %CREACION DE TABLA COMO FIGURA f = figure('Position', [100 100 752 350]); t = uitable('Parent', f, 'Position', [25 25 1180 650]); set(f,'Name','Tabla 3') set(f,'NumberTitle','off') cnames = {'KSTEP','TIME','CSIL','SRR','FLC','TEMP','PH','PHN','FPH','RDEPF','NUC. RATE', 'CAREA', 'NUC. FLUX', 'DEP. RATE', 'ALPSIL'}; set(t,'ColumnName',cnames) set(t,'Data',dat2) %%%%%%%%%%%%%%%CREACION DE f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 1') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP, PTIME) title('PASO VS TIEMPO') xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION TIEMPO') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 2') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP,PCSIL) title('PASO VS CONCENTRACION DE SILICE DISUELTA') xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION CONCENTRACION DE SILICE DISUELTA') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 3') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP,PSRR) title('PASO VS TASA DE SATURACION Y SOLUBILIDAD DE SA') xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION TASA DE SATURACION Y SOLUBILIDAD DE SILICE AMORFA') f = figure('Position', [100 100 752 350]);

set(f,'Name','Gafica 4') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP, PFLC)

xlabel('Numero de Paso')

title('PASO VS FACTOR DE CONCENTRACION POR FLASHEO')

в

ylabel('Valores') legend('EVOLUCION FACTOR DE CONCENTRACION POR FLASHEO') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 5') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP, PTEMP) title('PASO VS TEMPERATURA') xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION TEMPERATURA') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 6') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP, PPH) title('PASO VS pH') xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION pH') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 7') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP, PPHN) title('PASO VS pH NOMINAL') xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION pH NOMINAL') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 8') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP, PFPH) title('PASO VS F(pH,pHnom)') xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION FUNCION F(pH,pHnom)') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','Gafica 9') set(f,'NumberTitle','off') plot(PKSTEP, PRDEPF) title('PASO VS TASA DE DEPOSICION MOLECULAR') xlabel('Numero de Paso') ylabel('Valores') legend('EVOLUCION TASA DE DEPOSICION MOLECULAR')

```
ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN
ANEXO
                CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7
      f = figure('Position', [100 100 752 350]);
      set(f,'Name','Gafica 10')
      set(f,'NumberTitle','off')
      plot(PKSTEP, PNUCRATE)
      title('PASO VS TASA DE NUCLEACION')
      xlabel('Numero de Paso')
      ylabel('Valores')
      legend('EVOLUCION TASA DE NUCLEACION')
      f = figure('Position', [100 100 752 350]);
      set(f,'Name','Gafica 11')
      set(f,'NumberTitle','off')
      plot(PKSTEP,PCAREA)
      title('PASO VS AREA SUPERFICIAL DE SC')
      xlabel('Numero de Paso')
      vlabel('Valores')
      legend('EVOLUCION AREA SUPERFICIAL DE LA SILICE COLOIDAL')
      f = figure('Position', [100 100 752 350]);
      set(f,'Name','Gafica 12')
      set(f,'NumberTitle','off')
      plot(PKSTEP, PNUCFLUX)
      title('PASO VS TASA DE CONVERSION DE SD A SC POR NUCLEACION DE NUEVAS PARTICULAS')
      xlabel('Numero de Paso')
      ylabel('Valores')
      legend('EVOL. TASA DE CONV. DE SD A SC POR NUC. DE NUEVAS PART.')
      f = figure('Position', [100 100 752 350]);
      set(f,'Name','Gafica 13')
      set(f,'NumberTitle','off')
      plot(PKSTEP, PDEPRATE)
      title('PASO VS TASA DE DEPOSICION')
      xlabel('Numero de Paso')
      ylabel('Valores')
      legend('EVOLUCION TASA DE DEPOSICION')
      f = figure('Position', [100 100 752 350]);
      set(f,'Name','Gafica 14')
      set(f,'NumberTitle','off')
      plot(PKSTEP, PALPSIL)
      title('PASO VS FRACCION DE SILICE MONOMERICA EN FORMA IONICA')
      xlabel('Numero de Paso')
      ylabel('Valores')
      legend('EVOLUCION FRACCION DE SILICE MONOMERICA EN FORMA IONICA')
      digits(32);
 end
end
```

```
%FIN DEL PROGRAMA
```

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS

```
ANEXO CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7
```

в

```
function[RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICCL,CAREA,KLP,DCSIL,THL,ALPF,RKF1,RK
F2,RATEKF,RATEKT,SRA,ALPSIL,GNA,GF,GSIL,PKF,AKIN,DKIN,GAMZ,ANA,SCR,AKSIL,PHN,TK,ALNT,CLN,RANUC,
FPH,FINT,TC,PKW,ADH,BDH,EPSD,DENS,FLASH,GLASH,PH,AH,TOTF,CSI,SML,FLCL,SILOUT,RATEK,FKINL,CN,GA
MMA,TEMP,TAUC,ANNUC,T1,CSILS,CSIL,RDEPF,T2,SRR,RNUC,QT,ZLD,FLC,TEMPL,IBORT,DELTH,TCV,AN,TSTA
RT,TAUCS,NCLC,CSILV,CFIM,DELTC,HCMA,TCMA,KPN,TPN,ICALL,CLNV,TSPEC,KRGC,CLRV,RLIM,CLP,DTP,SILIN
,CLMV]=SETUP(RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,UMASS,PHI,DQS,GAMT,GAMC,ALPHAK,CKF1,TKF1,CKF2,TK
F2,DKINT,DKINC,AKINT,AKINC,EK,AK,FF,FLASHRV,PHRV,TEMPRV,TOTFI,CSII,SILOUT,SMLI,TSTART,PI,DENSN,SI
LIN, INX, NREF, TREFV, NCLC, CLRV, DHCMA, DHCMI, DTPM, TMAXM, PI4, DENSM, CKB, ALN10, DDH, CLNV, NDP, QLP,
CLMV)
        if not(le(NCLC,0) && eq(INX,0))
    LNSC=true;
    IBORT=0;
    ICALL=0;
    ICCL=0;
    KPN=0;
    CLP=1000;
    KLP=-100;
    KRGC=0;
    TSPEC=TSTART;
    PRER=3/(4*PI*DENSN);
    GOTO2=false:
    GOTO7=false;
    %%%%%%%%%%%DECLARACION-INICIALIZACION DE VARIABLES DE SILKIN WATER
    %%%%%%%%%%PHF Y SPECIFY
    DELTC=0;
    DCSIL=0;
    ALPF=0;
    CLN=0;
    CN=0:
    %WATER VARIABLES
    DENS=0;
    EPSD=0;
    BDH=0;
    ADH=0;
    PKW=0;
    %FPH VARIABLES
    FPH=0;
    FINT=0;
    PHL=0;
```

FINT=0; FINT=0; PHNL=0; PHNL=0; % ALNT=0; %SPECIFY PH=0; T1=0; T2=0; I1=0; I2=0; TEMP=0; TEMPL=0; FLC=0; FLCL=0;

SML=0;

| ANEXO | CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7 | В |
|--|---|----------------|
| CSI=0; | | |
| TOTF=0; | | |
| AH=0; | | |
| GLASH=0; | | |
| FLASH=0; | | |
| %SILKIN | | |
| RKF1=0; | | |
| RKF2=0; | | |
| RATEKF=0; | | |
| RATEKT=0; | | |
| ZLD=0; | | |
| QT=0; | | |
| RNUC=0; | | |
| SRR=0; | | |
| RDEPF=0; | | |
| CSILS=0; | | |
| ANNUC=0; | | |
| TAUC=0; | | |
| GAMMA=0; | | |
| RANUC=0; | | |
| ANA=0; | | |
| GSIL=0; | | |
| ALPSIL=0; | | |
| FKINL=0; | | |
| AKSIL=0; | | |
| GAMZ=0; | | |
| AKIN=0; | | |
| GF=0; | | |
| SRA=0; | | |
| PHN=0; | | |
| SCR=0; | | |
| DKIN=0; | | |
| PKF=0; | | |
| GNA=0; | | |
| RATEK=0; | | |
| CAREA=0; | | |
| AKF=0; | | |
| AKINP=0; | | |
| CLDV=0; | | |
| RCF=U; | | 0/0/ |
| %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% | s7o%o%o%o%o%o%o%o%o%o%o%o%o%o%o%o%o%o%o% | %% |
| %%%%%%% | | |
| | | |
| | | |
| TAUD-1600, | , , | |
| %CALL SDEC | , IEV | |
| | IFT | |
| SH]=SPFCIEV(ALN1) | , με το τε το | י,י נא ע ד? |
| | MP FIC T1 TEMPI FICI SMI CSI TOTE AH GLASH FLASHI | •,13 |
| CSII = SII INI*F | | |
| %CALL SILKI | | |
| | | |

 $[{\sf RCF}, {\sf AH}, {\sf FLCL}, {\sf CLDV}, {\sf LNSC}, {\sf AKINP}, {\sf AKF}, {\sf PHL}, {\sf PHNL}, {\sf CAREA}, {\sf DCSIL}, {\sf DELTC}, {\sf ALPF}, {\sf RKF1}, {\sf RKF2}, {\sf RATEKF}, {\sf RATEKF}$

```
В
```

PSD,BDH,ADH,PKW,TC,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC,GAMMA,RANUC,C LN,ALNT,TK,PHN,PH,AKSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATEK,FKINL,CN]=SILKIN(ALN10,FF,TEMP,CKB,KRGC,LNSC,TEMPL,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,FLC, FLCL,SML,CSI,TOTF,CSIL,AH,GAMC,GAMT,DQS,PHI,DENSN,UMASS,PI,DENSM,CLRV,PI4,RK21,RK22,RK31,RK32 ,RK41,RK42,CLNV,QLP,DELTC,NCLC,DCSIL,ALPF,DENS,CLN,CN,EPSD,BDH,ADH,PKW,FPH,FINT,ALNT,PH,RKF1,R KF2,RATEKF,RATEKT,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,TAUC,GAMMA,RANUC,ANA,GSIL,ALPSIL,FKINL,A KSIL,GAMZ,AKIN,GF,SRA,PHN,SCR,DKIN,PKF,GNA,RATEK,CAREA,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF);

TEST=ZLD*QT*RNUC*RNUC; if gt(TEST,0) GOTO2=true; break end if eq(INX,0)&& gt(SRR,1) GOTO2=true; break end if le(NREF,1) GOTO7=true; break end %5 CONTINUE TSTART=T2; TSPEC=TSTART; if ge(TSPEC,TREFV(NREF)) GOTO7=true; break end end if not(GOTO7) CONTINUE %2 if ne(INX,0) TAUN=1.08E-6/RDEPF*TEST^(-0.25); end if gt(NCLC,0) CAREA=0; for K=1:NCLC CR=CLRV(K); if gt(CR,RNUC) CAREA=CAREA+CR*CR*CLNV(K); end end %12 CONTINUE CAREA=CAREA*PI4*FLC; if gt(CAREA,0) TAUD=(CSIL-CSILS)/(CAREA*RDEPF); end end %11 CONTINUE TAU=TAUN; if lt(TAUD, TAUN) TAU=TAUD; end while gt(TAU,9.9E79)

в

```
GOTO2=false;
GOTO7=false;
TSTART=T2;
TSPEC=TSTART;
if ge(TSPEC,TREFV(NREF))
GOTO7=true;
break
end
%CALL F1
```

[RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICALL,DCSIL,DELTC,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RAT EKT,GLASH,FLASH,AH,TOTF,CSI,SML,FLCL,TEMPL,SILOUT,TEMP,T1,T2,FLC,SILIN,DENS,EPSD,BDH,ADH,PKW,TC ,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC,GAMMA,RANUC,CLN,ALNT,TK,PHN,PH,A KSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATEK,FKINL,CN,TAUD,TAUN,CSIL,TEST,GOTO2 ,GOTO7,TSTART,TSPEC,CR,CAREA,TAU]=f1(GOTO2,GOTO7,SILIN,ZLD,QT,RNUC,INX,SRR,NREF,T2,TSPEC,TREF V,RDEPF,NCLC,CLRV,PI4,CSIL,CSILS,TAUN,TAUD,ALN10,ICALL,SMLI,SILOUT,CSII,TOTFI,CLNV,TEMPRV,PHRV,FL ASHRV,FF,CKB,KRGC,LNSC,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,GAMC,GAMT,DQ S,PHI,DENSN,UMASS,PI,DENSM,RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,QLP,TSTART,TEST,CAREA,CR,TAU,DELTC,D CSIL,ALPF,DENS,CLN,CN,EPSD,BDH,ADH,PKW,FPH,FINT,TK,ALNT,PH,RKF1,RKF2,RATEKF,RATEKT,ANNUC,TAU C,GAMMA,RANUC,ANA,GSIL,ALPSIL,FKINL,AKSIL,GAMZ,AKIN,GF,SRA,PHN,SCR,DKIN,PKF,GNA,RATEK,I1,I2,TE MP,FLC,T1,TEMPL,FLCL,SML,CSI,TOTF,AH,GLASH,FLASH,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF);

if (GOTO7) break end end if not(GOTO7) DELTH=TAU/DDH; if gt(NREF,1) GOTO2=false; GOTO7=false; while gt(DELTH,(T2-T1)) TSTART=T2; TSPEC=TSTART; if ge(TSPEC,TREFV(NREF)) GOTO7=true; break end %CALL F1

[RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICALL,DCSIL,DELTC,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RAT EKT,GLASH,FLASH,AH,TOTF,CSI,SML,FLCL,TEMPL,SILOUT,TEMP,T1,T2,FLC,SILIN,DENS,EPSD,BDH,ADH,PKW,TC ,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC,GAMMA,RANUC,CLN,ALNT,TK,PHN,PH,A KSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATEK,FKINL,CN,TAUD,TAUN,CSIL,TEST,GOTO2 ,GOTO7,TSTART,TSPEC,CR,CAREA,TAU]=f1(GOTO2,GOTO7,SILIN,ZLD,QT,RNUC,INX,SRR,NREF,T2,TSPEC,TREF V,RDEPF,NCLC,CLRV,PI4,CSIL,CSILS,TAUN,TAUD,ALN10,ICALL,SMLI,SILOUT,CSII,TOTFI,CLNV,TEMPRV,PHRV,FL ASHRV,FF,CKB,KRGC,LNSC,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,GAMC,GAMT,DQ S,PHI,DENSN,UMASS,PI,DENSM,RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,QLP,TSTART,TEST,CAREA,CR,TAU,DELTC,D CSIL,ALPF,DENS,CLN,CN,EPSD,BDH,ADH,PKW,FPH,FINT,TK,ALNT,PH,RKF1,RKF2,RATEKF,RATEKT,ANNUC,TAU C,GAMMA,RANUC,ANA,GSIL,ALPSIL,FKINL,AKSIL,GAMZ,AKIN,GF,SRA,PHN,SCR,DKIN,PKF,GNA,RATEK,I1,I2,TE MP,FLC,T1,TEMPL,FLCL,SML,CSI,TOTF,AH,GLASH,FLASH,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF);

%CALL F2

[RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICALL,DCSIL,DELTC,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RAT EKT,GLASH,FLASH,AH,TOTF,CSI,SML,FLCL,TEMPL,SILOUT,TEMP,T1,T2,FLC,SILIN,DENS,EPSD,BDH,ADH,PKW,TC ,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC,GAMMA,RANUC,CLN,ALNT,TK,PHN,PH,A KSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATEK,FKINL,CN,TAUD,TAUN,CSIL,TEST,GOTO2

в

,GOTO7,TSTART,TSPEC,CR,CAREA,TAU]=f2(GOTO2,GOTO7,SILIN,ZLD,QT,RNUC,INX,SRR,NREF,T2,TSPEC,TREF V,RDEPF,NCLC,CLRV,PI4,CSIL,CSILS,TAUN,TAUD,ALN10,ICALL,SMLI,SILOUT,CSII,TOTFI,CLNV,TEMPRV,PHRV,FL ASHRV,FF,CKB,KRGC,LNSC,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,GAMC,GAMT,DQ S,PHI,DENSN,UMASS,PI,DENSM,RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,QLP,TSTART,TEST,CAREA,CR,TAU,ALPF,RK F1,RKF2,RATEKF,RATEKT,GLASH,FLASH,AH,TOTF,CSI,SML,FLCL,TEMP,TEMPL,T1,FLC,DENS,EPSD,BDH,ADH,PK W,TC,FINT,FPH,ANNUC,TAUC,GAMMA,RANUC,CLN,ALNT,TK,PHN,PH,AKSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,G SIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATEK,FKINL,CN,DELTC,DCSIL,I1,I2,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF);

if (GOTO7) break end DELTH=TAU/DDH; if le(NREF,1) break end end end if not(GOTO7) %4 CONTINUE IHL=log(TAU)/log(2)+0.5; RTAU=2^IHL; RTAU=round(RTAU); HCMA=RTAU/DHCMA; HCMI=RTAU/DHCMI; DTP=DTPM*TAU; TCMA=TAU*TMAXM; if gt(NREF,1)&& gt(TCMA,TREFV(NREF)) TCMA=TREFV(NREF); end KNUC=ANNUC+0.5: KNUC=round(KNUC); AN=ANNUC+0.5/ZLD; RLIM=exp(log(PRER*AN)/3); TPN=TSTART; THL=TSTART; fprintf('KNUC = %5.d \t ANNUC = %8.1f \t AN = %8.1f \t ZLD = %13.4E \t RLIM = %13.4E\n',KNUC,ANNUC,AN,ZLD,RLIM) fprintf('\n') fprintf('\n') NCLC=NCLC+1; CLNV(NCLC)=1; CLRV(NCLC)=RLIM; CSILV(1)=CSIL; TAUCS=TAUC; fprintf('TAUN = %13.4E \t TAUD = %13.4E \t TAU = %13.4E \t RTAU = %13.4E\n',TAUN,TAUD,TAU,RTAU) fprintf('\n') $fprintf('\n')$ fprintf('HCMA = %12.4E \t HCMI = %12.4E \t DELTH = %12.4E \t TCMA = %12.4E \t DTP = %12.4E \t NDP = %5.d\n',HCMA,HCMI,DELTH,TCMA,DTP,NDP) fprintf('\n') $fprintf('\n')$ PREC=PI4/3*DENSM; CAREA=0;

```
ANEXO CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7
```

```
for K=1:NCLC
            CR=CLRV(K);
            CLNV(K)=CLNV(K)*FLC;
            if eq(K,NCLC)
              CLNV(K)=1;
            end
            CLMV(K)=PREC*CR^3*CLNV(K);
            CAREA=CAREA+PI4*CR*CR*CLNV(K);
            if lt(K,NCLC)
              SILIN=SILIN+CLMV(K)/FLC;
            end
          end
          %3
              CONTINUE
          FLCL=FLC;
          CFIM(1,1)=1;
          CFIM(1,2)=0;
          CFIM(1,3)=0;
          DELTC=HCMI;
          TCV(1)=TSTART;
          TCV(2)=TSTART-DELTC;
          if eq(INX,0)
            return
          end
          TKB=CKB*(TEMP+273.15);
          DER=1/(DENSN*TKB*log(SRR));
          DER=4*PI/(3*TKB)*DER*DER/ALN10;
               DERI=1/DER;
               GAMCUB=GAMMA^3;
          fprintf('D LOG10 TAU/D GAMMA^3 = %13.5E \t RECIPROCAL = %13.5E \t GAMMA = %7.2f \t
GAMMA CUBED = %13.5E\n',DER,DERI,GAMMA,GAMCUB)
          fprintf('\n')
          fprintf('\n')
          return
        end
      end
    end
    %7 CONTINUE
    IBORT=1;
    fprintf(' INITIATION CONDITIONS NEVER REACHED. PROBLEM BEING ABORTED. ')
    fprintf('\n')
    fprintf('\n')
    return
  end
    %9 CONTINUE
    IBORT=1;
    fprintf(' NO COLLOID ADDED AND NUCLEATION NOT SPECIFIED. PROBLEM BEING ABORTED. ')
    fprintf('\n')
    fprintf('\n')
    return
end
```

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS

ANEXO CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7

```
function[SMLI,CSII,TOTFI,I2,I1,ICALL,SILIN,FLC,T2,T1,CLNV,TEMP,SILOUT,TEMPL,FLCL,SML,CSI,TOTF,AH,PH,GL
ASH,FLASH]=SPECIFY(ALN10,ICALL,SMLI,SILIN,SILOUT,CSII,TOTFI,NCLC,CLNV,NREF,TEMPRV,PHRV,FLASHRV,T
REFV,TSPEC,PH,T2,I1,I2,TEMP,FLC,T1,TEMPL,FLCL,SML,CSI,TOTF,AH,GLASH,FLASH)
        ICALL=ICALL+1;
        if le(SMLI,0)
    SMLI=-SMLI;
    SMLR=SMLI;
    for K=1:3
      PHIVL=(16.40+2.153*sqrt(SMLI))*0.001;
      CRF=1.003/(1-PHIVL*SMLR);
      SMLI=SMLR*CRF;
    end
    %CONTINUE 8
    SILIN=SILIN*CRF;
    SILOUT=SILOUT*CRF;
    CSII=CSII*CRF;
    TOTFI=TOTFI*CRF;
    if ne(NCLC,0)
      for K=1:NCLC
        CLNV(K)=CLNV(K)*CRF;
      end
      %CONTINUE 2
    end
  end
  %CONTINUE 7
        if le(NREF,1)
    if gt(ICALL,2)
      return
    end
    if ne(ICALL,1)
      TEMPL=TEMP;
      return
    end
    %CONTINUE 4
    TEMP=TEMPRV(1);
    TEMPL=-1000;
    PH=PHRV(1);
    FLASH=FLASHRV(1);
    GLASH=0;
        FLC=1/(1-FLASH);
        FLCL=FLC;
        SML=SMLI*FLC;
        TOTF=TOTFI*FLC;
        CSI=CSII*FLC;
        AH=ALG10(-PH);
        return
  end
  %CONTINUE 6
        if le(ICALL,1)
    TEMP=-1000;
    l1=0;
    12=1;
    T2=-1E10;
```

| ANEXO | CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7 |
|-----------------|--|
| FLCL=1; | |
| end | |
| %CONTINUE 9 | |
| %CONTINUE 1 | |
| T2=TREFV(I2); | |
| while ge(TSPEC, | ,T2) |
| 11=11+1; | |
| 12=12+1; | |
| T1=TREFV(I1) | ; |
| T2=TREFV(I2) | , |
| end | |
| %CONTINUE 3 | |
| TEMPL=T | EMP; |
| TFAC=(TS | PEC-T1)/(T2-T1); |
| TEMP=TE | MPRV(I1)+(TEMPRV(I2)-TEMPRV(I1))*TFAC; |
| PH=PHRV | /(I1)+(PHRV(I2)-PHRV(I1))*TFAC; |
| FLASH=FI | _ASHRV(I1)+(FLASHRV(I2)-FLASHRV(I1))*TFAC; |
| GLASH=(I | FLASHRV(I2)-FLASHRV(I1))/(T2-T1); |
| FLC=1/(1 | -FLASH); |
| GLASH=G | JLASH*FLC; |
| SIVIL=SIVI | |
| | TFI ^T FLC; |
| | |
| AH=ALG1 | .U(-PH); |
| return | |

end

function[RCF,AH,FLCL,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,CAREA,DCSIL,DELTC,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RATEKT ,DENS,EPSD,BDH,ADH,PKW,TC,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC,GAMMA,R ANUC,CLN,ALNT,TK,PHN,PH,AKSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATEK,FKINL,CN] =SILKIN(ALN10,FF,TEMP,CKB,KRGC,LNSC,TEMPL,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALP HAK,FLC,FLCL,SML,CSI,TOTF,CSIL,AH,GAMC,GAMT,DQS,PHI,DENSN,UMASS,PI,DENSM,CLRV,PI4,RK21,RK22,R K31,RK32,RK41,RK42,CLNV,QLP,DELTC,NCLC,DCSIL,ALPF,DENS,CLN,CN,EPSD,BDH,ADH,PKW,FPH,FINT,ALNT,P H,RKF1,RKF2,RATEKF,RATEKT,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,TAUC,GAMMA,RANUC,ANA,GSIL,ALPSI L,FKINL,AKSIL,GAMZ,AKIN,GF,SRA,PHN,SCR,DKIN,PKF,GNA,RATEK,CAREA,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF) TC=TEMP; TK=TC+273.15; TKB=CKB*TK; LSKIP=eq(KBGC 1)Lleq(KBGC 3):

```
LSKIP=eq(KRGC,1)||eq(KRGC,3);

if (LNSC)

LSKIP=false;

end

if eq(KRGC,1)

LNSC=false;

end

if not(LSKIP)

if ne(TEMP,TEMPL)

ALNT=log(TK);

%CALL WATER

[TC,PKW,ADH,BDH,EPSD,DENS]=WATER(ALNT,TK);

PKSIL=2.34669E3/TK+2.57979*ALNT-18.4014;
```

```
PKSIL=-PKSIL+PKW;
   AKSIL=ALG10(-PKSIL);
   PKF=-1.892+403.6/TK+0.012465*TK;
   AKF=ALG10(-PKF);
   CSILL=-731./TK+1.52;
   CSILS=ALG10(CSILL);
   RATEKT=ALG10(AK-EK/TK);
   AKIN=ALG10(AKINC+AKINT/TK);
   DKIN=ALG10(DKINC+DKINT/TK);
   RKF1=ALG10(CKF1+TKF1/TK);
   RKF2=ALG10(CKF2+TKF2/TK);
   AKINP=AKIN^ALPHAK;
 end
 %CONTINUE 13
 if not(eq(FLC,FLCL)&& eq(TEMP,TEMPL))
   SI=SML;
   SRSI=sqrt(SI);
   GSIL=ALG10(-ADH*SRSI/(1+4*BDH*SRSI));
   GNA=ALG10(0.075*SI)*GSIL;
   GF=-ADH*SRSI/(1+3*BDH*SRSI)+0.2*SI;
   GF=ALG10(GF);
   ANA=GNA*SML;
 end
 %CONTINUE 14
 if le(CSI,0)
   ALPSIL=1./(1.+AH*GSIL/AKSIL);
 end
 if gt(CSI,0)
   ALPSIL=CSI/CSIL;
   AH=AKSIL/GSIL*(1/ALPSIL-1);
   PH=-log10(AH);
 end
 %CONTINUE 1
 ALPF=1/(1+AH*GF/AKF);
 PHN=PH+log10(ANA/0.069);
 %CALL PHF
 [PHL,PHNL,FPH,FINT]=PHF(PHN,PH,FF,PHL,PHNL,FPH,FINT);
 RATEKF=TOTF*(RKF1*(1-ALPF)+RKF2*ALPF);
 RATEK=RATEKT*(FPH+RATEKF);
end
%CONTINUE 9
     SRA=CSIL/CSILS*(1-ALPSIL);
     GAMZ=GAMC+GAMT*TC;
     DGAMQ=-ALN10*DQS*TKB*FINT;
     GAMMA=GAMZ+DGAMQ;
     SCR=exp(0.036031*PHI*SML);
     SRR=SRA*SCR;
     SRRL=log(SRR);
     SRAL=log(SRA);
     FKINL=2.*GAMMA/(DENSN*TKB);
     if lt(SRA,AKIN)
 RCF=RATEK*exp(ALPHAK*SRAL);
end
```

ANEXO COE

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7

```
if ge(SRA,AKIN)
 RCFA=RATEK*AKINP;
 DRCFA=RCFA*ALPHAK/AKIN;
 DIF=SRA-AKIN;
 RCF=DRCFA*DIF+RCFA;
end
%CONTINUE 7
     RDEPF=RCF*(1-1/SRR);
     if lt(SRR,1)
 RCF=0;
end
     if It(SRR,1.)
 RDEPF=RATEK*DKIN*(SRR-1);
end
     RCFN=RCF/UMASS;
if le(KRGC,0)
 if le(SRR,1)
    RNUC=0;
    ANUC=0;
    ANNUC=0;
    ZLD=0;
    QT=0;
    RANUC=0;
    TAUC=0;
    return
 end
  %CONTINUE 2
     RNUC=FKINL/SRRL;
     ANUC=4*PI*RNUC*RNUC;
     FNCAP=ANUC*GAMMA/3;
     QCAP=exp(-FNCAP/TKB);
     ANNUC=PI4/3*DENSN*RNUC^3;
     ZLD=3/(PI4*DENSN*ANNUC*ANNUC);
     ZLD=2/3*exp(log(ZLD)/3);
     ZLD=ZLD*sqrt(GAMMA/TKB);
     CN=RCFN*ANUC;
     QT=QLP*QCAP;
     RANUC=ZLD*QT*CN;
     TAUC=1/(4*CN*ZLD*ZLD);
 return
end
%CONTINUE 15
     KBASE=300*(KRGC-1);
     FCR=FLC/FLCL;
     DELDENS=DELTC/DENSM;
     CAREA=0;
for K=1:NCLC
 CR=CLRV(K);
 if ne(CR,0)
    K1=K+300;
    K2=K+600;
    FDRL=FKINL/CR;
    CLD=RDEPF;
```

```
ANEXO CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7
```

```
if gt(FDRL,SRRL)
       CLD=RATEK*DKIN*(SRR-exp(FDRL));
     end
     CLD=CLD*DELDENS;
     CLDV(K+KBASE)=CLD;
     CLN=CLNV(K)*FCR;
     DCSIL=DCSIL-PI4*CLN*CLD*DENSM*CR*CR;
     CAREA=CAREA+PI4*CLN*CR*CR;
     if eq(KRGC,1)
       CLRV(K1)=CR;
       CLRV(K)=CR+0.5*CLDV(K);
     end
     %CONTINUE 10
     if eq(KRGC,2)
       CLRV(K)=CLRV(K1)+RK21*CLDV(K)+RK22*CLDV(K1);
     end
     if eq(KRGC,3)
       CLRV(K)=CLRV(K1)+RK31*CLDV(K1)+RK32*CLDV(K2);
     end
       if eq(KRGC,4)
       SUM=CLDV(K)+RK41*CLDV(K1)+RK42*CLDV(K2)+CLDV(K+900);
       CLRV(K)=CLRV(K1)+SUM/6;
       CLNV(K)=CLN;
     end
   end
 end
 %CONTINUE 4
       if eq(KRGC,4)
   FLCL=FLC;
 end
       return
end
```

```
function [TC,PKW,ADH,BDH,EPSD,DENS]=WATER(ALNT,TK)
        PKW=94.9734*ALNT-0.097611*TK-606.522;
        PKW=PKW+(3.1286E4-2.17087E6/TK)/TK;
        PKW=-PKW;
        TC=TK-273.15;
        TCA=0.01*TC;
        if le(TC,150)
    ADV(1)=0.9998396;
    ADV(2)=18.224944E-1;
    ADV(3)=-7.922210E-2;
    ADV(4)=-55.44846E-3;
    ADV(5)=149.7562E-4;
    ADV(6)=-393.2952E-5;
    BD=18.159725E-1;
  end
  %CONTINUE 11
  if gt(TC,150)
    ADV(1)=1.007708;
```

```
ANEXO
                CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7
   ADV(2)=-1.52729E-2;
   ADV(3)=-4.33281E-2;
   ADV(4)=1.22917E-2;
   ADV(5)=-2.34375E-3;
   ADV(6)=2.6E-11;
   BD=0;
 end
 %CONTINUE 13
 SUM=ADV(6);
       for K=1:5
   KK=6-K;
   SUM=ADV(KK)+SUM*TCA;
 end
 %CONTINUE 14
       DENS=SUM/(1+BD*TCA);
       if le(TC,100)
   SUM=9.398E-4-1.410E-6*TC;
   SUM=-0.40008+SUM*TC;
   EPSD=87.740+SUM*TC;
 end
 %CONTINUE 15
 if gt(TC,100)
   SUM=0.1417E-2-0.8292E-6*TK;
   SUM=-0.9297+SUM*TK;
   EPSD=5321./TK+233.76+SUM*TK;
 end
 %CONTINUE 16
       TEPSD=TK*EPSD;
       SQRTE=sqrt(TEPSD);
       SQRDEN=sqrt(DENS);
       ADH=1.82483E6*SQRDEN/(TEPSD*SQRTE);
       BDH=50.2916*SQRDEN/SQRTE;
       return
```

```
end
```

```
function [PHL,PHNL,FPH,FINT]=PHF(PHN,PH,FF,PHL,PHNL,FPH,FINT)
        if eq(PHN,PHNL)&& eq(PH,PHL)
    return
  end
        PHL=PH;
        PHNL=PHN;
        Y=PH;
        for K=1:2
    X=Y-7.6:
    if gt(X,1.12915)
      X=2.2583-X;
    end
    if le(X,-1.63)
      FPH=ALG10(X);
      FINT=log10(1+6.2*FPH)/6.2;
      FPH=FPH/(1+6.2*FPH);
```

в

```
end
    %CONTINUE 1
   if gt(X,-1.63)
      ARG=1+ALG10(X/2.113);
      FPH=-X/(9.6538+X*(1.7901+4.1811*X));
      FPH=X-2.113*log10(ARG)+FPH;
      FPH=ALG10(FPH);
      FINT=-0.75924+0.58993*X-0.11292*X*X;
      FINT=ALG10(FINT);
    end
    %CONTINUE 4
       if ge(Y,8.72915)
      FPH=1-FPH;
      FINT=FINT+Y-8.72915;
    end
    %CONTINUE 2
       FPH=FPH/0.11891321;
       if le(K,1)
      FINTF=FINT;
      FPHF=FPH;
      Y=PHN;
    end
  end
       FPH=FF*FPHF+(1-FF)*FPH;
       FINT=FF*FINTF+(1-FF)*FINT;
       return
end
```

function

[RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICALL,DCSIL,DELTC,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RAT EKT,GLASH,FLASH,AH,TOTF,CSI,SML,FLCL,TEMPL,SILOUT,TEMP,T1,T2,FLC,SILIN,DENS,EPSD,BDH,ADH,PKW,TC ,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC,GAMMA,RANUC,CLN,ALNT,TK,PHN,PH,A KSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATEK,FKINL,CN,TAUD,TAUN,CSIL,TEST,GOTO2 ,GOTO7,TSTART,TSPEC,CR,CAREA,TAU]=f1(GOTO2,GOTO7,SILIN,ZLD,QT,RNUC,INX,SRR,NREF,T2,TSPEC,TREF V,RDEPF,NCLC,CLRV,PI4,CSIL,CSILS,TAUN,TAUD,ALN10,ICALL,SMLI,SILOUT,CSII,TOTFI,CLNV,TEMPRV,PHRV,FL ASHRV,FF,CKB,KRGC,LNSC,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,GAMC,GAMT,DQ S,PHI,DENSN,UMASS,PI,DENSM,RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,QLP,TSTART,TEST,CAREA,CR,TAU,DELTC,D CSIL,ALPF,DENS,CLN,CN,EPSD,BDH,ADH,PKW,FPH,FINT,TK,ALNT,PH,RKF1,RKF2,RATEKF,RATEKT,ANNUC,TAU C,GAMMA,RANUC,ANA,GSIL,ALPSIL,FKINL,AKSIL,GAMZ,AKIN,GF,SRA,PHN,SCR,DKIN,PKF,GNA,RATEK,I1,I2,TE MP,FLC,T1,TEMPL,FLCL,SML,CSI,TOTF,AH,GLASH,FLASH,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF)

while not((GOTO2)||(GOTO7))

%1 CONTINUE TAUD=1E80; TAUN=1E80; %CALL SPECIFY

[SMLI,CSII,TOTFI,I2,I1,ICALL,SILIN,FLC,T2,T1,CLNV,TEMP,SILOUT,TEMPL,FLCL,SML,CSI,TOTF,AH,PH,GLASH,FLA SH]=SPECIFY(ALN10,ICALL,SMLI,SILIN,SILOUT,CSII,TOTFI,NCLC,CLNV,NREF,TEMPRV,PHRV,FLASHRV,TREFV,TS PEC,PH,T2,I1,I2,TEMP,FLC,T1,TEMPL,FLCL,SML,CSI,TOTF,AH,GLASH,FLASH);

CSIL=SILIN*FLC;

%CALL SILKIN(CSIL)

[RCF,AH,FLCL,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,CAREA,DCSIL,DELTC,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RATEKT,DENS,E

```
в
```

PSD,BDH,ADH,PKW,TC,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC,GAMMA,RANUC,C LN,ALNT,TK,PHN,PH,AKSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATEK,FKINL,CN]=SILKIN(ALN10,FF,TEMP,CKB,KRGC,LNSC,TEMPL,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,FLC, FLCL,SML,CSI,TOTF,CSIL,AH,GAMC,GAMT,DQS,PHI,DENSN,UMASS,PI,DENSM,CLRV,PI4,RK21,RK22,RK31,RK32 ,RK41,RK42,CLNV,QLP,DELTC,NCLC,DCSIL,ALPF,DENS,CLN,CN,EPSD,BDH,ADH,PKW,FPH,FINT,ALNT,PH,RKF1,R KF2,RATEKF,RATEKT,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,TAUC,GAMMA,RANUC,ANA,GSIL,ALPSIL,FKINL,A KSIL,GAMZ,AKIN,GF,SRA,PHN,SCR,DKIN,PKF,GNA,RATEK,CAREA,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF); TEST=ZLD*QT*RNUC*RNUC; if gt(TEST,0) GOTO2=true; break end if eq(INX,0)&& gt(SRR,1) GOTO2=true; break end if le(NREF,1) GOTO7=true; break end %5 CONTINUE TSTART=T2; TSPEC=TSTART; if ge(TSPEC,TREFV(NREF)) GOTO7=true; break end end if not(GOTO7) %2 CONTINUE if ne(INX,0) TAUN=1.08E-6/RDEPF*TEST^(-0.25); end if gt(NCLC,0) CAREA=0; for K=1:NCLC CR=CLRV(K); if gt(CR,RNUC) CAREA=CAREA+CR*CR*CLNV(K); end

end %12 CONTINUE CAREA=CAREA*PI4*FLC; if gt(CAREA,0) TAUD=(CSIL-CSILS)/(CAREA*RDEPF); end end %11CONTINUE TAU=TAUN; if lt(TAUD, TAUN)

TAU=TAUD;

end end

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS

ANEXO

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7

в

```
end
```

function

[RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,12,11,ICALL,DCSIL,DELTC,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RAT EKT,GLASH,FLASH,AH,TOTF,CSI,SML,FLCL,TEMPL,SILOUT,TEMP,T1,T2,FLC,SILIN,DENS,EPSD,BDH,ADH,PKW,TC ,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC,GAMMA,RANUC,CLN,ALNT,TK,PHN,PH,A KSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATEK,FKINL,CN,TAUD,TAUN,CSIL,TEST,GOTO2 ,GOTO7,TSTART,TSPEC,CR,CAREA,TAU]=f2(GOTO2,GOTO7,SILIN,ZLD,QT,RNUC,INX,SRR,NREF,T2,TSPEC,TREF V,RDEPF,NCLC,CLRV,PI4,CSIL,CSILS,TAUN,TAUD,ALN10,ICALL,SMLI,SILOUT,CSII,TOTFI,CLNV,TEMPRV,PHRV,FL ASHRV,FF,CKB,KRGC,LNSC,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,GAMC,GAMT,DQ S,PHI,DENSN,UMASS,PI,DENSM,RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,QLP,TSTART,TEST,CAREA,CR,TAU,ALPF,RK F1,RKF2,RATEKF,RATEKT,GLASH,FLASH,AH,TOTF,CSI,SML,FLCL,TEMP,TEMPL,T1,FLC,DENS,EPSD,BDH,ADH,PK W,TC,FINT,FPH,ANNUC,TAUC,GAMMA,RANUC,CLN,ALNT,TK,PHN,PH,AKSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,G SIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATEK,FKINL,CN,DELTC,DCSIL,I1,I2,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF)

while gt(TAU,9.9E79) GOTO2=false; GOTO7=false; TSTART=T2; TSPEC=TSTART; if ge(TSPEC,TREFV(NREF)) GOTO7=true; break end %f1

[RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICALL,DCSIL,DELTC,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RAT EKT,GLASH,FLASH,AH,TOTF,CSI,SML,FLCL,TEMPL,SILOUT,TEMP,T1,T2,FLC,SILIN,DENS,EPSD,BDH,ADH,PKW,TC ,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC,GAMMA,RANUC,CLN,ALNT,TK,PHN,PH,A KSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATEK,FKINL,CN,TAUD,TAUN,CSIL,TEST,GOTO2 ,GOTO7,TSTART,TSPEC,CR,CAREA,TAU]=f1(GOTO2,GOTO7,SILIN,ZLD,QT,RNUC,INX,SRR,NREF,T2,TSPEC,TREF V,RDEPF,NCLC,CLRV,PI4,CSIL,CSILS,TAUN,TAUD,ALN10,ICALL,SMLI,SILOUT,CSII,TOTFI,CLNV,TEMPRV,PHRV,FL ASHRV,FF,CKB,KRGC,LNSC,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,GAMC,GAMT,DQ S,PHI,DENSN,UMASS,PI,DENSM,RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,QLP,TSTART,TEST,CAREA,CR,TAU,DELTC,D CSIL,ALPF,DENS,CLN,CN,EPSD,BDH,ADH,PKW,FPH,FINT,TK,ALNT,PH,RKF1,RKF2,RATEKF,RATEKT,ANNUC,TAU C,GAMMA,RANUC,ANA,GSIL,ALPSIL,FKINL,AKSIL,GAMZ,AKIN,GF,SRA,PHN,SCR,DKIN,PKF,GNA,RATEK,I1,I2,TE MP,FLC,T1,TEMPL,FLCL,SML,CSI,TOTF,AH,GLASH,FLASH,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF);

if (GOTO7) break end end

end

function

[PHL,PHNL,CN,FKINL,RATEK,SRA,ALPSIL,GNA,GF,GSIL,PKF,DKIN,AKIN,GAMZ,ANA,SCR,AKSIL,PH,PHN,TK,ALNT, CLN,RANUC,GAMMA,TAUC,ANNUC,CSILS,RDEPF,SRR,RNUC,QT,ZLD,FPH,FINT,TC,PKW,ADH,BDH,EPSD,DENS,S ILIN,FLC,T2,T1,TEMP,SILOUT,TEMPL,FLCL,SML,CSI,TOTF,AH,GLASH,FLASH,KPN,TPN,PKSIL,dat2,MaTPlot3,PKS TEP,PTIME,PCSIL,PSRR,PFLC,PTEMP,PPH,PPHN,PFPH,PRDEPF,PNUCRATE,PCAREA,PNUCFLUX,PDEPRATE,PALP SIL,CSFV,ILOSS,TCV,CFIM,LTD,LTH,CLM,TSPEC,KRGC,LNSC,CSIL,DELTC,CLRV,KSTP,CSILV,IPR,CLNV,NCLC,CLMV]=MASTER(CLMV,CN,FKINL,RATEK,SRA,ALPSIL,BDH,ADH,DENS,EPSD,GNA,GF,GSIL,PKF,PKW,RATEKT,RATEKF, RKF1,RKF2,ALPF,DKIN,AKIN,GAMZ,FINT,FPH,PHN,ANA,SCR,FLASH,PH,AKSIL,DTP,TSPEC,QLP,CLP,RLIM,EPSIL,G LASH,AH,TOTF,CSI,SML,ICALL,UMASS,TEMPRV,TOTFI,KSTP,CSII,PHRV,FLASHRV,FF,TEMPL,EK,AK,AKINC,AKINT

| | NEXO | CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB |
|--|-------------|--|
|--|-------------|--|

В

,DKINC,DKINT,TKF2,CKF2,TKF1,CKF1,ALPHAK,GAMC,GAMT,DQS,PHI,RK41,RK42,RK31,RK32,RK21,RK22,TMAX M, DTPM, DHCMI, DHCMA, CLRV, TREFV, NREF, SILIN, PI, SMLI, IMAX, INX, RDEPF, ANNUC, DDH, THL, DELTH, T2, SRR, F LC,FLCL,ALN10,CKB,CSIL,T1,GAMMA,TEMP,KRGC,NDP,CLNV,CSILS,TCV,TAUC,IPR,ZLD,QT,RNUC,PI4,DENSN,A N,TSTART,TAUCS,RANUC,RRMN,NCLC,CLR,CLN,CSILV,CFIM,DENSM,CLM,DELTC,HCMA,SILOUT,TCMA,ICX,IPR 2,KPN,TPN,TCP,DCSIL,TC,TK,ALNT,EPR,CDP,KLP,KDP,CAREA,ICCL,I1,I2,PHL,PHNL,AKF,AKINP,LNSC,CLDV,RCF) CSFV=0: CT=0; dat2={}; MaTPlot3=0; PKSTEP=0; PTIME=0; PCSIL=0; PSRR=0; PFLC=0; PTEMP=0; PPH=0; PPHN=0; PFPH=0; PRDEPF=0; PNUCRATE=0; PCAREA=0: PNUCFLUX=0; PDEPRATE=0; PALPSIL=0: fprintf('***** ******** **********************************\n') RNMX=0; LNSC=true; if ge(IPR,2) %%CALL OUTPUT%% [RKF1,RKF2,RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICALL,CAREA,RATEKF,RATEKT,ALPF,D CSIL, DELTC, PKSIL, KRGC, CSIL, TPN, KPN, TSPEC, FLASH, GLASH, AH, TOTF, CSI, SML, FLCL, TEMPL, SILOUT, TEMP, T1, T 2,FLC,SILIN,DENS,EPSD,BDH,ADH,PKW,TC,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC ,GAMMA,RANUC,CLN,ALNT,TK,PHN,PH,AKSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATE K,FKINL,CN]=OUTPUT(RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,DENSM,PI,UMASS,DENSN,PHI,GAMT,GAMC,AH,FLC L,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,TEMPL,LNSC,CKB,FF,TSPEC,TREFV,FLASHR V,PHRV,TEMPRV,NREF,TOTFI,CSII,SILOUT,SMLI,ICALL,ALN10,TCV,KSTP,NDP,DTP,CSILV,AKSIL,TEMP,PH,FLASH ,GLASH,FLC,SML,SCR,ANA,PHN,FPH,FINT,GAMZ,GAMMA,DQS,AKIN,DKIN,TOTF,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RAT EKT,PKW,PKF,GSIL,GF,GNA,EPSD,DENS,ADH,BDH,CSILS,ALPSIL,CSI,SRA,SRR,RATEK,RDEPF,FKINL,RNUC,ANNU C,ZLD,CN,QLP,QT,RANUC,TAUC,NCLC,CLRV,CLNV,PI4,SILIN,CLMV,KRGC,CSIL,ICX,DELTC,DCSIL,CLN,TC,TK,ALN T,CAREA,T2,I1,I2,T1,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF); end fprintf('KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RDEPF NUC.RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL(n')%PRINT 1 for KSTEP=1:IMAX KSTP=KSTEP; %%CALL DEPOSIT(ILOSS)%% [RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLP,KLP,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,CT,ICALL,CAREA,DCSIL,ALPF,RKF1,RKF2, RATEKF,RATEKT,CN,FKINL,RATEK,SRA,ALPSIL,GNA,GF,GSIL,PKF,DKIN,AKIN,GAMZ,ANA,SCR,AKSIL,PHN,TK,ALN

```
T,CLN,GAMMA,TAUC,ANNUC,CSILS,RDEPF,SRR,RNUC,QT,ZLD,FPH,FINT,TC,PKW,ADH,BDH,EPSD,DENS,FLASH,
GLASH, PH, AH, TOTF, CSI, SML, FLCL, TEMPL, SILOUT, TEMP, CLNV, T1, T2, FLC, SILIN, dat2, MaTPlot3, PKSTEP, PTIME,
PCSIL,PSRR,PFLC,PTEMP,PPH,PPHN,PFPH,PRDEPF,PNUCRATE,PCAREA,PNUCFLUX,PDEPRATE,PALPSIL,CSFV,IL
OSS,TCV,RANUC,CSILV,CFIM,LTD,LTH,TSPEC,KRGC,CSIL,CLRV,CLMV]=DEPOSIT(CSIL,KRGC,TSPEC,TEMP,FF,ICA
LL,ALN10,SMLI,SILIN,SILOUT,CSII,TOTFI,NREF,TEMPRV,PHRV,FLASHRV,TREFV,CKB,LNSC,TEMPL,AK,EK,AKINC,
AKINT, DKINC, DKINT, CKF1, TKF1, CKF2, TKF2, ALPHAK, FLC, FLCL, SML, CSI, TOTF, AH, GAMC, GAMT, DQS, PHI, DENSN
,UMASS,PI,KSTP,CSILV,TCV,DELTC,GLASH,RK21,RK31,RK22,RK32,RK41,RK42,EPSIL,DENSM,PI4,NCLC,CLRV,RLI
M,IPR,CLNV,CLP,CFIM,QLP,DCSIL,ALPF,DENS,CLN,CN,EPSD,BDH,ADH,PKW,TC,FPH,FINT,TK,ALNT,PH,RKF1,RKF
2,RATEKF,RATEKT,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,TAUC,GAMMA,RANUC,ANA,GSIL,ALPSIL,FKINL,AKS
IL,GAMZ,AKIN,GF,SRA,PHN,SCR,DKIN,PKF,GNA,RATEK,EPR,CDP,KLP,KDP,TSTART,TAUCS,CAREA,INX,ICCL,CT,T
2,11,12,T1,FLASH,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,dat2,MaTPlot3,PKSTEP,PTIME,PCSIL,PSRR,PFLC,PTEMP,PPH,PPH
N,PFPH,PRDEPF,PNUCRATE,PCAREA,PNUCFLUX,PDEPRATE,PALPSIL,RCF,CLMV,CSFV);
    GOTO28=false;
    GOTO42=false;
    GOTO39=false;
    GOTO38=false;
    GOTO37=false;
    if ge(ILOSS,0)
      if ne(ILOSS,0)
        LNSC=true;
      end
      if le(ILOSS,0)
        if ne(INX,0)
          TAU=1.08E-6/RDEPF*(ZLD*QT*RNUC*RNUC)^(-0.25);
          DHN=TAU/DDH;
          %CONTINUE 21
          %THN=THL+DELTH;
          while not(GOTO39 ||GOTO38 || GOTO37)
            GOTO37=false:
            GOTO38=false;
            GOTO39=false;
            THN=THL+DELTH;
            if lt(DHN,DELTH)
              THN=THL+0.5*(DELTH+DHN);
              if gt(THN,TCV(1))
                GOTO39=true;
                break
              end
              DELTH=DHN;
              TAUCS=TAUC;
              if ge(IPR,3)
                fprintf('NEW DELTH = %12.4E \t TAUCS = %12.4E \t AT TCV = %12.4E \t THN =
%12.4E\n',DELTH,TAUCS,TCV(1),THN)
                fprintf('\n')
                fprintf('KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RDEPF NUC.RATE CAREA
NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL\n')
                fprintf('\n')
              end
            end
            %CONTINUE 15
            if gt(THN,TCV(1))
              GOTO39=true;
              break
```

ANEXO

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7

| end |
|---|
| THL=THN; |
| if eq(NCLC,300) |
| GOTO38=true; |
| break |
| end |
| TSPEC=THI · |
| |
| |
| |
| STJ-SPECIFT(ALNIU, ICALL, SIVILI, SILIN, SILOUT, CSII, IOTFI, NCLC, CLINV, NREF, IEIVIPRV, PRRV, FLASTRV, IREFV, IS |
| PEC,PH,T2,T1,T2,TEMP,FLC,T1,TEMPL,FLCL,SML,CST,TOTF,AH,GLASH,FLASH); |
| LNSC=true; |
| DI=IHL-ICV(1); |
| CSIL=CSF(DT,CSFV); |
| KRGC=0; |
| %%CALL SILKIN(CSIL)%% |
| [RCF,AH,FLCL,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,CAREA,DCSIL,DELTC,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RATEKT,DENS,E |
| PSD,BDH,ADH,PKW,TC,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC,GAMMA,RANUC,C |
| LN,ALNT,TK,PHN,PH,AKSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATEK,FKINL,CN]=SILKIN(|
| ALN10,FF,TEMP,CKB,KRGC,LNSC,TEMPL,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,FLC, |
| FLCL.SML.CSI.TOTF.CSIL.AH.GAMC.GAMT.DOS.PHI.DENSN.UMASS.PI.DENSM.CLRV.PI4.RK21.RK22.RK31.RK32 |
| .RK41.RK42.CLNV.OLP.DELTC.NCLC.DCSIL.ALPE.DENS.CLN.CN.EPSD.BDH.ADH.PKW.EPH.FINT.ALNT.PH.RKE1.R |
| KE2 RATEKE RATEKT ZI D OT RNUC SRR RDEPE CSUS ANNUC TAUC GAMMA RANUC ANA GSU ALPSU EKINI A |
| KSU GAM7 AKIN GE SRA PHN SCR DKIN PKE GNA RATEK CAREA PHI PHNI AKE AKIND CI DV RCE). |
| $ANI-ANINI I C 10 5 / 7 D \cdot$ |
| ADC-2/(DI/*DENICN)*ANI |
| $ARG=5/(P14^{\circ}DERSIN)^{\circ}AR,$ |
| CLR=exp(log(ARG)/3); |
| CF=1-exp(-(THL-TSTART)/TAUCS); |
| RANULL=RANUL*LF; |
| CLN=RANUCC*DELTH; |
| if gt(RANUCC,RNMX) |
| RNMX=RANUCC; |
| end |
| if lt(RANUCC,RRMN*RNMX) |
| GOTO37=true; |
| break |
| end |
| NCLC=NCLC+1; |
| CLRV(NCLC)=CLR; |
| CLNV(NCLC)=CLN; |
| CLM=PI4/3*DENSM*CLR^3; |
| CLM=CLM*CLN; |
| CLMV(NCLC)=CLM; |
| CSILV(1)=CSILV(1)-CLM; |
| if ge(IPR.5) |
| fprintf('\\ NUC \t |
| NUC\\\n') |
| fprintf('\n') |
| forintf(' A NEW COLLOID CLASS HAS NUCLEATED AT KSTEP = %5d \t \n RADIUS = %12 3E \t |
| NUMBER = $\%12$ 3E \t TOT MASS = $\%12$ 3E \t TIME = $\%12$ 3E \t NCLC = $\%5d$ |
| $\ln (\text{KSTEP CLR CLN CLM THENCEC})$ |
| forintf('\n') |
| |
| |
| |

```
CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7
                                                                                                 в
ANEXO
              fprintf(' CSIL = %8.4f \t ANNUC = %8.1f \t AN = %8.1f \t NUC.PF = %13.4E \t S.S.RATE =
%13.4E \t CORR.RATE = %13.4E \t CORR.FACTOR = %8.4f\n',CSILV(1),ANNUC,AN,QT,RANUC,RANUCC,CF)
              fprintf('\n')
            end
            CS1=CSILV(1);
            CS2=CSILV(2);
            CS3=CSILV(3);
            CSFV(1)=CFIM(1,1)*CS1+CFIM(1,2)*CS2+CFIM(1,3)*CS3;
            CSFV(2)=CFIM(2,1)*CS1+CFIM(2,2)*CS2+CFIM(2,3)*CS3;
            CSFV(3)=CFIM(3,1)*CS1+CFIM(3,2)*CS2+CFIM(3,3)*CS3;
            GOTO37=false;
            GOTO38=false;
            GOTO39=false;
          end
        end
      end
      %39
                CONTINUE
      if not((GOTO38)||(GOTO37))
        if (LTH)
          DELTC=0.5*DELTC;
          if ge(IPR,3)
            fprintf('NEW DELTC = %12.4E \t AT KSTEP = %5d \n',DELTC,KSTEP)
            fprintf('\n')
            fprintf('KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RDEPF NUC.RATE CAREA NUC.FLUX
DEP.RATE ALPSIL\n')
            fprintf('\n')
          end
          ICCL=KSTEP;
        end
                CONTINUE
        %12
        if not(LTH)
          if (LTD && le(1.99*DELTC,HCMA))
            if not(gt(INX,0) && gt(DELTC,0.5*DELTH))
              DELTC=2.*DELTC;
              if ge(IPR,3)
                fprintf('NEW DELTC = %12.4E \t AT KSTEP = %5d \n',DELTC,KSTEP)
                fprintf('\n')
                fprintf('KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RDEPF NUC.RATE CAREA
NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL\n')
                fprintf('\n')
              end
              ICCL=KSTEP;
            end
          end
        end
      end
      %16
                CONTINUE
      GOTO42=false;
      GOTO28=false;
      GOTO6=false:
      GOTO32=false;
      if ge(CSILV(1),SILOUT) | ((GOTO38) | (GOTO37))
        GOTO6=true;
```
```
ANEXO
                  CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7
                                                                                               в
        if lt(KSTEP,IMAX)||((GOTO38)||(GOTO37))
          GOTO6=false;
          GOTO32=true;
          if le(TCV(1)+DELTC,TCMA)||((GOTO38)||(GOTO37))
            GOTO42=false;
            GOTO28=false;
            GOTO32=false;
            if le(ILOSS,0) | ((GOTO38) | (GOTO37))
              GOTO42=true;
              if (GOTO38) | (GOTO37)
                GOTO42=false;
              end
              if not(GOTO42)
                if (GOTO37)
                  %37 CONTINUE
                  if eq(INX,0)
                    GOTO42=true;
                  end
                  if not(GOTO42)
                    fprintf('\\ END NUC \t END NUC \t
END NUC \t END NUC \t END NUC \t END NUC \t END NUC \t END NUC \n\\')
                    fprintf('\n')
                    fprintf(' PRECEEDING NUCLEATION RATE(%12.4E) LESS THAN(%12.4E) OF RECORDED
MAXIMUM RATE (%12.4E)\n NUCLEATION ENDED\n',RANUCC,RRMN,RNMX)
                    fprintf('\n')
                    fprintf('\n')
                    if ge(IPR,2)
                      %%CALL OUTPUT%%
[RKF1,RKF2,RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICALL,CAREA,RATEKF,RATEKT,ALPF,D
CSIL,DELTC,PKSIL,KRGC,CSIL,TPN,KPN,TSPEC,FLASH,GLASH,AH,TOTF,CSI,SML,FLCL,TEMPL,SILOUT,TEMP,T1,T
2,FLC,SILIN,DENS,EPSD,BDH,ADH,PKW,TC,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC
,GAMMA,RANUC,CLN,ALNT,TK,PHN,PH,AKSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATE
K,FKINL,CN]=OUTPUT(RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,DENSM,PI,UMASS,DENSN,PHI,GAMT,GAMC,AH,FLC
L,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,TEMPL,LNSC,CKB,FF,TSPEC,TREFV,FLASHR
V,PHRV,TEMPRV,NREF,TOTFI,CSII,SILOUT,SMLI,ICALL,ALN10,TCV,KSTP,NDP,DTP,CSILV,AKSIL,TEMP,PH,FLASH
,GLASH,FLC,SML,SCR,ANA,PHN,FPH,FINT,GAMZ,GAMMA,DQS,AKIN,DKIN,TOTF,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RAT
EKT,PKW,PKF,GSIL,GF,GNA,EPSD,DENS,ADH,BDH,CSILS,ALPSIL,CSI,SRA,SRR,RATEK,RDEPF,FKINL,RNUC,ANNU
C,ZLD,CN,QLP,QT,RANUC,TAUC,NCLC,CLRV,CLNV,PI4,SILIN,CLMV,KRGC,CSIL,ICX,DELTC,DCSIL,CLN,TC,TK,ALN
T,CAREA,T2,I1,I2,T1,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF);
                    end
                    INX=0;
                    GOTO28=true;
                  end
                end
                if not(GOTO28)
                  if (GOTO38)
                    %38
                               CONTINUE
                    if eq(INX,0)
                      GOTO42=true;
                    end
                    if not(GOTO42)
                      fprintf('\\ END NUC \t END NUC \t
```

END NUC \t END NUC \n\\')

ANEXO CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7

в

$fprintf('\n')$

fprintf(' MAXIMUM NUMBER OF COLLOID CLASSES REACHED. NUCLEATION ENDED

\n')

fprintf('\n') if ge(IPR,2) %%CALL OUTPUT%%

[RKF1,RKF2,RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICALL,CAREA,RATEKF,RATEKT,ALPF,D CSIL, DELTC, PKSIL, KRGC, CSIL, TPN, KPN, TSPEC, FLASH, GLASH, AH, TOTF, CSI, SML, FLCL, TEMPL, SILOUT, TEMP, T1, T 2,FLC,SILIN,DENS,EPSD,BDH,ADH,PKW,TC,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC ,GAMMA,RANUC,CLN,ALNT,TK,PHN,PH,AKSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATE K,FKINL,CN]=OUTPUT(RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,DENSM,PI,UMASS,DENSN,PHI,GAMT,GAMC,AH,FLC L,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,TEMPL,LNSC,CKB,FF,TSPEC,TREFV,FLASHR V,PHRV,TEMPRV,NREF,TOTFI,CSII,SILOUT,SMLI,ICALL,ALN10,TCV,KSTP,NDP,DTP,CSILV,AKSIL,TEMP,PH,FLASH ,GLASH,FLC,SML,SCR,ANA,PHN,FPH,FINT,GAMZ,GAMMA,DQS,AKIN,DKIN,TOTF,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RAT EKT,PKW,PKF,GSIL,GF,GNA,EPSD,DENS,ADH,BDH,CSILS,ALPSIL,CSI,SRA,SRR,RATEK,RDEPF,FKINL,RNUC,ANNU C,ZLD,CN,QLP,QT,RANUC,TAUC,NCLC,CLRV,CLNV,PI4,SILIN,CLMV,KRGC,CSIL,ICX,DELTC,DCSIL,CLN,TC,TK,ALN T,CAREA,T2,I1,I2,T1,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF);

end INX=0; GOTO28=true; end end end end CONTINUE if not((GOTO42)||(GOTO28)) if eq(INX,0) GOTO42=true; end if not(GOTO42) fprintf('\\ END NUC \t NUC \t END NUC \n\\') $fprintf('\n')$

fprintf(' DENUCLEATION STARTED AND NUCLEATION ENDED \n')

fprintf('\n') if ge(IPR,2)

end %43

%%CALL OUTPUT%%

[RKF1,RKF2,RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICALL,CAREA,RATEKF,RATEKT,ALPF,D CSIL,DELTC,PKSIL,KRGC,CSIL,TPN,KPN,TSPEC,FLASH,GLASH,AH,TOTF,CSI,SML,FLCL,TEMPL,SILOUT,TEMP,T1,T 2,FLC,SILIN,DENS,EPSD,BDH,ADH,PKW,TC,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC ,GAMMA,RANUC,CLN,ALNT,TK,PHN,PH,AKSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATE K,FKINL,CN]=OUTPUT(RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,DENSM,PI,UMASS,DENSN,PHI,GAMT,GAMC,AH,FLC L,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,TEMPL,LNSC,CKB,FF,TSPEC,TREFV,FLASHR V,PHRV,TEMPRV,NREF,TOTFI,CSII,SILOUT,SMLI,ICALL,ALN10,TCV,KSTP,NDP,DTP,CSILV,AKSIL,TEMP,PH,FLASH ,GLASH,FLC,SML,SCR,ANA,PHN,FPH,FINT,GAMZ,GAMMA,DQS,AKIN,DKIN,TOTF,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RAT EKT,PKW,PKF,GSIL,GF,GNA,EPSD,DENS,ADH,BDH,CSILS,ALPSIL,CSI,SRA,SRR,RATEK,RDEPF,FKINL,RNUC,ANNU C,ZLD,CN,QLP,QT,RANUC,TAUC,NCLC,CLRV,CLNV,PI4,SILIN,CLMV,KRGC,CSIL,ICX,DELTC,DCSIL,CLN,TC,TK,ALN T,CAREA,T2,I1,I2,T1,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF);

> end INX=0 GOTO28=true; end

ANEXO

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7

в

| end | |
|-------------------------------|---|
| end | |
| end | |
| end | |
| if not((GOTO28) (G | iOTO42)) |
| if not(GOTO6) | |
| if not(GOTO32) | |
| %9 CONTINU | E |
| fprintf('\\ SILO | OUT \t SILOUT \t |
| SILOUT \t SILOUT \t SILOUT | T \t SILOUT \t SILOUT \t SILOUT \\ \n') |
| fprintf('\n') | |
| fprintf(' SILIC/ | <pre>\ CONCENTRATION HAS DROPPED BELOW SILOUT = %8.4f \n',SILOUT)</pre> |
| fprintf('\n') | |
| if ge(IPR,2) | |
| %%CALL OU | JTPUT%% |
| [RKF1,RKF2,RCF,SMLI,CSII, | OTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICALL,CAREA,RATEKF,RATEKT,ALPF,D |
| CSIL, DELTC, PKSIL, KRGC, CSI | L,TPN,KPN,TSPEC,FLASH,GLASH,AH,TOTF,CSI,SML,FLCL,TEMPL,SILOUT,TEMP,T1,T |
| 2,FLC,SILIN,DENS,EPSD,BDF | 1,ADH,PKW,TC,FINT,FPH,CLKV,ZLD,QT,KNUC,SKK,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC |
| | , TK, PHN, PH, AKSIL, SCR, ANA, GAMZ, AKIN, DKIN, PKF, GSIL, GF, GNA, ALPSIL, SKA, KATE |
| | , KKZZ, KK31, KK32, KK41, KK42, DENSIVI, PI, UIVIASS, DENSIV, PII, GAIVIT, GAIVIC, AH, FLC |
| | C, DNINT, CNFT, TNFT, CNFZ, TNFZ, ALPHAN, TEIVIPL, LINSC, CNB, FF, TSPEC, TREFV, FLASHR |
| GLASH ELC SMI SCR ANA I | TI, CSII, SILOOT, SWILI, ICALL, ALINTO, ICV, KSTP, NDP, DTP, CSILV, AKSIL, ILIVIP, FTI, FLASH |
| EKT DKW DKE GSU GE GNA | |
| | ALIC NOLC CLRV CLNV PIA SILIN CLMV KRGC CSILICX DELTC DOSIL CLN TO TK ALN |
| T CARFA T2 11 12 T1 PHI PH | |
| end | |
| ICX=0; | |
| GOTO28=true | |
| end | |
| if not(GOTO28) | |
| %32 | CONTINUE |
| fprintf('\\ TIN | IEX \t TIMEX \t |
| TIMEX \t TIMEX \t TIMEX \ | t TIMEX \t TIMEX \t TIMEX \t TIMEX \\ \n') |
| fprintf('\n') | |
| fprintf(' MAXI | MUM TIME REACHED \n') |
| fprintf('\n') | |
| if ge(IPR,2) | |
| %%CALL OU | JTPUT%% |
| [RKF1,RKF2,RCF,SMLI,CSII,1 | OTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICALL,CAREA,RATEKF,RATEKT,ALPF,D |
| CSIL, DELTC, PKSIL, KRGC, CSI | L,TPN,KPN,TSPEC,FLASH,GLASH,AH,TOTF,CSI,SML,FLCL,TEMPL,SILOUT,TEMP,T1,T |
| 2,FLC,SILIN,DENS,EPSD,BDH | 1,ADH,PKW,TC,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC |
| GAMMA, RANUC, CLN, ALN | , TK, PHN, PH, AKSIL, SCR, ANA, GAMZ, AKIN, DKIN, PKF, GSIL, GF, GNA, ALPSIL, SRA, RATE |
| K,FKINL,CNJ=OUTPUT(RK21 | .,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,DENSM,PI,UMASS,DENSN,PHI,GAMT,GAMC,AH,FLC |
| | C,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,TEMPL,LNSC,CKB,FF,TSPEC,TREFV,FLASHR |
| V, FIRV, I EIVIPKV, NKEF, IUI | FI, CHI, SHUUT, SHILI, ICALL, ALINTU, ICV, NSTY, NDY, UTY, CHLV, AKSIL, TEMP, PH, FLASH |
| | |
| | ALIC NELECTION DI COLOSIONALI DI ANN KREE CSULICY DELTE DESUL EN TE TY ALM |
| T CAREA TO 11 10 T1 DHI DL | |
| ond | |

end ICX=0; GOTO28=true;

```
ANEXO
```

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7

в

```
end
             end
             if not(GOTO28)
                        CONTINUE
                 %6
                 fprintf('\\ CONEX \t 
\t CONEX \\ \n')
                 fprintf('\n')
                 fprintf(' MAXIMUM NUMBER OF CONDENSATION STEPS COMPLETED \n')
                 fprintf('\n')
                 if ge(IPR,2)
                     %%CALL OUTPUT%%
[RKF1,RKF2,RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICALL,CAREA,RATEKF,RATEKT,ALPF,D
CSIL, DELTC, PKSIL, KRGC, CSIL, TPN, KPN, TSPEC, FLASH, GLASH, AH, TOTF, CSI, SML, FLCL, TEMPL, SILOUT, TEMP, T1, T
2,FLC,SILIN,DENS,EPSD,BDH,ADH,PKW,TC,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC
,GAMMA,RANUC,CLN,ALNT,TK,PHN,PH,AKSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATE
K,FKINL,CN]=OUTPUT(RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,DENSM,PI,UMASS,DENSN,PHI,GAMT,GAMC,AH,FLC
L,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,TEMPL,LNSC,CKB,FF,TSPEC,TREFV,FLASHR
V,PHRV,TEMPRV,NREF,TOTFI,CSII,SILOUT,SMLI,ICALL,ALN10,TCV,KSTP,NDP,DTP,CSILV,AKSIL,TEMP,PH,FLASH
,GLASH,FLC,SML,SCR,ANA,PHN,FPH,FINT,GAMZ,GAMMA,DQS,AKIN,DKIN,TOTF,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RAT
EKT,PKW,PKF,GSIL,GF,GNA,EPSD,DENS,ADH,BDH,CSILS,ALPSIL,CSI,SRA,SRR,RATEK,RDEPF,FKINL,RNUC,ANNU
C,ZLD,CN,QLP,QT,RANUC,TAUC,NCLC,CLRV,CLNV,PI4,SILIN,CLMV,KRGC,CSIL,ICX,DELTC,DCSIL,CLN,TC,TK,ALN
T,CAREA,T2,I1,I2,T1,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF);
                 end
                 ICX=0;
                 GOTO28=true;
             end
          end
       end
       %5 CONTINUE
       if not((GOTO28)||(GOTO42))
          fprintf('\\ ALL GONE \t ALL GONE \t
ALL GONE \t ALL GONE \t ALL GONE \t ALL GONE \t ALL GONE \t ALL GONE \\ \n')
          fprintf('\n')
          fprintf(' ALL COLLOID CLASSES HAVE DISSOLVED AWAY. PROBLEM ENDED. \n')
          fprintf('\n')
          ICX=0;
          if ge(IPR,2)
             %%CALL OUTPUT%%
[RKF1,RKF2,RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICALL,CAREA,RATEKF,RATEKT,ALPF,D
CSIL,DELTC,PKSIL,KRGC,CSIL,TPN,KPN,TSPEC,FLASH,GLASH,AH,TOTF,CSI,SML,FLCL,TEMPL,SILOUT,TEMP,T1,T
2,FLC,SILIN,DENS,EPSD,BDH,ADH,PKW,TC,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC
,GAMMA,RANUC,CLN,ALNT,TK,PHN,PH,AKSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATE
K,FKINL,CN]=OUTPUT(RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,DENSM,PI,UMASS,DENSN,PHI,GAMT,GAMC,AH,FLC
L,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,TEMPL,LNSC,CKB,FF,TSPEC,TREFV,FLASHR
V,PHRV,TEMPRV,NREF,TOTFI,CSII,SILOUT,SMLI,ICALL,ALN10,TCV,KSTP,NDP,DTP,CSILV,AKSIL,TEMP,PH,FLASH
,GLASH,FLC,SML,SCR,ANA,PHN,FPH,FINT,GAMZ,GAMMA,DQS,AKIN,DKIN,TOTF,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RAT
EKT, PKW, PKF, GSIL, GF, GNA, EPSD, DENS, ADH, BDH, CSILS, ALPSIL, CSI, SRA, SRR, RATEK, RDEPF, FKINL, RNUC, ANNU
C,ZLD,CN,QLP,QT,RANUC,TAUC,NCLC,CLRV,CLNV,PI4,SILIN,CLMV,KRGC,CSIL,ICX,DELTC,DCSIL,CLN,TC,TK,ALN
T,CAREA,T2,I1,I2,T1,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF);
          end
       end
```

if not(GOTO42) %28 CONTINUE

```
ANEXO CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7
```

в

```
if lt(IPR,2)
        fprintf('KSTEP = %5d \t TCV(1) = %12.3E \t CSIL = %8.4f\n',KSTEP,TCV(1),CSILV(1))
      end
      if gt(ICX,0)
        %PRINT 1
        fprintf('KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RDEPF NUC.RATE CAREA NUC.FLUX
DEP.RATE ALPSILn')
      end
    end
    %42CONTINUE
    if eq(ICX,0)
      break
    end
    if gt(TCV(1),TCP)
      IPR=IPR2;
    end
    if ge(IPR,4)
      if ge(KSTEP,KPN)
        %%CALL OUTPUT%%
[RKF1,RKF2,RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICALL,CAREA,RATEKF,RATEKT,ALPF,D
CSIL, DELTC, PKSIL, KRGC, CSIL, TPN, KPN, TSPEC, FLASH, GLASH, AH, TOTF, CSI, SML, FLCL, TEMPL, SILOUT, TEMP, T1, T
2,FLC,SILIN,DENS,EPSD,BDH,ADH,PKW,TC,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC
,GAMMA,RANUC,CLN,ALNT,TK,PHN,PH,AKSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATE
K,FKINL,CN]=OUTPUT(RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,DENSM,PI,UMASS,DENSN,PHI,GAMT,GAMC,AH,FLC
L,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,TEMPL,LNSC,CKB,FF,TSPEC,TREFV,FLASHR
V,PHRV,TEMPRV,NREF,TOTFI,CSII,SILOUT,SMLI,ICALL,ALN10,TCV,KSTP,NDP,DTP,CSILV,AKSIL,TEMP,PH,FLASH
,GLASH,FLC,SML,SCR,ANA,PHN,FPH,FINT,GAMZ,GAMMA,DQS,AKIN,DKIN,TOTF,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RAT
EKT,PKW,PKF,GSIL,GF,GNA,EPSD,DENS,ADH,BDH,CSILS,ALPSIL,CSI,SRA,SRR,RATEK,RDEPF,FKINL,RNUC,ANNU
C,ZLD,CN,QLP,QT,RANUC,TAUC,NCLC,CLRV,CLNV,PI4,SILIN,CLMV,KRGC,CSIL,ICX,DELTC,DCSIL,CLN,TC,TK,ALN
T,CAREA,T2,I1,I2,T1,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF);
      end
      if ge(TCV(1),TPN)
        %%CALL OUTPUT%%
[RKF1,RKF2,RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICALL,CAREA,RATEKF,RATEKT,ALPF,D
CSIL, DELTC, PKSIL, KRGC, CSIL, TPN, KPN, TSPEC, FLASH, GLASH, AH, TOTF, CSI, SML, FLCL, TEMPL, SILOUT, TEMP, T1, T
2,FLC,SILIN,DENS,EPSD,BDH,ADH,PKW,TC,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC
,GAMMA,RANUC,CLN,ALNT,TK,PHN,PH,AKSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATE
K,FKINL,CN]=OUTPUT(RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,DENSM,PI,UMASS,DENSN,PHI,GAMT,GAMC,AH,FLC
L,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,TEMPL,LNSC,CKB,FF,TSPEC,TREFV,FLASHR
V,PHRV,TEMPRV,NREF,TOTFI,CSII,SILOUT,SMLI,ICALL,ALN10,TCV,KSTP,NDP,DTP,CSILV,AKSIL,TEMP,PH,FLASH
,GLASH,FLC,SML,SCR,ANA,PHN,FPH,FINT,GAMZ,GAMMA,DQS,AKIN,DKIN,TOTF,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RAT
EKT,PKW,PKF,GSIL,GF,GNA,EPSD,DENS,ADH,BDH,CSILS,ALPSIL,CSI,SRA,SRR,RATEK,RDEPF,FKINL,RNUC,ANNU
C,ZLD,CN,QLP,QT,RANUC,TAUC,NCLC,CLRV,CLNV,PI4,SILIN,CLMV,KRGC,CSIL,ICX,DELTC,DCSIL,CLN,TC,TK,ALN
T,CAREA,T2,I1,I2,T1,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF);
      end
    end
    %CONTINUE 4
  end
  %CONTINUE 8
 return
```

end

ANEXO CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7

в

function

[RKF1,RKF2,RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,ICALL,CAREA,RATEKF,RATEKT,ALPF,D CSIL,DELTC,PKSIL,KRGC,CSIL,TPN,KPN,TSPEC,FLASH,GLASH,AH,TOTF,CSI,SML,FLCL,TEMPL,SILOUT,TEMP,T1,T 2,FLC,SILIN,DENS,EPSD,BDH,ADH,PKW,TC,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC ,GAMMA,RANUC,CLN,ALNT,TK,PHN,PH,AKSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATE K,FKINL,CN]=**OUTPUT**(RK21,RK22,RK31,RK32,RK41,RK42,DENSM,PI,UMASS,DENSN,PHI,GAMT,GAMC,AH,FLC L,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,TEMPL,LNSC,CKB,FF,TSPEC,TREFV,FLASHR V,PHRV,TEMPRV,NREF,TOTFI,CSII,SILOUT,SMLI,ICALL,ALN10,TCV,KSTP,NDP,DTP,CSILV,AKSIL,TEMP,PH,FLASH ,GLASH,FLC,SML,SCR,ANA,PHN,FPH,FINT,GAMZ,GAMMA,DQS,AKIN,DKIN,TOTF,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RAT EKT,PKW,PKF,GSIL,GF,GNA,EPSD,DENS,ADH,BDH,CSILS,ALPSIL,CSI,SRA,SRR,RATEK,RDEPF,FKINL,RNUC,ANNU C,ZLD,CN,QLP,QT,RANUC,TAUC,NCLC,CLRV,CLNV,PI4,SILIN,CLMV,KRGC,CSIL,ICX,DELTC,DCSIL,CLN,TC,TK,ALN T,CAREA,T2,I1,I2,T1,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF)

TSPEC=TCV(1);

KPN=KSTP+NDP; TPN=TSPEC+DTP;

%CALL SPECIFY

[SMLI,CSII,TOTFI,I2,I1,ICALL,SILIN,FLC,T2,T1,CLNV,TEMP,SILOUT,TEMPL,FLCL,SML,CSI,TOTF,AH,PH,GLASH,FLA SH]=SPECIFY(ALN10,ICALL,SMLI,SILIN,SILOUT,CSII,TOTFI,NCLC,CLNV,NREF,TEMPRV,PHRV,FLASHRV,TREFV,TS PEC,PH,T2,I1,I2,TEMP,FLC,T1,TEMPL,FLCL,SML,CSI,TOTF,AH,GLASH,FLASH);

CSIL=CSILV(1);

KRGC=0;

%CALL SILKIN

PKSIL=-log10(AKSIL);

fprintf(' KSTEP = %5d \t TSPEC= %12.4E \t TEMP = %8.2f \t PH = %7.2f \n FLASH = %8.4f \t GLASH = %12.4E \t CSIL = %8.4f \t FLC = %8.4f \n\n\r,KSTP,TSPEC,TEMP,PH,FLASH,GLASH,CSIL,FLC)

fprintf(' SALT MOLALITY = %12.4E \t SOL. CORR. FACTOR = %8.4f \t SOD. ACT. = %13.4E \n PHN = %8.4f \t FPH = %8.4f \t FINT = %8.4f \n\n\n',SML,SCR,ANA,PHN,FPH,FINT)

 $fprintf('GAMZ = \%6.2f \ GAMMA = \%6.2f \ DQS = \% \ 10.3E \ KIN = \%7.3f \ DKIN = \%7.3f \ N/n/n', GAMZ, GAMMA, DQS, AKIN, DKIN)$

fprintf(' TOTF = %10.3E \t ALPF = %8.4f \t RKF1 = %10.3E \n RKF2 = %10.3E \t RATEKF = %10.3E \t RATEKT = %10.3E \n\n\n',TOTF,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RATEKT)

 $fprintf(' \ PKW = \%7.3f \ t \ PKSIL = \%7.3f \ t \ PKF = \%7.3f \ n \ GSIL = \%7.4f \ t \ GF = \%7.4f \ t \ GNA = \%7.4f \ n \ EPSD = \%6.2f \ t \ DENS = \%7.4f \ t \ ADH = \%7.4f \ t \ BDH = \%7.4f$

\n\n',PKW,PKSIL,PKF,GSIL,GF,GNA,EPSD,DENS,ADH,BDH)

fprintf(' CSILS = %7.4f \t ALPSIL = %7.4f \t CSI = %7.4f \t SRA = %8.4f \n SRR = %8.4f \t RATEK = %12.4E \t RDEPF = %12.4E \t FKINL = %12.4E \n\n\n',CSILS,ALPSIL,CSI,SRA,SRR,RATEK,RDEPF,FKINL) fprintf(' RNUC = %10.3E \t ANNUC = %10.3E \t ZLD = %10.3E \t CN = %10.3E \n QLP = %10.3E \t QT = %10.3E \t RANUC = %10.3E \t TAUC = %10.3E \n\n',RNUC,ANNUC,ZLD,CN,QLP,QT,RANUC,TAUC) if ne(ICX,0) SUMN=0;

SUMR=0;

CAREA=0;

```
ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN
                 HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS
                CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7
                                                                                       в
ANEXO
   AMC=0;
   for K=1:NCLC
%
       KPRINT(K)=K;
     CR=CLRV(K);
     CLN=CLNV(K);
     SUMN=SUMN+CLN;
     SUMR=SUMR+CLN*CR;
     CAREA=CAREA+PI4*CR*CR*CLN;
     AMC=AMC+CLMV(K);
   end
   %CONTINUE 13
       RCAV=SUMR/SUMN;
       ACAV=CAREA/SUMN;
       CMAV=AMC/SUMN;
       AMT=SILIN*FLC;
       AMTC=CSIL+AMC;
       DELM=AMTC-AMT;
   fprintf(' NCLC = %5d \t TOTAL NO. = %11.4E \t AREA = %11.4E \n AVER. RAD. = %12.4E \t AREA = %12.4E
\t MASS = %12.4E \n\n\n',NCLC,SUMN,CAREA,RCAV,ACAV,CMAV)
       DELM=DELM/AMT*100;
   fprintf(' COLL. MASS = %8.4f \t DIS. SIL. = %8.4f \t SUM = %8.4f \n SHOULD BE = %8.4f \t PERCENT DIF. =
%8.4f \n\n\n',AMC,CSIL,AMTC,AMT,DELM)
   KPRINT=1:NCLC;
   fprintf(' NUMBER OF PARTICLES IN EACH CLASS \n\n')
   DKP=NCLC/10;
   DKP=ceil(DKP);
       if gt(DKP,1)
     DKP=DKP-1;
     j=1;
     m=10;
     for k=1:DKP
       fprintf('%13.5E \t',CLNV(j:m))
       j=j+10;
       m=m+10;
       fprintf('\n')
     end
     fprintf('%13.5E \t',CLNV(j:NCLC))
   else
     fprintf('%13.5E \t',CLNV(1:NCLC))
   end
   fprintf('\n')
   f = figure('Position', [100 100 752 350]);
   set(f,'Name','PARTICLES 1')
   set(f,'NumberTitle','off')
   plot(KPRINT, CLNV(1:NCLC))
   xlabel('CLASS')
   ylabel('NUMBER OF PARTICLES')
   fprintf('\n\n')
   fprintf(' PARTICLE RADII \n\n')
```

```
DKP=NCLC/10;
```

```
DKP=ceil(DKP);
```

```
ANEXO CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7
```

if gt(DKP,1) DKP=DKP-1; j=1; m=10; for k=1:DKP fprintf('%13.5E \t',CLRV(j:m)) j=j+10; m=m+10; fprintf('\n') end fprintf('%13.5E \t',CLRV(j:NCLC)) else fprintf('%13.5E \t',CLRV(1:NCLC)) end $fprintf('\n')$ f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','PARTICLES 2') set(f,'NumberTitle','off') plot(KPRINT, CLRV(1:NCLC)) xlabel('CLASS') ylabel('RADII') fprintf('\n\n') fprintf(' TOTAL MASS IN EACH CLASS \n\n') DKP=NCLC/10; DKP=ceil(DKP); if gt(DKP,1) DKP=DKP-1; j=1; m=10; for k=1:DKP fprintf('%13.5E \t',CLMV(j:m)) j=j+10; m=m+10; fprintf('\n') end fprintf('%13.5E \t',CLMV(j:NCLC)) else fprintf('%13.5E \t',CLMV(1:NCLC)) end fprintf('\n') f = figure('Position', [100 100 752 350]); set(f,'Name','PARTICLES 3') set(f,'NumberTitle','off') plot(KPRINT, CLMV(1:NCLC)) xlabel('CLASS') ylabel('TOTAL MASS') $fprintf('\n\n')$ end % return

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS

ANEXO

CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7

в

```
end
```

function

[RCF,SMLI,CSII,TOTFI,CLP,KLP,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,I2,I1,CT,ICALL,CAREA,DCSIL,ALPF,RKF1,RKF2, RATEKF,RATEKT,CN,FKINL,RATEK,SRA,ALPSIL,GNA,GF,GSIL,PKF,DKIN,AKIN,GAMZ,ANA,SCR,AKSIL,PHN,TK,ALN T,CLN,GAMMA,TAUC,ANNUC,CSILS,RDEPF,SRR,RNUC,QT,ZLD,FPH,FINT,TC,PKW,ADH,BDH,EPSD,DENS,FLASH, GLASH,PH,AH,TOTF,CSI,SML,FLCL,TEMPL,SILOUT,TEMP,CLNV,T1,T2,FLC,SILIN,dat2,MaTPIot3,PKSTEP,PTIME, PCSIL,PSRR,PFLC,PTEMP,PPH,PPHN,PFPH,PRDEPF,PNUCRATE,PCAREA,PNUCFLUX,PDEPRATE,PALPSIL,CSFV,IL OSS,TCV,RANUC,CSILV,CFIM,LTD,LTH,TSPEC,KRGC,CSIL,CLRV,CLMV]=**DEPOSIT**(CSIL,KRGC,TSPEC,TEMP,FF,ICA LL,ALN10,SMLI,SILIN,SILOUT,CSII,TOTFI,NREF,TEMPRV,PHRV,FLASHRV,TREFV,CKB,LNSC,TEMPL,AK,EK,AKINC, AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,FLC,FLCL,SML,CSI,TOTF,AH,GAMC,GAMT,DQS,PHI,DENSN ,UMASS,PI,KSTP,CSILV,TCV,DELTC,GLASH,RK21,RK31,RK22,RK32,RK41,RK42,EPSIL,DENSM,PI4,NCLC,CLRV,RLI M,IPR,CLNV,CLP,CFIM,QLP,DCSIL,ALPF,DENS,CLN,CN,EPSD,BDH,ADH,PKW,TC,FPH,FINT,TK,ALNT,PH,RKF1,RKF 2,RATEKF,RATEKT,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,TAUC,GAMMA,RANUC,ANA,GSIL,ALPSIL,FKINL,AKS IL,GAMZ,AKIN,GF,SRA,PHN,SCR,DKIN,PKF,GNA,RATEK,EPR,CDP,KLP,KDP,TSTART,TAUCS,CAREA,INX,ICCL,CT,T 2,11,12,T1,FLASH,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,dat2,MaTPIot3,PKSTEP,PTIME,PCSIL,PSRR,PFLC,PTEMP,PPH,PPH N,PFPH,PRDEPF,PNUCRATE,PCAREA,PNUCFLUX,PDEPRATE,PALPSIL,RCF,CLMV,CSFV)

NCND=KSTP; CSIL=CSILV(1); CSILN=CSIL; TSPEC=TCV(1); for K=1:4 KRGC=K; if not(eq(KRGC,1)||eq(KRGC,3)) TSPEC=TSPEC+0.5*DELTC; %CALL SPECIFY

[SMLI,CSII,TOTFI,I2,I1,ICALL,SILIN,FLC,T2,T1,CLNV,TEMP,SILOUT,TEMPL,FLCL,SML,CSI,TOTF,AH,PH,GLASH,FLA SH]=SPECIFY(ALN10,ICALL,SMLI,SILIN,SILOUT,CSII,TOTFI,NCLC,CLNV,NREF,TEMPRV,PHRV,FLASHRV,TREFV,TS PEC,PH,T2,I1,I2,TEMP,FLC,T1,TEMPL,FLCL,SML,CSI,TOTF,AH,GLASH,FLASH);

end

%CONTINUE 38 DCSIL=CSILN*GLASH*DELTC; DCS=DCSIL;

%CALL SILKIN

[RCF,AH,FLCL,CLDV,LNSC,AKINP,AKF,PHL,PHNL,CAREA,DCSIL,DELTC,ALPF,RKF1,RKF2,RATEKF,RATEKT,DENS,E PSD,BDH,ADH,PKW,TC,FINT,FPH,CLRV,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,CLNV,TAUC,GAMMA,RANUC,C LN,ALNT,TK,PHN,PH,AKSIL,SCR,ANA,GAMZ,AKIN,DKIN,PKF,GSIL,GF,GNA,ALPSIL,SRA,RATEK,FKINL,CN]=SILKIN(ALN10,FF,TEMP,CKB,KRGC,LNSC,TEMPL,AK,EK,AKINC,AKINT,DKINC,DKINT,CKF1,TKF1,CKF2,TKF2,ALPHAK,FLC, FLCL,SML,CSI,TOTF,CSIL,AH,GAMC,GAMT,DQS,PHI,DENSN,UMASS,PI,DENSM,CLRV,PI4,RK21,RK22,RK31,RK32 ,RK41,RK42,CLNV,QLP,DELTC,NCLC,DCSIL,ALPF,DENS,CLN,CN,EPSD,BDH,ADH,PKW,FPH,FINT,ALNT,PH,RKF1,R KF2,RATEKF,RATEKT,ZLD,QT,RNUC,SRR,RDEPF,CSILS,ANNUC,TAUC,GAMMA,RANUC,ANA,GSIL,ALPSIL,FKINL,A KSIL,GAMZ,AKIN,GF,SRA,PHN,SCR,DKIN,PKF,GNA,RATEK,CAREA,PHL,PHNL,AKF,AKINP,CLDV,RCF);

```
DCSV(K)=DCSIL;

if eq(KRGC,1)

CSILN=CSIL+0.5*DCSIL;

end

if eq(KRGC,2)

CSILN=CSIL+RK21*DCSV(1)+RK22*DCSIL;

end

if eq(KRGC,3)

CSILN=CSIL+RK31*DCSV(2)+RK32*DCSIL;
```

ANEXO CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7

в

```
end
          end
          %CONTINUE 7
          CSILN=DCSV(1)+RK41*DCSV(2)+RK42*DCSV(3)+DCSV(4);
                                     CSILN=CSIL+CSILN/6;
                                     TCV(3)=TCV(2);
                                     TCV(2)=TCV(1);
                                     TCV(1)=TSPEC;
                                     if le(NCND,1)
                   CSILV(1)=CSIL;
                   DELSIL=CSILN-CSIL;
                  CSILV(2)=CSIL-DELSIL;
                   CSILV(3)=CSILV(2)-DELSIL;
          end
          %CONTINUE 11
                                     CSILV(3)=CSILV(2);
                                     CSILV(2)=CSILV(1);
                                     CSIL=CSILN;
                                     CSILP=CSILV(2);
                                     TESTH=(CSIL-CSILP)/CSILP;
                                     TESTH=abs(TESTH);
                                     CSILV(1)=CSIL;
                                     LTH=gt(TESTH,EPSIL);
                                     LTD=lt(2*TESTH,EPSIL);
                                     PREC=PI4/3.*DENSM;
                                     SUMCW=0;
                                     STEST=0;
                                     ILOSS=0;
                                     for K=1:NCLC
                  CR=CLRV(K);
                                     if ne(CR,0)
                                     CLM=PREC*CR^3*CLNV(K);
                            CLMV(K)=CLM;
                            if le(CR,0.2*RLIM)
                                     CSIL=CSIL+CLM;
                                     CSILV(1)=CSIL;
                                     ILOSS=ILOSS+1;
                                     if ge(IPR,5)
                                              fprintf(' DENUC \t DE
t DENUC \ DENUC \ n\n'
                                              fprintf(' A COLLOID CLASS HAS DENUCLEATED.\n K = %5d \t RADIUS = %12.4E \t NUMBER =
fprintf(' KSTEP = \%5d \t TCV(1) = \%12.3E \t CSIL = \%8.4f \n\n',KSTP,TCV(1),CSIL)
                                              fprintf(' DENUC \t DE
t DENUC \ DENUC \ n\n')
                                     end
                                     %CONTINUE 3
                                     CR=0;
                                     CLNV(K)=0;
                                     CLRV(K)=0;
                                     CLMV(K)=0;
                            end
                            %CONTINUE 43
```

```
ANEXO CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7
```

в

```
if gt(CR,0.2*RLIM)
     KK=K+300;
     CRP=CLRV(KK);
     TESTH=(CR-CRP)/CRP;
     TESTH=abs(TESTH);
     SUMCW=SUMCW+CLM;
     STEST=STEST+CLM*TESTH;
   end
 end
end
%CONTINUE 14
     if le(SUMCW,0)
 ILOSS=-1;
 return
end
%CONTINUE 2
     TESTH=STEST/SUMCW;
LTH=LTH || gt(TESTH,EPR);
     LTD=LTD && It(2.*TESTH,EPR);
     if ge(IPR,1)
 if not(gt(CSILV(1),(CLP-CDP)) && lt(NCND,(KLP+KDP)))
   ARG=-(TCV(1)-TSTART)/TAUCS;
   RANUCC=RANUC*(1-exp(ARG));
   FMN=PI4*DENSM/3*RNUC^3*RANUCC;
   FMC=-(DCSV(4)-DCS)/DELTC;
   CT=CT+1;
   PKSTEP(CT)=NCND;
   dat2(CT,1)={PKSTEP(CT)};
   %
   PTIME(CT)=TCV(1);
   dat2(CT,2)={PTIME(CT)};
   %
   PCSIL(CT)=CSILV(1);
   dat2(CT,3)={PCSIL(CT)};
   %
   PSRR(CT)=SRR;
   dat2(CT,4)={PSRR(CT)};
   %
   PFLC(CT)=FLC;
   dat2(CT,5)={PFLC(CT)};
   %
   PTEMP(CT)=TEMP;
   dat2(CT,6)={PTEMP(CT)};
   %
   PPH(CT)=PH;
   dat2(CT,7)={PPH(CT)};
   %
   PPHN(CT)=PHN;
   dat2(CT,8)={PPHN(CT)};
   %
   PFPH(CT)=FPH;
   dat2(CT,9)={PFPH(CT)};
```

```
ANEXO CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7
```

```
%
     PRDEPF(CT)=RDEPF;
     dat2(CT,10)={PRDEPF(CT)};
     %
     PNUCRATE(CT)=RANUCC;
     dat2(CT,11)={PNUCRATE(CT)};
     %
     PCAREA(CT)=CAREA;
     dat2(CT,12)={PCAREA(CT)};
     %
     PNUCFLUX(CT)=FMN;
     dat2(CT,13)={PNUCFLUX(CT)};
     %
     PDEPRATE(CT)=FMC;
     dat2(CT,14)={PDEPRATE(CT)};
     %
     PALPSIL(CT)=ALPSIL;
     dat2(CT,15)={PALPSIL(CT)};
     MaTPlot2=[NCND; TCV(1); CSILV(1); SRR; FLC; TEMP; PH; PHN; FPH; RDEPF; RANUCC; CAREA; FMN;
FMC; ALPSIL];
     MaTPlot3=[PKSTEP; PTIME; PCSIL; PSRR; PFLC; PTEMP; PPH; PPHN; PFPH; PRDEPF; PNUCRATE;
PCAREA; PNUCFLUX; PDEPRATE; PALPSIL];
     dat2;
     %
     %IMPRESION EN PANTALLA
     MatPlot2=fopen('matplot2.txt','w');
     fprintf(MatPlot2,'%5s %7s %8s %6s %6s %6s %5s %6s %5s %9s %11s %9s %11s %11s
%9s\n','KSTEP','TIME','CSIL','SRR','FLC','TEMP','PH','PHN','FPH','RDEPF','NUC. RATE','CAREA','NUC.
FLUX', 'DEP. RATE', 'ALPSIL');
     fprintf(MatPlot2,'%5d %11.3E %7.4f %7.4f %7.4f %7.2f %6.2f %6.2f %7.4f %11.3E %11.3E %11.3E
%11.3E %11.3E %12.4E\n',MaTPlot2);
     fclose(MatPlot2);
     type matplot2.txt
     RANUC=0;
     CLP=CSILV(1);
     KLP=NCND;
   end
  end
  %CONTINUE 5
       if eq(INX,0)
   return
  end
       if lt((NCND-ICCL),3)
   T2=TCV(2)-TSPEC;
   T3=TCV(3)-TSPEC;
   D=T2*T3*(T3-T2);
   CFIM(2,1)=(T2*T2-T3*T3)/D;
   CFIM(2,2)=T3*T3/D;
   CFIM(2,3)=-T2*T2/D;
   CFIM(3,1)=(T3-T2)/D;
   CFIM(3,2) = -T3/D;
```

в

```
ANEXO CODIGO SILNUC ACTUALIZADO Y MEJORADO EN MATLAB 7
```

В

```
CFIM(3,3)=T2/D;
end
%CONTINUE 17
CS1=CSILV(1);
CS2=CSILV(2);
CS3=CSILV(3);
CSFV(1)=CFIM(1,1)*CS1+CFIM(1,2)*CS2+CFIM(1,3)*CS3;
CSFV(2)=CFIM(2,1)*CS1+CFIM(2,2)*CS2+CFIM(2,3)*CS3;
CSFV(3)=CFIM(3,1)*CS1+CFIM(3,2)*CS2+CFIM(3,3)*CS3;
if lt(IPR,6)
return
end
fprintf(' %5d \t %12.4 \t %12.4 \t %12.4 \n\n\n',NCND,TCV,CSILV,CSFV)
return
end
```

function [falg10] = ALG10(X)
ALN10=log(10);
falg10=exp(ALN10*X);
end

```
function [fcsf] = CSF(DT,CSFV)
fcsf=CSFV(1)+CSFV(2)*DT+CSFV(3)*DT*DT;
end
```

| | | DE LO | ACTUA OS PROCESOS DI | ALIZACIÓN DEL CÓDIGO SIL E NUCLEACIÓN HOMOGÉNE | NUC EN MATLA A Y DEPOSICIÓN I | AB PARA LA MODELAC MOLECULAR DE SÍLICE | IÓN NUMÉRICA E EN SISTEMAS GEOTÉRMI | cos | |
|------------------------------------|---------------------|------------------|-------------------------|---|----------------------------------|---|--|-----|----------|
| | ANE | XO | RESUI | LTADOS EN VENTAI | NA DE COMA | ANDOS — SILNU | C – MATLAB 7 | С | |
| 📣 Command Window | / | | | | | | | | |
| <u>File E</u> dit De <u>b</u> ug [| esktop <u>W</u> ind | dow <u>H</u> elp | | | | | | | |
| Seleccione form | na de Lect | ura de da | tos en interf | faz o manual(previo ing | reso de datos | al codigo) [O=int | erfaz / 1=manual]= 1 | | |
| NREF = 13 | NCLC = | 2 | INX = 1 | IPR = 3 | IPR2 = | 3 | | | |
| KDP = 10 | NDP = | 50 | ITPM = 0 | IMAX = 1000 | IHCMA = | 0 | | | |
| IHCMI = 0 | IDH = | 0 | IMAXM = 0 | DTPM = 1.000E+000 | DHCMA = | 4.000E+000 | | | |
| DHCMI = 2.0481 | C+003 | | DDH = 6.400E | E+001 | TMAXM = | 6.400E+001 | | | |
| SILIN = 0.59 | 70 | SILOUT = | • 0.2500 F | PHI = 0.9200 | SMLI = 1.80 | 00E-001 | | | |
| TOTFI = 6.0000 |)E-004 | CSII = | 0.0075 1 | TCP = 1.0000E+010 | CDP = 0.00 | 10 | | | |
| | MONOS | SILICIC AC | ID BUFFERING | IS ASSUMED | | | | | |
| | | | | | | | | | |
| TREF | FLASH | TEMP | PH | | | | | | |
| 0.0000 | 0.0000 | 300.0000 | 0.0000 | | | | | | |
| 0.2500 | 0.0850 | 275.0000 | 0.0000 | | | | | | |
| 0.5000 | 0.1510 | 250.0000 | 0.0000 | | | | | | |
| 0.7500 | 0.2060 | 225.0000 | 0.0000 | | | | | | |
| 1.0000 | 0.2540 | 200.0000 | 0.0000 | | | | | | |
| 1.5000 | 0.2970 | 175.0000 | 0.0000 | | | | | | |
| 1.7500 | 0.3370 | 130.0000 | 0.0000 | | | | | | |
| 2.2500 | 0.3070 | 100 0000 | 0.0000 | | | | | | |
| 12 7500 | 0.4100 | 100.0000 | 0.0000 | | | | | | |
| 17.7500 | 0.4100 | 75.0000 | 0.0000 | | | | | | |
| 27.7500 | 0.4100 | 50.0000 | 0.0000 | | | | | | |
| 77.7500 | 0.4100 | 30.0000 | 0.0000 | | | | | | |
| ***** | * * * * * * * * * * | ****** | ****** | * | ****** | ***** | ***** | | |
| ****** | * * * * * * * * * * | ******* | *********** | ******************** | ****** | ***** | * * * * * * * * * * * * * * * * * * * | | |
| K R. | ADIO | MASA | NUMERO | | | | | | |
| 1 3.5000E- | -007 5.00 | 00E-003 | 1.2603E+016 | | | | | | |
| 2 7.0000E- | -007 5.00 | 00E-003 | 1.5754E+015 | | | | | | |
| ***** | ******* | ******* | ****** | * | ****** | ***** | * * * * * * * * * * * * * * * * * * * | | 1 |
| | | | | | | | | | <u>}</u> |

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS ANEXO RESULTADOS EN VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – MATLAB 7 С 📣 Command Window File Edit Debug Desktop Window Help э ٠ KNUC = 58 ANNUC = 57.8 AN = 77.5 ZLD = 2.5324E-002 RLIM = 9.4192E-008 TAUN = 1.4975E+000 TAUD = 2.5968E+001 TAU = 1.4975E+000 RTAU = 2.0000E+000 HCMA = 5.0000E-001 HCMI = 9.7656E-004 DELTH = 2.3399E-002 TCMA = 7.7750E+001 DTP = 1.4975E+000 NDP = 50 D LOG10 TAU/D GAMMA^3 = 4.58307E-005 RECIPROCAL = 2.18194E+004 GAMMA = 36.29 GAMMA CUBED = 4.77743E+004 4

Actualización del código SILNUC en MATLAB para la modelación numérica de los procesos de nucleación homogénea y deposición molecular de sílice en sistemas geotérmicos ANEXO RESULTADOS EN VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – MATLAB 7 C

🙏 Command Window File Edit Debug Desktop Window Help * KSTEP = 0 TSPEC= 2.2500E+000 TEMP = 125.00 PH = 6.88 FLASH = 0.3870 GLASH = 7.5041E-002 CSIL = 0.9739 FLC = 1.6313 SALT MOLALITY = 2.9364E-001 SOL. CORR. FACTOR = 1.0098 SOD. ACT. = 1.9541E-001 PHN = 7.3327 FPH = 1.2019 FINT = 0.0911 GAMZ = 44.17 GAMMA = 36.29 DQS = 6.840E+014 AKIN = 1.942 DKIN = 1.000 TOTF = 9.788E-004 ALPF = 0.9989 RKF1 = 2.639E - 002RKF2 = 2.110E+000 RATEKF = 2.063E-003 RATEKT = 2.117E-008 PKW = 11.912 PKSIL = 8.975 PKF = 4.085 GSIL = 0.6326 GF = 0.6853 GNA = 0.6655 EPSD = 49.26 DENS = 0.9390 ADH = 0.6439 BDH = 0.3480 SRR = 2.0102 RATEK = 2.5486E-008 RDEPF = 3.9814E-007 FKINL = 5.9629E-008 RNUC = 8.540E-008 ANNUC = 5.776E+001 ZLD = 2.532E-002 CN = 7.278E+002 QLP = 3.340E+025 QT = 5.829E+016 RANUC = 1.074E+018 TAUC = 5.357E-001 NCLC = 3 TOTAL NO. = 2.3130E+016 AREA = 4.7474E+004 AVER. RAD. = 3.8889E-007 AREA = 2.0525E-012 MASS = 7.0529E-019 COLL. MASS = 0.0163 DIS. SIL. = 0.9739 SUM = 0.9902 SHOULD BE = 0.9902 PERCENT DIF. = 0.0000

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS

| | ANEXO | RESULTADOS EN VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – MATLAB 7 | С |
|--|-------------------------------|---|----------|
| 📣 Command Window | | | |
| <u>File E</u> dit De <u>b</u> ug <u>D</u> esktop | p <u>W</u> indow <u>H</u> elp | | لار ا |
| NUMBER OF PARTICLE | ES IN EACH CLASS | | <u> </u> |
| 2.05598E+016 2. | .56998E+015 1.000 | 000E+000 | |
| PARTICLE RADII | | | |
| 3.50000E-007 7. | .00000E-007 9.419 | 23E-008 | |
| TOTAL MASS IN EACH | H CLASS | | |
| 8.15661E-003 8. | .15661E-003 7.732 | 72E-021 | |
| · · · · · · · · · · · · · · · · · · · | | | |

| | | | | DE LOS | PROCES | OS DE N | | | ÉNEA Y D | | | DE SÍLICE | EN SISTEM | IAS GEOTÉRMI | COS | _ | |
|-------------------|----------------|----------------------------|-------------|---------------|---------------|-----------------|-------------|----------------|---------------|--------------------|------------------|-----------------|-------------------|-------------------------|-------------------------|--------------------|--|
| | | AN | IEXO | | RE | SULT | ADOS | EN VEN | TANA I | DE COMA | NDOS — | SILNU | С — МАТ | LAB 7 | C | 2 | |
| 🍂 Comma | and Wine | dow | | | | | | | | | | | | | | | |
| <u>File E</u> dit | De <u>b</u> ug | <u>j D</u> esktop <u>W</u> | indow | <u>H</u> elp | | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL SRR | FLC | TEMP | PH PHI | FPH | RDEPF | NUC.RATE | CAREA | NUC.FLUX | DEP.RATE | ALPSIL | | | | | |
| KSTEP 1 | TI 2.251 | ME CS E+000 0.9 | IL 740 2 | SRR 2.0113 | FLC 1.6314 | TEMP 124.9 | PH 5 6.8 | I PHN 87.33 | FPH 1.2023 | RDEPF 3.982E-OC | NUC. R 1.957E | ATE +015 4.7 | CAREA 752E+004 | NUC. FLUX 1.128E-005 | DEP. RATE 1.892E-002 | ALPSIL 1.2564E-002 | |
| NEW DEL | TC = | 1.9531E-0 | 03 | AT KS | TEP = | 1 | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL SRR | FLC | TEMP | рн рни | г грн | RDEPF | NUC.RATE | CAREA | NUC.FLUX | DEP.RATE | ALPSIL | | | | | |
| NEW DEL | TC = | 3.9063E-0 | 03 | AT KS | TEP = | 2 | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL SRR | FLC | TEMP | PH PH | I FPH | RDEPF | NUC.RATE | CAREA | NUC.FLUX | DEP.RATE | ALPSIL | | | | | |
| NEW DEL | TC = | 7.8125E-0 | 03 | AT KS | TEP = | 3 | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL SRR | FLC | TEMP | PH PH | Г ГРН | RDEPF | NUC.RATE | CAREA | NUC.FLUX | DEP.RATE | ALPSIL | | | | | |
| NEW DEL | TC = | 1.5625E-0 | 02 | AT KS | TEP = | 4 | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL SRR | FLC | TEMP | PH PH | І FPH | RDEPF | NUC.RATE | CAREA | NUC.FLUX | DEP.RATE | ALPSIL | | | | | |
| NEW DEL | TH = | 2.3219E-0 | 02 | TAUCS | = 5.35 | 67 E -00 | 1 AT | TCV = 2 | .2803E+0 | 000 THN = | 2.2733E | +000 | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL SRR | FLC | TEMP | PH PH | I FPH | RDEPF | NUC.RATE | CAREA | NUC.FLUX | DEP.RATE | ALPSIL | | | | | |
| NEW DEL | TH = | 1.9916E-0 | 02 | TAUCS | = 5.18 | 77E-00 | 1 AT | TCV = 2 | .2959E+0 | 000 THN = | 2.2949E | +000 | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL SRR | FLC | TEMP | рн рні | Г ГРН | RDEPF | NUC.RATE | CAREA | NUC.FLUX | DEP.RATE | ALPSIL | | | | | |
| NEW DEL | TH = | 1.7361E-0 | 02 | TAUCS | = 5.04 | 95E-00 | 1 A7 | TCV = 2 | .3271E+0 |)00 THN = | 2.3135E | +000 | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL SRR | FLC | TEMP | PH PH | I FPH | RDEPF | NUC.RATE | CAREA | NUC.FLUX | DEP.RATE | ALPSIL | | | | | |
| NEW DEL | TH = | 1.5550E-0 | 02 | TAUCS | = 4.94 | 31 E- 00 | 1 AT | TCV = 2 | .3428E+0 |)00 THN = | 2.3300E | +000 | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL SRR | FLC | TEMP | PH PH | Г ГРН | RDEPF | NUC.RATE | CAREA | NUC.FLUX | DEP.RATE | ALPSIL | | | | | |
| NEW DEL | TH = | 1.4175E-0 | 02 | TAUCS | = 4.85 | 89E-00 | 1 AT | TCV = 2 | .3584E+0 | 000 THN = | 2.3448E | +000 | | | | | |

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS

ANEXO

RESULTADOS EN VENTANA DE COMANDOS — SILNUC — MATLAB 7

С

🙏 Command Window File Edit Debug Desktop Window Help KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PHNFPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL PH 11 2.374E+000 0.9800 2.1612 1.6466 118.80 6.91 7.37 1.2520 4.052E-007 2.235E+018 6.013E+004 1.060E-002 2.436E-002 1.2612E-002 NEW DELTH = 1.3091E-002 TAUCS = 4.7905E-001AT TCV = 2.3740E+000 THN = 2.3585E+000 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RDEPF NUC.RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL NEW DELTH = 1.1440E-002TAUCS = 4.6852E-001 AT TCV = 2.3896E+000 THN = 2.3838E+000 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RDEPF NUC.RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL NEW DELTH = 1.0832E-002 TAUCS = 4.6496E-001AT TCV = 2.4053E+000 THN = 2.3950E+000 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RDEPF NUC.RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL NEW DELTH = 1.0334E-002 TAUCS = 4.6197E-001AT TCV = 2.4209E+000 THN = 2.4055E+000 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RDEPF NUC.RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL NEW DELTH = 9.4912E-003 TAUCS = 4.5735E-001 AT TCV = 2.4365E+000 THN = 2.4258E+000 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RDEPF NUC.RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP ΡH PHNFPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL 16 2.452E+000 0.9787 2.2546 1.6564 114.89 6.93 7.40 1.2888 3.917E-007 1.773E+019 1.425E+005 7.145E-002 5.580E-002 1.2698E-002 NEW DELTH = 8.8970E-003 TAUCS = 4.5609E-001AT TCV = 2.4521E+000 THN = 2.4445E+000 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RDEPF NUC.RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL NEW DELTH = 8.7108E-003 TAUCS = 4.5682E-001 AT TCV = 2.4678E+000 THN = 2.4533E+000 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RDEPF NUC.RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL

Actualización del código SILNUC en MATLAB para la modelación numérica de los procesos de nucleación homogénea y deposición molecular de sílice en sistemas geotérmicos

ANEXO

•

RESULTADOS EN VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – MATLAB 7

| <u>File E</u> dit [KSTEP 18 2. | a window De <u>bug D</u> eskta TIME | op <u>W</u> indow | <u>H</u> elp | | | | | | | | | | | |
|---------------------------------------|---|-------------------|---------------|---------------|------------------|------------|-------------|---------------|---------------------|-------------------------|---------------------|-------------------------|-------------------------|-----------------------|
| KSTEP 18 2. | TIME | | | | | | | | | | | | | |
| STEP 18 2. | TIME | | | | | | | | | | | | | |
| | .483E+000 | CSIL 0.9756 | SRR 2.2879 | FLC 1.6604 | TEMP 113.33 | PH 6.94 | PHN 7.41 | FPH 1.3057 | RDEPF 3.814E-007 | NUC. RATE 2.821E+019 | CAREA 2.115E+005 | NUC. FLUX 1.093E-001 | DEP. RATE 8.068E-002 | ALPSIL 1.2764E-002 |
| EW DELTH | H = 8.304 | 9E-003 | TAUCS | = 4.569 | 99E-001 | AT T | CV = 2 | .4834E+0 | 000 THN = | 2.4705E+000 | | | | |
| STEP TI | IME CSIL | SRR FLO | С ТЕМР | PH PHN | FPH | RDEPF N | UC.RATE | CAREA | NUC.FLUX 1 | DEP.RATE ALF | SIL | | | |
| STEP 19 2. | TIME .499E+000 | CSIL 0.9725 | SRR 2.3015 | FLC 1.6624 | TEMP 112.55 | PH 6.95 | PHN 7.42 | FPH 1.3152 | RDEPF 3.742E-007 | NUC. RATE 3.508E+019 | CAREA 2.687E+005 | NUC. FLUX 1.331E-001 | DEP. RATE 1.005E-001 | ALPSIL 1.2816E-002 |
| EW DELTH | H = 8.067 | 1E-003 | TAUCS | = 4.610 | 09E-001 | AT T | CV = 2 | .4990E+0 | 000 THN = | 2.4870E+000 | | | | |
| STEP TI | IME CSIL | SRR FL | C TEMP | PH PHN | FPH | RDEPF N | UC.RATE | CAREA | NUC.FLUX 1 | DEP.RATE ALF | PSIL | | | |
| STEP 20 2. | TIME .515E+000 | CSIL 0.9686 | SRR 2.3135 | FLC 1.6644 | TEMP 111.77 | PH 6.96 | PHN 7.42 | FPH 1.3254 | RDEPF 3.660E-007 | NUC. RATE 4.180E+019 | CAREA 3.365E+005 | NUC. FLUX 1.559E-001 | DEP. RATE 1.232E-001 | ALPSIL 1.2878E-002 |
| EW DELTH | H = 7.920 | 3 E -003 | TAUCS | = 4.670 | DOE-001 | AT T | CV = 2 | .5146E+O | 000 THN = | 2.5030E+000 | | | | |
| STEP TI | IME CSIL | SRR FLO | C TEMP | PH PHN | FPH | RDEPF N | UC.RATE | CAREA | NUC.FLUX 1 | DEP.RATE ALF | SIL | | | |
| STEP 21 2. | TIME .530E+000 | CSIL 0.9639 | SRR 2.3237 | FLC 1.6664 | TEMP 110.99 | РН 6.96 | PHN 7.43 | FPH 1.3361 | RDEPF 3.569E-007 | NUC. RATE 4.796E+019 | CAREA 4.149E+005 | NUC. FLUX 1.763E-001 | DEP. RATE 1.481E-001 | ALPSIL 1.2950E-002 |
| JEW DELTH | H = 7.857 | 0E-003 | TAUCS | = 4.750 | 02 E- 001 | AT T | CV = 2 | .5303E+0 | 000 THN = | 2.5189E+000 | | | | |
| STEP TI | IME CSIL | SRR FL | C TEMP | PH PHN | FPH | RDEPF N | UC.RATE | CAREA | NUC.FLUX 1 | DEP.RATE ALF | SIL | | | |
| KSTEP 22 2. | TIME .546E+000 | CSIL 0.9585 | SRR 2.3322 | FLC 1.6684 | TEMP 110.21 | PH 6.97 | PHN 7.44 | FPH 1.3475 | RDEPF 3.471E-007 | NUC. RATE 5.321E+019 | CAREA 5.034E+005 | NUC. FLUX 1.933E-001 | DEP. RATE 1.747E-001 | ALPSIL 1.3033E-002 |

С

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS

RESULTADOS EN VENTANA DE COMANDOS – SIL NUC – MATLAB 7

ANEXO С 📣 Command Window File Edit Debug Desktop Window Help KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PHN FPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL ΡH 23 2.562E+000 0.9523 2.3389 1.6704 109.42 6.98 7.45 1.3596 3.365E-007 5.809E+019 6.023E+005 2.092E-001 2.027E-001 1.3128E-002 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHNFPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL 24 2.577E+000 0.9454 2.3437 1.6724 108.64 6.99 7.46 1.3723 3.253E-007 6.170E+019 7.103E+005 2.207E-001 2.310E-001 1.3234E-002 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP ΡH PHN FPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL 1.3856 3.137E-007 6.397E+019 8.255E+005 25 2.593E+000 0.9378 2.3470 1.6744 107.86 6.99 7.46 2.277E-001 2.589E-001 1.3350E-002 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP ΡH $\rm P\,H\!N$ FPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL 26 2.608E+000 0.9297 2.3489 1.6764 107.08 7.00 7.47 1.3994 3.018E-007 6.496E+019 9.463E+005 2.306E-001 2.856E-001 1.3476E-002 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP ΡH PHN FPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL 1.4138 2.898E-007 6.482E+019 1.071E+006 2.299E-001 3.104E-001 1.3610E-002 27 2.624E+000 0.9213 2.3495 1.6784 106.30 7.01 7.48 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP ΡH PHN FPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL 28 2.640E+000 0.9125 2.3492 1.6805 105.52 7.02 7.49 1.4285 2.778E-007 6.378E+019 1.198E+006 2.262E-001 3.329E-001 1.3752E-002 KSTEP TIME CSIL SRR FLCTEMP ΡH PHN FPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL 29 2.655E+000 0.9035 2.3481 1.6825 104.74 7.03 7.50 1.4437 2.660E-007 6.207E+019 1.326E+006 2.204E-001 3.528E-001 1.3900E-002 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP ΡH PHN FPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL 30 2.671E+000 0.8943 2.3464 1.6845 103.96 7.04 7.51 1.4592 2.544E-007 5.990E+019 1.454E+006 2.131E-001 3.700E-001 1.4054E-002 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP ΡH PHN FPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL 31 2.687E+000 0.8851 2.3442 1.6866 103.17 7.05 7.52 1.4751 2.430E-007 5.747E+019 1.582E+006 2.050E-001 3.844E-001 1.4213E-002

*

| Actualización del código SILNUC en MATLAB para la modelación numérica |
|--|
| DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS |

ANEXO RESULTADOS EN VENTANA DE COMANDOS - SILNUC - MATLAB 7 С 🙏 Command Window _ 0 × File Edit Debug Desktop Window Help KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PHNFPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL ΡH 32 2.702E+000 0.8758 2.3417 1.6886 102.39 7.06 7.53 1.4912 2.320E-007 5.493E+019 1.708E+006 1.964E-001 3.963E-001 1.4377E-002 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP ΡH PHN FPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL 33 2.718E+000 0.8666 2.3390 1.6907 101.61 7.07 7.55 1.5075 2.214E-007 5.239E+019 1.832E+006 1.879E-001 4.056E-001 1.4544E-002 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP ΡH PHN FPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL 2.3361 1.6927 100.83 7.56 1.5240 2.111E-007 4.993E+019 1.955E+006 1.796E-001 4.127E-001 1.4715E-002 34 2.733E+000 0.8574 7.08 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP ΡH $\rm P\,H\!N$ FPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL 35 2.749E+000 0.8483 2.3331 1.6948 100.05 7.09 7.57 1.5408 2.013E-007 4.761E+019 2.075E+006 1.717E-001 4.176E-001 1.4889E-002 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP ΡH $\rm P\,H\!N$ FPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL 36 2.765E+000 0.8384 2.3096 1.6949 100.00 7.09 7.58 1.5533 1.941E-007 4.548E+019 2.190E+006 1.644E-001 4.251E-001 1.5048E-002 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP ΡH PHN FPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL 37 2.780E+000 0.8287 2.2833 1.6949 100.00 7.10 7.58 1.5613 1.860E-007 3.621E+019 2.298E+006 1.343E-001 4.276E-001 1.5219E-002 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP ΡH PHNFPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL 38 2.796E+000 0.8198 2.2587 1.6949 100.00 7.10 7.58 1.5689 1.785E-007 2.551E+019 2.392E+006 9.799E-002 4.270E-001 1.5382E-002 KSTEP TIME CSIL FLC PHN FPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE SRR TEMP PH ALPSIL 7.59 1.5760 1.715E-007 1.822E+019 2.474E+006 7.232E-002 4.244E-001 1.5537E-002 39 2.812E+000 0.8116 2.2358 1.6949 100.00 7.11 KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL 40 2.827E+000 0.8039 2.2142 1.6949 100.00 7.11 7.59 1.5828 1.650E-007 1.310E+019 2.548E+006 5.369E-002 4.204E-001 1.5686E-002 **4**

э * Actualización del código SILNUC en MATLAB para la modelación numérica de los procesos de nucleación homogénea y deposición molecular de sílice en sistemas geotérmicos

| | | ANEX | 0 | RE | SULTAI | DOS EI | N VEN | ITANA E | DE COMAN | DOS — SILI | NUC — MAT | LAB 7 | С | | |
|-------------------------|--------------------------------|-------------------|----------------|---------|--------|------------|-------|---------------|---------------------|-------------------------|---------------------|-------------------------|------------|-----------------------|--|
| A Com | and Window | | | | | | | | | | | | | | _ 0 <u>_x</u> |
| <u>File</u> <u>E</u> di | t De <u>b</u> ug <u>D</u> eskt | op <u>W</u> indov | v <u>H</u> elp | | | | | | | | | | | | <u>ر الم الم الم الم الم الم الم الم الم الم</u> |
| | | | | | | | | | | | | | | | _ |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 41 | 2.843E+000 | 0.7966 | 2.1936 | 1.6949 | 100.00 | 7.12 | 7.60 | 1.5894 | 1.587E-007 | 9.457E+018 | 2.616E+006 | 3.996E-002 | 4.152E-001 | 1.5831E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 42 | 2.858E+000 | 0.7895 | 2.1739 | 1.6949 | 100.00 | 7.12 | 7.60 | 1.5958 | 1.527E-007 | 6.836E+018 | 2.679E+006 | 2.976E-002 | 4.092E-001 | 1.5972E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 43 | 2.874£+000 | 0.7828 | 2.1549 | 1.6949 | 100.00 | 7.12 | 7.61 | 1.6020 | 1.470E-007 | 4.939E+018 | 2.738E+006 | 2.215E-002 | 4.025E-001 | 1.6111E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 44 | 2.890E+000 | 0.7763 | 2.1366 | 1.6949 | 100.00 | 7.13 | 7.61 | 1.6080 | 1.415E-007 | 3.565E+018 | 2.794E+006 | 1.645E-002 | 3.952E-001 | 1.6247E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 45 | 2.905£+000 | 0.7700 | 2.1188 | 1.6949 | 100.00 | 7.13 | 7.61 | 1.6139 | 1.361E-007 | 2.567£+018 | 2.846£+006 | 1.2196-002 | 3.875E-001 | 1.6381E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR 2 1016 | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| | 2.9216+000 | 0.7639 | 2.1010 | 1.0949 | 100.00 | /.14 | 7.04 | 1.0197 | 1.3106-007 | 1.04324010 | 2.0902+000 | 9.0032-003 | 3./946-001 | 1.6513E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | 11 5 6 7 1 | |
| KSTEP 47 | 11ME 2 937F±000 | 0 7580 | 2 0849 | 1 6040 | 100 00 | PH 7 14 | 7 62 | FPH 1 6254 | RDEPF 1 260F-007 | NUC. RATE 1 320F±018 | CAREA 2 044F1006 | NUC. FLUX 6 628F-003 | JEP. RATE | ALPSIL 1 66438-002 | |
| | 2.93724000 | 0.7500 | 2.0015 | 1.0545 | 100.00 | | 1.02 | 1.0251 | 1.2001-007 | 1.32024010 | 2.9112,000 | 0.0202-000 | 5.1052-001 | 1.00432-002 | |
| VETED | ттыр | CSTI | GDD | FLC | темо | DW | DUM | FDU | DDFDF | MUC DATE | CADEA | NUC FLUX | DED DATE | MDGTI | |
| 48 | 2.952E+000 | 0.7523 | 2.0686 | 1.6949 | 100.00 | 7.14 | 7.62 | 1.6310 | 1.211E-007 | 9.419E+017 | 2.990E+006 | 4.863E-003 | 3.622E-001 | 1.6772E-002 | |
| | | 01.000 | | 1.02.12 | | | | 1.0010 | | | | | | | |
| KGTED | TIME | CSTL | SDD | FLC | TEMD | рн | рнм | FDH | DURDE | MIC DATE | ሰዝዋልጋ | NUC FLUY | ከዋጋ ጋላጥም | 81.D⊂TI | |
| 49 | 2.968E+000 | 0.7467 | 2.0528 | 1.6949 | 100.00 | 7.15 | 7.63 | 1.6365 | 1.165E-007 | 6.700E+017 | 3.034E+006 | 3.556E-003 | 3.533E-001 | 1.6899E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| 4 | | | | | | | | | | | | | | | ▼ |
| <u> </u> | | | | | | | | | | | | | | | |

| Actualización del código SILNUC en MATLAB para la modelación numérica |
|--|
| DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS |

| | | ANEX | 0 | RE | SULTAI | DOS EI | N VEN | TANA [| DE COMAN | DOS — SILI | NUC – MAT | LAB 7 | С | | |
|----------------|---------------------------------|-------------------|----------------|-------------|------------|-----------|---------|----------|--------------|---------------|------------|------------|------------|-------------|-----------------|
| 👍 Comr | nand Window | | | | | | | | | | | | | | _ 0 <u>_</u> x_ |
| <u>File</u> Ed | it De <u>b</u> ug <u>D</u> eskt | op <u>W</u> indov | v <u>H</u> elp | | | | | | | | | | | | Y |
| | | <u> </u> | | | | | | | | | | | | | A |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 50 | 2.983E+000 | 0.7413 | 2.0374 | 1.6949 | 100.00 | 7.15 | 7.63 | 1.6418 | 1.119E-007 | 4.751E+017 | 3.077E+006 | 2.591E-003 | 3.443E-001 | 1.7024E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 51 | 2.999E+000 | 0.7361 | 2.0224 | 1.6949 | 100.00 | 7.15 | 7.63 | 1.6471 | 1.075E-007 | 3.359E+017 | 3.117E+006 | 1.881E-003 | 3.352E-001 | 1.7148E-002 | |
| KSTED | ттик | CSTI. | SDD | FLC | тгмр | рн | PHN | FDH | הטאניט | NUC BATE | CIPFI | NUC FLUX | NFD DATE | M.PSTI. | |
| 52 | 3.015E+000 | 0.7310 | 2.0079 | 1.6949 | 100.00 | 7.16 | 7.64 | 1.6523 | 1.033E-007 | 2.369E+017 | 3.157E+006 | 1.362E-003 | 3.261E-001 | 1.7270E-002 | |
| KSTED | ттиг | CSTL | SPP | FLC | темр | рн | PHN | FDH | דסינט | NUC RATE | CIPFI | NUC FLUX | NFD DATE | M.PSTI. | |
| 53 | 3.030E+000 | 0.7261 | 1.9938 | 1.6949 | 100.00 | 7.16 | 7.64 | 1.6573 | 9.932E-008 | 1.668E+017 | 3.194E+006 | 9.849E-004 | 3.173E-001 | 1.7390E-002 | |
| KSTED | ттмг | CSTI. | SPP | FLC | тгмр | рн | PHN | FDH | RULDE | NUC RATE | CIPFI | NUC FLUX | NED BUTE | M.PSTI. | |
| 54 | 3.046E+000 | 0.7212 | 1.9801 | 1.6949 | 100.00 | 7.16 | 7.64 | 1.6623 | 9.556E-008 | 1.172E+017 | 3.231E+006 | 7.106E-004 | 3.088E-001 | 1.7509E-002 | |
| KSTEP | ттмг | CSTI. | SPR | FLC | темр | рн | PHN | FPH | RDFPF | NUC. RATE | CIRFI | NUC. FLUX | DED. RATE | M.PSTI. | |
| 55 | 3.062E+000 | 0.7166 | 1.9667 | 1.6949 | 100.00 | 7.16 | 7.64 | 1.6671 | 9.201E-008 | 8.226E+016 | 3.266E+006 | 5.116E-004 | 3.006E-001 | 1.7625E-002 | |
| \ END | NUC END N | IUC E | IND NUC | END N | UC E | ND NUC | END | NUC | END NUC | END NUC | END NUC | END NUC | END NUC | END NUC | |
| PRECH NUCLE | EDING NUCLEA ATION ENDED | ATION RAT | TE(5.720 |)6E+016) | LESS THA | N(1.00 | 00E-003 |) OF REC | ORDED MAXIMU | UM RATE (6.2 | :643E+019) | | | | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| | | | | ,,,,,,,,,,, | ,,,,,,,,,, | ,,,,,,,,, | | 1111 | | | | | | | ▼ |

Actualización del código SILNUC en MATLAB para la modelación numérica de los procesos de nucleación homogénea y deposición molecular de sílice en sistemas geotérmicos

ANEXO

RESULTADOS EN VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – MATLAB 7

С

🙏 Command Window File Edit Debug Desktop Window Help KSTEP = 55 TSPEC= 3.0615E+000 TEMP = 100.00 PH = 7.17 FLASH = 0.4100 GLASH = 0.0000E+000 CSIL = 0.7166 FLC = 1.6949 SALT MOLALITY = 3.0508E-001 SOL. CORR. FACTOR = 1.0102 SOD. ACT. = 2.0879E-001 PHN = 7.6478 FPH = 1.6719 FINT = 0.1435 GAMZ = 45.40 GAMMA = 33.75 DQS = 6.840E+014 AKIN = 2.000 DKIN = 1.000 TOTF = 1.017E-003 ALPF = 0.9997 RKF1 = 1.262E-001 RKF2 = 3.337E+000 RATEKF = 3.392E-003 RATEKT = 4.006E-009 PKW = 12.263 PKSIL = 9.098 PKF = 3.841 GSIL = 0.6492 GF = 0.7093 GNA = 0.6844 EPSD = 55.72 DENS = 0.9584 ADH = 0.5959 BDH = 0.3414 CSILS = 0.3639 ALPSIL = 0.0177 CSI = 0.0127 SRA = 1.9341 SRR = 1.9537 RATEK = 6.7110E-009 RDEPF = 8.8657E-008 FKINL = 5.9186E-008 RNUC = 8.837E-008 ANNUC = 6.401E+001 ZLD = 2.356E-002 CN = 1.786E+002 QLP = 3.340E+025 QT = 1.640E+016 RANUC = 6.902E+016 TAUC = 2.521E+000 NCLC = 94 TOTAL NO. = 1.8448E+019 AREA = 3.2665E+006 AVER. RAD. = 1.1704E-007 AREA = 1.7707E-013 MASS = 1.6933E-020 COLL. MASS = 0.3124 DIS. SIL. = 0.7166 SUM = 1.0289 SHOULD BE = 1.0288 PERCENT DIF. = 0.0106

| Actualización del código SILNUC en MATLAB para la modelación numérica |
|--|
| DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS |

ANEXO

RESULTADOS EN VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – MATLAB 7

С

| 🙏 Command Window | , | | | | | | | | |
|---|---|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| <u>File E</u> dit De <u>b</u> ug <u>E</u> | <u>)</u> esktop <u>W</u> indow <u>H</u> elp |) | | | | | | | لار ا |
| NUMBER OF PART | FICLES IN EACH CL | ASS | | | | | | | |
| | | | | | | | | | |
| 2.13613E+016 | 2.67017E+015 | 1.03898E+000 | 1.99013E+015 | 5.58714E+015 | 1.06534E+016 | 1.73328E+016 | 2.56948E+016 | 3.58033E+016 | 5.13184E+016 |
| 6.22569E+016 | 7.75780E+016 | 9.47597E+016 | 1.19305E+017 | 1.33276E+017 | 1.60775E+017 | 1.75991E+017 | 2.00240E+017 | 2.33101E+017 | 2.45721E+017 |
| 2.78831E+017 | 2.91373E+017 | 3.24525E+017 | 3.34755E+017 | 3.66972E+017 | 3.74421E+017 | 4.04921E+017 | 4.15030E+017 | 4.43146E+017 | 4.46961E+017 |
| 4.71652E+017 | 4.69151E+017 | 4.89830E+017 | 4.81551E+017 | 4.98082E+017 | 4.85010E+017 | 4.97620E+017 | 4.80953E+017 | 4.90106E+017 | 4.71047E+017 |
| 4.77323E+017 | 4.56952E+017 | 4.60959E+017 | 4.40161E+017 | 4.42467E+017 | 4.21919E+017 | 4.23024E+017 | 4.03205E+017 | 4.03528E+017 | 3.84757E+017 |
| 3.84633E+017 | 3.67097E+017 | 3.66791E+017 | 3.50582E+017 | 3.50295E+017 | 3.26680E+017 | 2.79194E+017 | 2.29949E+017 | 1.96913E+017 | 1.64146E+017 |
| 1.40744E+017 | 1.18170E+017 | 1.01311E+017 | 8.54324E+016 | 7.31835E+016 | 6.18762E+016 | 5.29356E+016 | 4.48184E+016 | 3.82798E+016 | 3.24247E+016 |
| 2.76429E+016 | 2.34098E+016 | 1.99179E+016 | 1.68561E+016 | 1.43125E+016 | 1.21000E+016 | 1.02530E+016 | 8.65732E+015 | 7.32116E+015 | 6.17340E+015 |
| 5.21058E+015 | 4.38756E+015 | 3.69657E+015 | 3.10839E+015 | 2.61450E+015 | 2.19569E+015 | 1.84454E+015 | 1.54790E+015 | 1.29922E+015 | 1.08947E+015 |
| 9.13611E+014 | 7.65511E+014 | 6.41362E+014 | 5.36954E+014 | | | | | | |
| | | | | | | | | | |
| | | | | | | | | | |
| PARTICLE RADI | Γ | | | | | | | | |
| | | | | | | | | | |
| 4.46620E-007 | 7.96620E-007 | 1.90813E-007 | 1.83911E-007 | 1.79789E-007 | 1.72992E-007 | 1.69201E-007 | 1.65520E-007 | 1.61926E-007 | 1.61250E-007 |
| 1.57788E-007 | 1.54398E-007 | 1.51063E-007 | 1.50583E-007 | 1.47372E-007 | 1.46968E-007 | 1.43853E-007 | 1.40761E-007 | 1.40420E-007 | 1.37482E-007 |
| 1.37191E-007 | 1.34347E-007 | 1.34094E-007 | 1.31352E-007 | 1.31132E-007 | 1.28493E-007 | 1.28302E-007 | 1.25768E-007 | 1.25605E-007 | 1.23182E-007 |
| 1.23044E-007 | 1.20731E-007 | 1.20616E-007 | 1.18413E-007 | 1.18319E-007 | 1.16221E-007 | 1.16145E-007 | 1.14149E-007 | 1.14087E-007 | 1.12189E-007 |
| 1.12140E-007 | 1.10335E-007 | 1.10295E-007 | 1.08578E-007 | 1.08546E-007 | 1.06912E-007 | 1.06886E-007 | 1.05331E-007 | 1.05309E-007 | 1.03828E-007 |
| 1.03808E-007 | 1.02397E-007 | 1.02378E-007 | 1.01034E-007 | 1.01014E-007 | 9.98737E-008 | 1.00278E-007 | 9.94539E-008 | 9.98485E-008 | 9.90426E-008 |
| 9.94293E-008 | 9.86505E-008 | 9.90331E-008 | 9.82858E-008 | 9.86660E-008 | 9.79522E-008 | 9.83313E-008 | 9.76522E-008 | 9.80311E-008 | 9.73874E-008 |
| 9.77666E-008 | 9.71583E-008 | 9.75381E-008 | 9.69652E-008 | 9.73458E-008 | 9.68077E-008 | 9.71891E-008 | 9.66853E-008 | 9.70673E-008 | 9.65969E-008 |
| 9.69794E-008 | 9.65415E-008 | 9.69242E-008 | 9.65176E-008 | 9.69002E-008 | 9.65239E-008 | 9.69061E-008 | 9.65586E-008 | 9.69402E-008 | 9.66199E-008 |
| 9.70009E-008 | 9.67064E-008 | 9.70868E-008 | 9.68167E-008 | | | | | | • |
| 4 | | | | | | | | | • |

| Actualización del código SILNUC en MATLAB para la modelación numérica |
|---|
| DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICO |

ANEXO

< I.

RESULTADOS EN VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – MATLAB 7

С

| 📣 Command Window | | | | | | | | | |
|---|------------------------------------|---------------|-----------------|-----------------|----------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| <u>F</u> ile <u>E</u> dit De <u>b</u> ug <u>D</u> | esktop <u>W</u> indow <u>H</u> elp | | | | | | | | |
| TOTAL MASS IN | EACH CLASS | | | | | | | | |
| 1.76088E-002 | 1.24904E-002 | 6.67907E-020 | 1.14549E-004 | 3.00445E-004 | 5.10326E-004 | 7.76901E-004 | 1.07815E-003 | 1.40657E-003 | 1.99092E-003 |
| 2.26304E-003 | 2.64210E-003 | 3.02263E-003 | 3.76936E-003 | 3.94716E-003 | 4.72252E-003 | 4.84770E-003 | 5.16756E-003 | 5.97194E-003 | 5.90828E-003 |
| 6.66206E-003 | 6.53754E-003 | 7.24042E-003 | 7.01970E-003 | 7.65677E-003 | 7.34998E-003 | 7.91332E-003 | 7.63977E-003 | 8.12550E-003 | 7.73030E-003 |
| 8.12989E-003 | 7.63941E-003 | 7.95334E-003 | 7.39820E-003 | 7.63389E-003 | 7.04517E-003 | 7.21407E-003 | 6.61916E-003 | 6.73424E-003 | 6.15464E-003 |
| 6.22846E-003 | 5.67926E-003 | 5.72295E-003 | 5.21341E-003 | 5.23615E-003 | 4.77085E-003 | 4.77987E-003 | 4.35992E-003 | 4.36066E-003 | 3.98485E-003 |
| 3.98128E-003 | 3.64694E-003 | 3.64188E-003 | 3.34559E-003 | 3.34094E-003 | 3.01135E-003 | 2.60502E-003 | 2.09306E-003 | 1.81378E-003 | 1.47564E-003 |
| 1.28015E-003 | 1.04977E-003 | 9.10505E-004 | 7.50551E-004 | 6.50432E-004 | 5.38086E-004 | 4.65704E-004 | 3.86179E-004 | 3.33693E-004 | 2.77121E-004 |
| 2.39024E-004 | 1.98666E-004 | 1.71022E-004 | 1.42197E-004 | 1.22166E-004 | 1.01578E-004 | 8.70941E-005 | 7.24020E-005 | 6.19561E-005 | 5.14873E-005 |
| 4.39754E-005 | 3.65300E-005 | 3.11445E-005 | 2.58608E-005 | 2.20115E-005 | 1.82709E-005 | 1.55320E-005 | 1.28945E-005 | 1.09516E-005 | 9.09288E-006 |
| 7.71568E-006 | 6.40623E-006 | 5.43088E-006 | 4.50893E-006 | | | | | | |
| | | | | | | | | | |
| | | | | | | | | | |
| | | | | | | | | | - |
| KSTEP TIME CS | IL SRR FLC TE | MP PH PHN FPH | I RDEPF NUC.RAT | TE CAREA NUC.FL | UX DEP.RATE AI | PSIL | | | |
| | | | | | in printing h | | | | |
| 1 | | | | | | | | | |

KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP ΡH PHNFPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL 56 3.077E+000 0.7120 1.9537 1.6949 100.00 7.17 7.65 1.6719 8.866E-008 5.692E+016 3.301E+006 3.635E-004 2.926E-001 1.7740E-002

NEW DELTC = 3.1250E-002 AT KSTEP = 56

KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RDEPF NUC.RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL

KSTEP TIME CSIL SRR FLCTEMP ΡH PHNFPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL 57 3.108E+000 0.7031 1.9411 1.6949 100.00 7.17 7.65 1.6766 8.548E-008 0.000E+000 3.367E+006 0.000E+000 2.878E-001 1.7854E-002

KSTEP TIME CSIL FLC ΡH PHN FPH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX DEP. RATE ALPSIL SRR TEMP 7.66 1.6858 7.951E-008 0.000E+000 3.429E+006 0.000E+000 2.727E-001 1.8080E-002 58 3.140E+000 0.6947 1.9164 1.6949 100.00 7.18

KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PHN FPH RDEPF CAREA NUC. FLUX ALPSIL ΡH NUC. RATE DEP. RATE 59 3.171E+000 0.6867 1.8930 1.6949 100.00 7.18 7.66 1.6947 7.415E-008 0.000E+000 3.488E+006 0.000E+000 2.586E-001 1.8299E-002

.

| | | | DE LO | A S PROCES | CTUALIZA OS DE NUC | CIÓN DEL CLEACIÓN | CÓDIGO | SILNUC | EN MATLAB E EPOSICIÓN MO | PARA LA MODEI LECULAR DE SÍI | LACIÓN NUMÉR LICE EN SISTEM | ICA IAS GEOTÉRMIC | os | | |
|--------------------------|---------------------------------|-------------------|----------------|---------------|-----------------------|----------------------|-----------|--------|-----------------------------|---------------------------------|--------------------------------|----------------------|------------|-------------|---|
| | | ANEX | 0 | RE | SULTA | DOS E | N VEN | TANA E | DE COMAN | DOS — SILI | NUC — MAT | LAB 7 | С | | |
| 📣 Comn | nand Window | | | | | | | | | | | | | | |
| <u>F</u> ile <u>E</u> di | it De <u>b</u> ug <u>D</u> eskt | op <u>W</u> indov | v <u>H</u> elp | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | 2 |
| 60 | 3.202E+000 | 0.6790 | 1.8707 | 1.6949 | 100.00 | 7.19 | 7.67 | 1.7033 | 6.931E-008 | 0.000E+000 | 3.543E+006 | 0.000E+000 | 2.456E-001 | 1.8513E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | РНN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 61 | 3.233E+000 | 0.6718 | 1.8496 | 1.6949 | 100.00 | 7.19 | 7.67 | 1.7115 | 6.494E-008 | 0.000E+000 | 3.595E+006 | 0.000E+000 | 2.335E-001 | 1.8720E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | РНN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 62 | 3.265E+000 | 0.6649 | 1.8295 | 1.6949 | 100.00 | 7.20 | 7.68 | 1.7195 | 6.098E-008 | 0.000E+000 | 3.644E+006 | 0.000E+000 | 2.222E-001 | 1.8922E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | РНN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 63 | 3.296E+000 | 0.6583 | 1.8104 | 1.6949 | 100.00 | 7.20 | 7.68 | 1.7271 | 5.737E-008 | 0.000E+000 | 3.691E+006 | 0.000E+000 | 2.118E-001 | 1.9118E-002 | |
| NEW DE | LTC = 6.250 | 0E-002 | AT KS | TEP = | 63 1 F PH R | DEDE N | UC - RATE | CARFA | NUC FLUX |)FP.RATE AL. | OSTI. | | | | _ |
| | 11111 0011 | | | | | | 00111111 | omulai | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 64 | 3.358E+000 | 0.6457 | 1.7921 | 1.6949 | 100.00 | 7.20 | 7.69 | 1.7345 | 5.408E-008 | 0.000E+000 | 3.780E+006 | 0.000E+000 | 2.044E-001 | 1.9309E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 65 | 3.421E+000 | 0.6342 | 1.7571 | 1.6949 | 100.00 | 7.21 | 7.69 | 1.7490 | 4.816E-008 | 0.000E+000 | 3.860E+006 | 0.000E+000 | 1.859E-001 | 1.9686E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | РНN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 66 | 3.483E+000 | 0.6237 | 1.7252 | 1.6949 | 100.00 | 7.22 | 7.70 | 1.7624 | 4.320E-008 | 0.000E+000 | 3.933E+006 | 0.000E+000 | 1.699E-001 | 2.0043E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 67 | 3.546E+000 | 0.6141 | 1.6960 | 1.6949 | 100.00 | 7.23 | 7.71 | 1.7750 | 3.901E-008 | 0.000E+000 | 3.999E+006 | 0.000E+000 | 1.557E-001 | 2.0381E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | , |
| 68 | 3.608E+000 | 0.6054 | 1.6693 | 1.6949 | 100.00 | 7.24 | 7.72 | 1.7867 | 3.543E-008 | 0.000E+000 | 4.057E+006 | 0.000E+000 | 1.400E-001 | 2.0701E-002 | |

| | | | DE LO | A S PROCES | CTUALIZA OS DE NUC | CIÓN DEI CLEACIÓN | CÓDIGO | SILNUC | EN MATLAB E EPOSICIÓN MO | PARA LA MODEI LECULAR DE SÍI | LACIÓN NUMÉR | ICA IAS GEOTÉRMIC | os | | |
|----------|--------------------------|-------------------|------------------|------------------|-----------------------|----------------------|---------|--------|-----------------------------|---------------------------------|--------------|----------------------|------------|-------------|---|
| | | ANEX | 0 | RE | SULTAI | DOS E | N VEN | TANA [| DE COMAN | DOS — SILI | NUC – MAT | LAB 7 | С | | |
| 📣 Comn | nand Window | | | | | | | | | | | | | | |
| File Edi | t Debug Deskt | op Windov | v Help | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | 2 |
| 69 | 3.671E+000 | 0.5978 | 1.6452 | 1.6949 | 100.00 | 7.24 | 7.72 | 1.7975 | 3.242E-008 | 0.000E+000 | 4.107E+006 | 0.000E+000 | 1.222E-001 | 2.0997E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | РНN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 70 | 3.733E+000 | 0.5910 | 1.6242 | 1.6949 | 100.00 | 7.25 | 7.73 | 1.8070 | 2.995E-008 | 0.000E+000 | 4.152E+006 | 0.000E+000 | 1.106E-001 | 2.1263E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | РНN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 71 | 3.796E+000 | 0.5850 | 1.6052 | 1.6949 | 100.00 | 7.25 | 7.73 | 1.8157 | 2.784E-008 | 0.000E+000 | 4.191E+006 | 0.000E+000 | 9.642E-002 | 2.1509E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 72 | 3.858E+000 | 0.5796 | 1.5886 | 1.6949 | 100.00 | 7.26 | 7.74 | 1.8235 | 2.608E-008 | 0.000E+000 | 4.225E+006 | 0.000E+000 | 8.723E-002 | 2.1729E-002 | |
| NEW DE | LTC = 1.250 TIME CSIL |)OE-OO1 SRR FL | AT KS .C TEMP | STEP = PH PHN | 72 1 FPH R | DEPF N | UC.RATE | CAREA | NUC.FLUX I |)EP.RATE ALF | SIL | | | | - |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 73 | 3.983E+000 | 0.5698 | 1.5736 | 1.6949 | 100.00 | 7.26 | 7.74 | 1.8306 | 2.456E-008 | 0.000E+000 | 4.286E+006 | 0.000E+000 | 7.955E-002 | 2.1932E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 74 | 4.108E+000 | 0.5614 | 1.5462 | 1.6949 | 100.00 | 7.27 | 7.75 | 1.8437 | 2.196E-008 | 0.000E+000 | 4.338E+006 | 0.000E+000 | 6.812E-002 | 2.2311E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | РНN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 75 | 4.233E+000 | 0.5547 | 1.5231 | 1.6949 | 100.00 | 7.28 | 7.76 | 1.8550 | 1.992E-008 | 0.000E+000 | 4.378E+006 | 0.000E+000 | 5.431E-002 | 2.2643E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | РНN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 76 | 4.358E+000 | 0.5489 | 1.5044 | 1.6949 | 100.00 | 7.28 | 7.76 | 1.8643 | 1.837E-008 | 0.000E+000 | 4.411E+006 | 0.000E+000 | 4.637E-002 | 2.2918E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 77 | 4.483E+000 | 0.5440 | 1.4884 | 1.6949 | 100.00 | 7.29 | 7.77 | 1.8723 | 1.712E-008 | 0.000E+000 | 4.439E+006 | 0.000E+000 | 3.940E-002 | 2.3158E-002 | |

| | | | DE LO | A S PROCES | OS DE NUC | | I HOMOG | ÉNEA Y D | EPOSICIÓN MO | LECULAR DE SÍ | LICE EN SISTEM | ICA IAS GEOTÉRMIC | cos | | |
|-------------------------|---------------------------------|-------------------|----------------|---------------|----------------|------------|------------|---------------|---------------------|---------------|---------------------|----------------------|-------------------------|-----------------------|-----|
| | | ANEX | 0 | RE | SULTA | DOSE | N VEN | TANA [| DE COMAN | IDOS — SILI | NUC – MAT | LAB 7 | С | | |
| 🙏 Comr | nand Window | | | | | | | | | | | | | | |
| <u>F</u> ile <u>E</u> d | it De <u>b</u> ug <u>D</u> eskt | op <u>W</u> indov | v <u>H</u> elp | | | | | | | | | | | | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| NEW DE | LTC = 2.500 | 00E-001 | AT KS | STEP = | 77 | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME CSIL | SRR FL | C TEMP | PH PHN | FPH F | DEPF N | UC.RATE | CAREA | NUC.FLUX I | DEP.RATE ALF | SIL | | | | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP 78 | TIME 4 733F+000 | CSIL 0 5357 | SRR 1 4748 | FLC 1 6949 | TEMP 100 00 | PH 7 29 | PHN 777 | FPH 1 8792 | RDEPF 1 611F-008 | NUC. RATE | CAREA 4 485F+006 | NUC. FLUX | DEP. RATE 3 362F-002 | ALPSIL 2 3366F-002 | |
| .0 | 1110021000 | 0.0001 | 1.1.10 | 1.0515 | 100.00 | | | 1.0158 | 1.0112 000 | 0.0002.000 | 11 1002 1000 | 0.0002.000 | 0.0022 002 | 2.00002 002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 79 | 4.983E+000 | 0.5301 | 1.4518 | 1.6949 | 100.00 | 7.30 | 7.78 | 1.8911 | 1.448E-008 | 0.000E+000 | 4.515E+006 | 0.000E+000 | 2.283 E- 002 | 2.3728E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 80 | 5.233⊻+000 | 0.5257 | 1.4361 | 1.6949 | 100.00 | 7.30 | 7.78 | 1.8993 | 1.344E-008 | 0.000£+000 | 4.537£+006 | 0.000£+000 | 1.7758-002 | 2.39816-002 | |
| NEW DE | LTC = 5.000 | 0E-001 | AT KS | STEP = | 80 | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME CSIL | SRR FL | C TEMP | PH PHN | FPH F | DEPF N | UC.RATE | CAREA | NUC.FLUX I | DEP.RATE ALF | SIL | | | | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 81 | 5.733E+000 | 0.5174 | 1.4239 | 1.6949 | 100.00 | 7.30 | 7.79 | 1.9058 | 1.267E-008 | 0.000E+000 | 4.577E+006 | 0.000E+000 | 1.697E-002 | 2.4181E-002 | |
| | | 00.77 | | | | | | | | | 2155) | | | LI DOTI | |
| KSIEP 82 | 11ME 6.233E+000 | 0.5128 | 5RR 1.4008 | FLC 1.6949 | 100.00 | РН 7.31 | 7.79 | FPH 1.9182 | RDEPF 1.129E-008 | NUC. RAIL | 4.596E+006 | NUC. FLUX | 9.259F-003 | ALPSIL 2.4571E-002 | |
| 00 | 012002/000 | 0.0100 | 1.1000 | 1.0515 | 100.00 | | | 1.5100 | 1.1152 000 | 0100021000 | 1105021000 | 0.0002.000 | 5.2052 000 | 51 10 1 12 00L | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 83 | 6.733E+000 | 0.5087 | 1.3882 | 1.6949 | 100.00 | 7.32 | 7.80 | 1.9251 | 1.059E-008 | 0.000E+000 | 4.612E+006 | 0.000E+000 | 8.466E-003 | 2.4788E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 84 | 7.233E+000 | 0.5060 | 1.3767 | 1.6949 | 100.00 | 7.32 | 7.80 | 1.9314 | 9.968E-009 | 0.000E+000 | 4.620E+006 | U.UUÚE+000 | 5.455E-003 | 2.4991E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| • | | | | | | | | | | | | | | | ► F |

| | | | DE LO | A S PROCES | CTUALIZA OS DE NUC | CIÓN DEL | . CÓDIGC I HOMOG | SILNUC | EN MATLAB F EPOSICIÓN MOI | PARA LA MODEI LECULAR DE SÍI | ACIÓN NUMÉR LICE EN SISTEM | ICA IAS GEOTÉRMIC | cos | | |
|---------------|--------------------------------|-------------------|----------------|---------------|-----------------------|----------|---------------------|--------|------------------------------|---------------------------------|-------------------------------|----------------------|------------|-------------|--|
| | | ANEX | 0 | RE | SULTAI | DOS EI | N VEN | TANA E | DE COMAN | DOS — SILI | NUC – MAT | LAB 7 | C | | |
| Comn | and Window | | | | | | | | | | | | | | |
| e <u>E</u> di | t De <u>b</u> ug <u>D</u> eskt | op <u>W</u> indov | ∾ <u>H</u> elp | | | | | | | | | | | | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 85 | 7.733E+000 | 0.5035 | 1.3692 | 1.6949 | 100.00 | 7.32 | 7.80 | 1.9356 | 9.583E-009 | 0.000E+000 | 4.627E+006 | 0.000E+000 | 5.087E-003 | 2.5123E-002 | |
| 5TEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | РНN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 86 | 8.233E+000 | 0.5012 | 1.3623 | 1.6949 | 100.00 | 7.32 | 7.80 | 1.9395 | 9.232E-009 | 0.000E+000 | 4.632E+006 | 0.000E+000 | 4.744E-003 | 2.5248E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 87 | 8.733E+000 | 0.4990 | 1.3558 | 1.6949 | 100.00 | 7.33 | 7.81 | 1.9431 | 8.913E-009 | 0.000E+000 | 4.637E+006 | 0.000E+000 | 4.426E-003 | 2.5365E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 88 | 9.233E+000 | 0.4970 | 1.3498 | 1.6949 | 100.00 | 7.33 | 7.81 | 1.9465 | 8.622E-009 | 0.000E+000 | 4.640E+006 | 0.000E+000 | 4.131E-003 | 2.5476E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 89 | 9.733E+000 | 0.4951 | 1.3442 | 1.6949 | 100.00 | 7.33 | 7.81 | 1.9497 | 8.356E-009 | 0.000E+000 | 4.642E+006 | 0.000E+000 | 3.858E-003 | 2.5580E-002 | |
| 5TEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 90 | 1.023E+001 | 0.4938 | 1.3389 | 1.6949 | 100.00 | 7.33 | 7.81 | 1.9527 | 8.113E-009 | 0.000E+000 | 4.641E+006 | 0.000E+000 | 2.611E-003 | 2.5677E-002 | |
| TEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 91 | 1.073E+001 | 0.4926 | 1.3354 | 1.6949 | 100.00 | 7.33 | 7.81 | 1.9547 | 7.952E-009 | 0.000E+000 | 4.639E+006 | 0.000E+000 | 2.476E-003 | 2.5744E-002 | |
| 3TEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 92 | 1.123E+001 | 0.4914 | 1.3320 | 1.6949 | 100.00 | 7.33 | 7.81 | 1.9566 | 7.801E-009 | 0.000E+000 | 4.636E+006 | 0.000E+000 | 2.350E-003 | 2.5807E-002 | |
| TEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 93 | 1.173E+001 | 0.4903 | 1.3288 | 1.6949 | 100.00 | 7.33 | 7.82 | 1.9585 | 7.659E-009 | 0.000E+000 | 4.633E+006 | 0.000E+000 | 2.232E-003 | 2.5868E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 94 | 1.223E+001 | 0.4893 | 1.3258 | 1.6949 | 100.00 | 7.34 | 7.82 | 1.9602 | 7.527E-009 | 0.000E+000 | 4.630E+006 | 0.000E+000 | 2.121E-003 | 2.5925E-002 | |

| | | | DE LO | Ac S PROCESC | CTUALIZA OS DE NUC | CIÓN DEL CLEACIÓN | CÓDIGO | SILNUC | EN MATLAB | PARA LA MODEI LECULAR DE SÍI | LACIÓN NUMÉR LICE EN SISTEM | ICA IAS GEOTÉRMIC | os | | |
|--------------------------|---------------------------------|-------------------|----------------|-----------------|-----------------------|----------------------|---------|---------|------------|---------------------------------|--------------------------------|----------------------|------------|-------------|--|
| | | ANEX | 0 | RES | SULTA | DOS EI | N VEN | ITANA E | DE COMAN | DOS — SILI | NUC – MAT | LAB 7 | С | | |
| 📣 Comr | nand Window | | | | | | | | | | | | | | |
| <u>F</u> ile <u>E</u> di | it De <u>b</u> ug <u>D</u> eskt | op <u>W</u> indov | ∾ <u>H</u> elp | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 96 | 1.323E+001 | 0.4864 | 1.3596 | 1.6949 | 97.58 | 7.35 | 7.83 | 1.9917 | 7.853E-009 | 0.000E+000 | 4.627E+006 | 0.000E+000 | 5.111E-003 | 2.6032E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 97 | 1.373E+001 | 0.4834 | 1.3966 | 1.6949 | 95.08 | 7.37 | 7.85 | 2.0249 | 8.180E-009 | 0.000E+000 | 4.634E+006 | 0.000E+000 | 8.653E-003 | 2.6133E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 98 | 1.423E+001 | 0.4779 | 1.4316 | 1.6949 | 92.58 | 7.39 | 7.87 | 2.0611 | 8.327E-009 | 0.000E+000 | 4.656E+006 | 0.000E+000 | 1.385E-002 | 2.6299E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 99 | 1.473E+001 | 0.4702 | 1.4606 | 1.6949 | 90.08 | 7.41 | 7.90 | 2.1025 | 8.154E-009 | 0.000E+000 | 4.691E+006 | 0.000E+000 | 1.835E-002 | 2.6598E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 100 | 1.523E+001 | 0.4616 | 1.4833 | 1.6949 | 87.58 | 7.44 | 7.92 | 2.1491 | 7.705E-009 | 0.000E+000 | 4.732E+006 | 0.000E+000 | 2.162E-002 | 2.7033E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 101 | 1.573E+001 | 0.4519 | 1.5034 | 1.6949 | 85.08 | 7.46 | 7.95 | 2.1989 | 7.156E-009 | 0.000E+000 | 4.782E+006 | 0.000E+000 | 2.221E-002 | 2.7540E-002 | |
| NEW DE | LTC = 2.500 |)OE-001 | AT KS | STEP = | 101 | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME CSIL | SRR FI | C TEMP | PH PHN | FPH R | DEPF N | UC.RATE | CAREA | NUC.FLUX I | EP.RATE ALF | SIL | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 102 | 1.598E+001 | 0.4474 | 1.4954 | 1.6949 | 83.83 | 7.48 | 7.97 | 2.2342 | 6.356E-009 | 0.000E+000 | 4.804E+006 | 0.000E+000 | 1.984E-002 | 2.8131E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 103 | 1.623E+001 | 0.4427 | 1.5047 | 1.6949 | 82.58 | 7.50 | 7.98 | 2.2607 | 6.094E-009 | 0.000E+000 | 4.828E+006 | 0.000E+000 | 1.924E-002 | 2.8416E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 104 | 1.648E+001 | 0.4381 | 1.5136 | 1.6949 | 81.33 | 7.51 | 8.00 | 2.2878 | 5.827E-009 | 0.000E+000 | 4.851E+006 | 0.000E+000 | 1.979E-002 | 2.8714E-002 | |

| | | ANEX | 0 | RES | SULTAI | DOSE | N VEN | ITANA [| DE COMAN | DOS — SILI | NUC – MAT | LAB 7 | C | | |
|-----------------|---------------------------------|-------------------|----------------|---------|--------|--------|---------|---------|------------|-------------|------------|------------|------------|----------------------|-----|
| Com | nand Window | | | | | | | | | | | | | | _ 0 |
| ile <u>E</u> di | it De <u>b</u> ug <u>D</u> eskt | op <u>W</u> indov | v <u>H</u> elp | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 105 | 1.673E+001 | 0.4334 | 1.5228 | 1.6949 | 80.08 | 7.53 | 8.01 | 2.3153 | 5.571E-009 | 0.000E+000 | 4.876E+006 | 0.000E+000 | 2.016E-002 | 2.9016E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 106 | 1.698E+001 | 0.4287 | 1.5317 | 1.6949 | 78.83 | 7.54 | 8.03 | 2.3434 | 5.315E-009 | 0.000E+000 | 4.901E+006 | 0.000E+000 | 2.035E-002 | 2.9329E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 107 | 1.723E+001 | 0.4241 | 1.5404 | 1.6949 | 77.58 | 7.56 | 8.05 | 2.3722 | 5.061E-009 | 0.000E+000 | 4.925E+006 | 0.000E+000 | 1.953E-002 | 2.9655 E -002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 108 | 1.748E+001 | 0.4195 | 1.5498 | 1.6949 | 76.33 | 7.57 | 8.06 | 2.4011 | 4.827E-009 | 0.000E+000 | 4.950E+006 | 0.000E+000 | 1.955E-002 | 2.9976E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 109 | 1.773E+001 | 0.4149 | 1.5592 | 1.6949 | 75.08 | 7.59 | 8.08 | 2.4305 | 4.599E-009 | 0.000E+000 | 4.975E+006 | 0.000E+000 | 1.876E-002 | 3.0305 E -002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 110 | 1.798E+001 | 0.4105 | 1.5560 | 1.6949 | 74.42 | 7.60 | 8.09 | 2.4508 | 4.331E-009 | 0.000E+000 | 4.999E+006 | 0.000E+000 | 1.777E-002 | 3.0640E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 111 | 1.823E+001 | 0.4063 | 1.5524 | 1.6949 | 73.79 | 7.61 | 8.10 | 2.4702 | 4.083E-009 | 0.000E+000 | 5.022E+006 | 0.000E+000 | 1.685E-002 | 3.0968E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 112 | 1.848E+001 | 0.4023 | 1.5497 | 1.6949 | 73.17 | 7.62 | 8.11 | 2.4894 | 3.861E-009 | 0.000E+000 | 5.043E+006 | 0.000E+000 | 1.601E-002 | 3.1286E-002 | |
| NEW DE | LTC = 5.000 |)OE-001 | AT KS | TEP = : | 112 | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME CSIL | SRR FL | C TEMP | PH PHN | FPH R | DEPF N | UC.RATE | CAREA | NUC.FLUX I | EP.RATE ALF | SIL | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 113 | 1 8988+001 | 0 3947 | 1 5613 | 1 6949 | 71 02 | 7 63 | 8 12 | 2 5190 | 3 7078-000 | 0 0008+000 | 5 0848+006 | 0 0008+000 | 1 6088-002 | 3 15048-002 | |

Actualización del código SILNUC en MATLAB para la modelación numérica e los procesos de nucleación homogénea y deposición molecular de sílice en sistemas geotérmicos

ÞĒ

| | | ANEX | 0 | RE | SULTAI | DOS EI | N VEN | ITANA E | DE COMAN | DOS — SILI | NUC — MAT | LAB 7 | С | <u> </u> | |
|-----------------|--------------------------------|-------------------|----------------|--------|--------|--------|-------|---------|------------|------------|------------|------------|------------|----------------------|--|
| Came | and Window | | | | | | | | | | | | | | |
| ile <u>E</u> di | t De <u>b</u> ug <u>D</u> eskt | op <u>W</u> indov | v <u>H</u> elp | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 114 | 1.948E+001 | 0.3877 | 1.5579 | 1.6949 | 70.67 | 7.65 | 8.14 | 2.5570 | 3.341E-009 | 0.000E+000 | 5.122E+006 | 0.000E+000 | 1.462E-002 | 3.2208E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 115 | 1.998E+001 | 0.3811 | 1.5570 | 1.6949 | 69.42 | 7.67 | 8.16 | 2.5943 | 3.040E-009 | 0.000E+000 | 5.158E+006 | 0.000E+000 | 1.342E-002 | 3.2788E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 116 | 2.048E+001 | 0.3751 | 1.5576 | 1.6949 | 68.17 | 7.69 | 8.18 | 2.6315 | 2.781E-009 | 0.000E+000 | 5.191E+006 | 0.000E+000 | 1.274E-002 | 3.3352E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 117 | 2.098E+001 | 0.3694 | 1.5599 | 1.6949 | 66.92 | 7.71 | 8.20 | 2.6682 | 2.561E-009 | 0.000E+000 | 5.221E+006 | 0.000E+000 | 1.181E-002 | 3.3892 E -002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 118 | 2.148E+001 | 0.3640 | 1.5638 | 1.6949 | 65.67 | 7.73 | 8.22 | 2.7047 | 2.372E-009 | 0.000E+000 | 5.251E+006 | 0.000E+000 | 1.130E-002 | 3.4412E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 119 | 2.198E+001 | 0.3588 | 1.5687 | 1.6949 | 64.42 | 7.74 | 8.24 | 2.7412 | 2.204E-009 | 0.000E+000 | 5.279E+006 | 0.000E+000 | 1.080E-002 | 3.4924E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 120 | 2.248E+001 | 0.3539 | 1.5744 | 1.6949 | 63.17 | 7.76 | 8.26 | 2.7778 | 2.052E-009 | 0.000E+000 | 5.306E+006 | 0.000E+000 | 1.012E-002 | 3.5429E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 121 | 2.298 E+ 001 | 0.3492 | 1.5815 | 1.6949 | 61.92 | 7.78 | 8.28 | 2.8143 | 1.921E-009 | 0.000E+000 | 5.332E+006 | 0.000E+000 | 9.710E-003 | 3.5916E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 122 | 2.348 E+ 001 | 0.3447 | 1.5894 | 1.6949 | 60.67 | 7.80 | 8.29 | 2.8509 | 1.801E-009 | 0.000E+000 | 5.357E+006 | 0.000E+000 | 9.436E-003 | 3.6398E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 123 | 2.398E+001 | 0.3404 | 1.5981 | 1.6949 | 59.42 | 7.82 | 8.31 | 2.8877 | 1.693E-009 | 0.000E+000 | 5.382E+006 | 0.000E+000 | 8.968E-003 | 3.6875E-002 | |

Actualización del código SILNUC en MATLAB para la modelación numérica de los procesos de nucleación homogénea y deposición molecular de sílice en sistemas geotérmicos

| | | ANEX | 0 | RE | SULTAI | DOS EI | N VEN | ITANA E | DE COMAN | DOS — SILI | NUC – MAT | LAB 7 | С | | |
|-----------------|--------------------------------|-------------------|----------------|--------|--------|--------|-------|---------|------------|------------|------------|------------|------------|-------------|---|
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| Com | nand Window | | | | | | | | | | | | | | |
| ile <u>E</u> di | t De <u>b</u> ug <u>D</u> eskt | op <u>W</u> indov | v <u>H</u> elp | | | | | | | | | | | | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 124 | 2.448E+001 | 0.3362 | 1.6075 | 1.6949 | 58.17 | 7.84 | 8.33 | 2.9248 | 1.594E-009 | 0.000E+000 | 5.406E+006 | 0.000E+000 | 8.591E-003 | 3.7348E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 125 | 2.498E+001 | 0.3322 | 1.6179 | 1.6949 | 56.92 | 7.85 | 8.35 | 2.9619 | 1.504E-009 | 0.000E+000 | 5.428E+006 | 0.000E+000 | 8.158E-003 | 3.7812E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| STED | TIME | CSTI | SDD | FLC | темр | рн | DHM | FDH | DULDE | NUC DATE | CIPEI | NUC FLUX | הדם סאיד | M.DSTI | |
| 126 | 2.548E+001 | 0.3284 | 1.6291 | 1.6949 | 55.67 | 7.87 | 8.37 | 2.9993 | 1.423E-009 | 0.000E+000 | 5.450E+006 | 0.000E+000 | 7.754E-003 | 3.8268E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 127 | 2.5981+001 | 0.3247 | 1.0414 | 1.6949 | 54.42 | 1.89 | 8.39 | 3.0367 | 1.3496-009 | 0.000±+000 | 5.4/IL+UU6 | 0.000£+000 | 7.381E-UU3 | 3.8/13E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 128 | 2.648E+001 | 0.3212 | 1.6547 | 1.6949 | 53.17 | 7.91 | 8.41 | 3.0742 | 1.283E-009 | 0.000E+000 | 5.491E+006 | 0.000E+000 | 7.043E-003 | 3.9147E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 129 | 2.698 E+ 001 | 0.3179 | 1.6690 | 1.6949 | 51.92 | 7.93 | 8.43 | 3.1119 | 1.222E-009 | 0.000E+000 | 5.510E+006 | 0.000E+000 | 6.735E-003 | 3.9571E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 130 | 2.748E+001 | 0.3147 | 1.6844 | 1.6949 | 50.67 | 7.95 | 8.44 | 3.1497 | 1.167E-009 | 0.000E+000 | 5.528E+006 | 0.000E+000 | 6.453E-003 | 3.9985E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| STED | TIME | CSTI | SDD | FLC | TEMD | рн | DHM | FDF | DULDE | NUC DATE | CADEA | NUC FLUX | חדם סארד | AT DOTI | |
| 131 | 2.798E+001 | 0.3117 | 1.6873 | 1.6949 | 49.91 | 7.96 | 8.46 | 3.1763 | 1.108E-009 | 0.000E+000 | 5.545E+006 | 0.000E+000 | 6.144E-003 | 4.0390E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 132 | 2.040£+UU1 | 0.3088 | 1.0/30 | 1.0949 | 49.71 | 1.97 | 0.40 | 3.1899 | 1.0442-009 | 0.0001+000 | 3.3012+006 | 0.0001+000 | 3.8U3E-UU3 | 4.07862-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 133 | 2.898E+001 | 0.3060 | 1.6648 | 1.6949 | 49.51 | 7.97 | 8.47 | 3.2032 | 9.860E-010 | 0.000E+000 | 5.577E+006 | 0.000E+000 | 5.499E-003 | 4.1168E-002 | 1 |

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA

| ANEXO RESULTADOS EN VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – MATLAB 7 | | | | | | | | | | | LAB 7 | С | | | |
|---|---------------------------------|-------------------|----------------|--------|-------|------|------|--------|------------|------------|------------|------------|------------|-------------|--|
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| Comn | and Window | | | | | | | | | | | | | | |
| ile <u>E</u> di | t De <u>b</u> ug <u>D</u> eskti | op <u>W</u> indov | v <u>H</u> elp | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 134 | 2.948E+001 | 0.3034 | 1.6547 | 1.6949 | 49.31 | 7.98 | 8.48 | 3.2160 | 9.337E-010 | 0.000E+000 | 5.591E+006 | 0.000E+000 | 5.221E-003 | 4.1537E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 135 | 2.998E+001 | 0.3010 | 1.6453 | 1.6949 | 49.11 | 7.98 | 8.48 | 3.2286 | 8.862E-010 | 0.000E+000 | 5.605E+006 | 0.000E+000 | 4.968E-003 | 4.1893E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 136 | 3.048E+001 | 0.2986 | 1.6366 | 1.6949 | 48.91 | 7.99 | 8.49 | 3.2408 | 8.429E-010 | 0.000E+000 | 5.619E+006 | 0.000E+000 | 4.736E-003 | 4.2238E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| ZSTED | TIME | CSTI | SDD | FLC | TEMP | рн | DHM | FDH | DURDE | NUC DATE | CIPFI | NUC FLUX | ከምם םוייי | M.DSTI | |
| 137 | 3.098E+001 | 0.2963 | 1.6285 | 1.6949 | 48.71 | 8.00 | 8.49 | 3.2528 | 8.033E-010 | 0.000E+000 | 5.631E+006 | 0.000E+000 | 4.524E-003 | 4.2572E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| CTFD. | TTME | CGII | GDD | FLC | TEND | DU | DUM | FDU | DDEDE | MUC DATE | CADEA | NUC FLUY | DED DATE | ALDOTI | |
| 138 | 3.148E+001 | 0.2942 | 1.6209 | 1.6949 | 48.51 | 8.00 | 8.50 | 3.2645 | 7.669E-010 | 0.000E+000 | 5.644E+006 | 0.000E+000 | 4.328E-003 | 4.2896E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| STED | TIME | CSTL | ЧDD | FLC | тгмо | рн | DHM | FDH | DURDE | NUC DATE | CIDEI | NUC FLUY | הדם האדד | AL DOTI | |
| 139 | 3.198E+001 | 0.2921 | 1.6138 | 1.6949 | 48.31 | 8.01 | 8.51 | 3.2759 | 7.334E-010 | 0.000E+000 | 5.655E+006 | 0.000E+000 | 4.148E-003 | 4.3210E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| STED | TIME | CSTL | ЧDD | FLC | TEMD | рн | DHM | FDH | DURDE | NUC DATE | CIDEI | NUC FLUX | הדם סאיד | ML DSTI | |
| 140 | 3.248E+001 | 0.2901 | 1.6072 | 1.6949 | 48.11 | 8.01 | 8.51 | 3.2872 | 7.026E-010 | 0.000E+000 | 5.666E+006 | 0.000E+000 | 3.981E-003 | 4.3516E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| STEP | TIME | CSIL | SPP | FLC | темр | рн | PHM | FDH | RDEPE | NUC. RATE | CIRFI | NUC. FLUX | ከምክ ይነጥም | M.PSTI | |
| 141 | 3.298E+001 | 0.2882 | 1.6010 | 1.6949 | 47.91 | 8.02 | 8.52 | 3.2983 | 6.740E-010 | 0.000E+000 | 5.677E+006 | 0.000E+000 | 3.826E-003 | 4.3814E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| STEP | TIME | CSIL | SRP | FLC | TEMP | рн | PHM | FDH | RDEPE | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RØTE | ALPSTI- | |
| 142 | 3.348E+001 | 0.2864 | 1.5952 | 1.6949 | 47.71 | 8.02 | 8.52 | 3.3091 | 6.474E-010 | 0.000E+000 | 5.687E+006 | 0.000E+000 | 3.682E-003 | 4.4104E-002 | |
| | | | | | | | | | | | | | | | |
| STEP | TIME | CSIL | SBR | FLC | темр | рн | PHM | грн | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RØTE | ALPSTI. | |
| 143 | 3.398E+001 | 0.2846 | 1.5898 | 1.6949 | 47.51 | 8.03 | 8.53 | 3.3198 | 6.228E-010 | 0.000E+000 | 5.697E+006 | 0.000E+000 | 3.548E-003 | 4.4386E-002 | |

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA
| | | | DE LO | A S PROCES | CTUALIZA OS DE NUC | CIÓN DEL CLEACIÓN | CÓDIGO | SILNUC | EN MATLAB F EPOSICIÓN MO | PARA LA MODEI LECULAR DE SÍ | LACIÓN NUMÉR LICE EN SISTEM | ICA IAS GEOTÉRMIC | cos | | |
|-------------------------|---------------------------------|-------------------|----------------|---------------|-----------------------|----------------------|-------------|---------------|-----------------------------|--------------------------------|--------------------------------|-------------------------|-------------------------|-----------------------|----------------|
| | | ANEX | 0 | RE | SULTAI | DOSE | N VEN | ITANA [| DE COMAN | DOS — SILI | NUC — MAT | LAB 7 | С | | |
| 📣 Comr | nand Window | | | | | | | | | | | | | | _ 0 <u>_</u> x |
| <u>F</u> ile <u>E</u> d | it De <u>b</u> ug <u>D</u> eskt | op <u>W</u> indov | v <u>H</u> elp | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 144 | 3.448E+001 | 0.2829 | 1.5847 | 1.6949 | 47.31 | 8.03 | 8.53 | 3.3303 | 5.998E-010 | 0.000E+000 | 5.707E+006 | 0.000E+000 | 3.423E-003 | 4.4662E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 145 | 3.498E+001 | 0.2813 | 1.5799 | 1.6949 | 47.11 | 8.04 | 8.54 | 3.3407 | 5.784E-010 | 0.000E+000 | 5.716E+006 | 0.000E+000 | 3.306E-003 | 4.4932E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 146 | 3.548E+001 | 0.2797 | 1.5754 | 1.6949 | 46.91 | 8.04 | 8.54 | 3.3510 | 5.583E-010 | 0.000E+000 | 5.725E+006 | 0.000E+000 | 3.196E-003 | 4.5195E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 147 | 3.598E+001 | 0.2781 | 1.5712 | 1.6949 | 46.71 | 8.05 | 8.55 | 3.3611 | 5.395E-010 | 0.000E+000 | 5.733E+006 | 0.000E+000 | 3.093E-003 | 4.5452E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 148 | 3.648E+001 | 0.2766 | 1.5673 | 1.6949 | 46.51 | 8.05 | 8.55 | 3.3710 | 5.218E-010 | 0.000E+000 | 5.742E+006 | 0.000E+000 | 2.996E-003 | 4.5704E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 149 | 3.698E+001 | 0.2752 | 1.5636 | 1.6949 | 46.31 | 8.06 | 8.56 | 3.3809 | 5.052E-010 | 0.000E+000 | 5.750E+006 | 0.000E+000 | 2.905E-003 | 4.5951E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 150 | 3.748E+001 | 0.2738 | 1.5602 | 1.6949 | 46.11 | 8.06 | 8.56 | 3.3906 | 4.896E-010 | 0.000E+000 | 5.757E+006 | 0.000E+000 | 2.819E-003 | 4.6193E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | - |
| 151 | 3.798E+001 | 0.2724 | 1.5570 | 1.6949 | 45.91 | 8.07 | 8.57 | 3.4003 | 4.748E-010 | 0.000E+000 | 5.765E+006 | 0.000E+000 | 2.737E-003 | 4.6430E-002 | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 152 | 3.848E+001 | 0.2711 | 1.5540 | 1.6949 | 45.71 | 8.07 | 8.57 | 3.4098 | 4.609E-010 | 0.000E+000 | 5.772E+006 | 0.000E+000 | 2.661E-003 | 4.6663E-002 | |
| KSTEP | TIME 3.898 E +001 | CSIL 0.2698 | SRR 1.5512 | FLC 1.6949 | TEMP 45.51 | PH 8.08 | PHN 8.58 | FPH 3.4192 | RDEPF 4.477E-010 | NUC. RATE 0.000E+000 | CAREA 5.780E+006 | NUC. FLUX 0.000E+000 | DEP. RATE 2.588E-003 | ALPSIL 4.6891E-002 | |

| | | | DE LO | A S PROCESC | CTUALIZA | CIÓN DEL | CÓDIGO HOMOG | SILNUC | EN MATLAB F EPOSICIÓN MOI | PARA LA MODEI LECULAR DE SÍI | LACIÓN NUMÉR | ICA IAS GEOTÉRMIC | cos | | |
|-----------------|---------------------------------|-------------------|----------------|----------------|----------|----------|-----------------|---------|------------------------------|---------------------------------|--------------|----------------------|------------|-------------|--|
| | | ANEX | 0 | RE | SULTAI | DOS EI | N VEN | ITANA E | DE COMAN | DOS — SILI | NUC — MAT | LAB 7 | С | (| |
| k Comn | and Window | | | | | | | | | | | | | | |
| ile <u>E</u> di | t De <u>b</u> ug <u>D</u> eskti | op <u>W</u> indov | v <u>H</u> elp | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 154 | 3.948E+001 | 0.2685 | 1.5486 | 1.6949 | 45.31 | 8.08 | 8.58 | 3.4286 | 4.352E-010 | 0.000E+000 | 5.787E+006 | 0.000E+000 | 2.519E-003 | 4.7115E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 155 | 3.998E+001 | 0.2673 | 1.5461 | 1.6949 | 45.11 | 8.09 | 8.59 | 3.4379 | 4.234E-010 | 0.000E+000 | 5.793E+006 | 0.000E+000 | 2.453E-003 | 4.7336E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 156 | 4.048E+001 | 0.2661 | 1.5439 | 1.6949 | 44.91 | 8.09 | 8.59 | 3.4470 | 4.122E-010 | 0.000E+000 | 5.800E+006 | 0.000E+000 | 2.391E-003 | 4.7552E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 157 | 4.098E+001 | 0.2650 | 1.5418 | 1.6949 | 44.71 | 8.09 | 8.59 | 3.4562 | 4.015E-010 | 0.000E+000 | 5.806E+006 | 0.000E+000 | 2.331E-003 | 4.7765E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 158 | 4.148E+001 | 0.2638 | 1.5398 | 1.6949 | 44.51 | 8.10 | 8.60 | 3.4652 | 3.913E-010 | 0.000E+000 | 5.813E+006 | 0.000E+000 | 2.275E-003 | 4.7975E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 159 | 4.198E+001 | 0.2627 | 1.5380 | 1.6949 | 44.31 | 8.10 | 8.60 | 3.4742 | 3.817E-010 | 0.000E+000 | 5.819E+006 | 0.000E+000 | 2.221E-003 | 4.8181E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 160 | 4.248E+001 | 0.2616 | 1.5364 | 1.6949 | 44.11 | 8.11 | 8.61 | 3.4831 | 3.724E-010 | 0.000E+000 | 5.825E+006 | 0.000E+000 | 2.169E-003 | 4.8384E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 161 | 4.298E+001 | 0.2606 | 1.5348 | 1.6949 | 43.91 | 8.11 | 8.61 | 3.4919 | 3.636E-010 | 0.000E+000 | 5.831E+006 | 0.000E+000 | 2.120E-003 | 4.8584E-002 | |
| STEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 162 | 4.348E+001 | 0.2596 | 1.5334 | 1.6949 | 43.71 | 8.12 | 8.62 | 3.5007 | 3.552E-010 | 0.000E+000 | 5.836E+006 | 0.000E+000 | 2.073E-003 | 4.8781E-002 | |
| 3TEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | РН | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
| 163 | 4.398E+001 | 0.2585 | 1.5322 | 1.6949 | 43.51 | 8.12 | 8.62 | 3.5095 | 3.472E-010 | 0.000E+000 | 5.842E+006 | 0.000E+000 | 2.028E-003 | 4.8975E-002 | |

| | | | DE LO | S PROCESC | S DE NUC | CLEACIÓN | номос | ÉNEA Y D | EPOSICIÓN MOI | LECULAR DE SÍ | LICE EN SISTEM | AS GEOTÉRMIC | os | | |
|--------------------------|---------------------------------|-------------------|----------------|---------------|---------------|------------|-------------|---------------|---------------------|-------------------------|---------------------|-------------------------|-------------------------|-----------------------|--------|
| | | ANEX | 0 | RES | SULTA | DOS EI | N VEN | ITANA E | DE COMAN | DOS — SILI | NUC — MAT | LAB 7 | С | | |
| 🙏 Comn | nand Window | | | | | | | | | | | | | | |
| <u>F</u> ile <u>E</u> di | t De <u>b</u> ug <u>D</u> eskti | op <u>W</u> indov | v <u>H</u> elp | | | | | | | | | | | | |
| KSTEP 163 | TIME 4.398E+001 | CSIL 0.2585 | SRR 1.5322 | FLC 1.6949 | TEMP 43.51 | PH 8.12 | PHN 8.62 | FPH 3.5095 | RDEPF 3.472E-010 | NUC. RATE 0.000E+000 | CAREA 5.842E+006 | NUC. FLUX 0.000E+000 | DEP. RATE 2.028E-003 | ALPSIL 4.8975E-002 | |
| KSTEP 165 | TIME 4.498E+001 | CSIL 0.2566 | SRR 1.5300 | FLC 1.6949 | TEMP 43.11 | PH 8.13 | PHN 8.63 | FPH 3.5268 | RDEPF 3.321E-010 | NUC. RATE 0.000E+000 | CAREA 5.853E+006 | NUC. FLUX 0.000E+000 | DEP. RATE 1.944E-003 | ALPSIL 4.9356E-002 | |
| KSTEP 167 | TIME 4.598E+001 | CSIL 0.2547 | SRR 1.5283 | FLC 1.6949 | TEMP 42.71 | PH 8.14 | PHN 8.64 | FPH 3.5439 | RDEPF 3.183E-010 | NUC. RATE 0.000E+000 | CAREA 5.863E+006 | NUC. FLUX 0.000E+000 | DEP. RATE 1.866E-003 | ALPSIL 4.9726E-002 | |
| KSTEP 169 | TIME 4.698E+001 | CSIL 0.2529 | SRR 1.5270 | FLC 1.6949 | TEMP 42.31 | PH 8.15 | PHN 8.65 | FPH 3.5608 | RDEPF 3.056E-010 | NUC. RATE 0.000E+000 | CAREA 5.873E+006 | NUC. FLUX 0.000E+000 | DEP. RATE 1.795E-003 | ALPSIL 5.0087E-002 | |
| KSTEP 171 | TIME 4.798E+001 | CSIL 0.2512 | SRR 1.5261 | FLC 1.6949 | TEMP 41.91 | PH 8.15 | PHN 8.65 | FPH 3.5776 | RDEPF 2.938E-010 | NUC. RATE 0.000E+000 | CAREA 5.883E+006 | NUC. FLUX 0.000E+000 | DEP. RATE 1.728E-003 | ALPSIL 5.0440E-002 | |
| KSTEP 173 | TIME 4.898E+001 | CSIL 0.2495 | SRR 1.5255 | FLC 1.6949 | TEMP 41.51 | PH 8.16 | PHN 8.66 | FPH 3.5943 | RDEPF 2.829E-010 | NUC. RATE 0.000E+000 | CAREA 5.892E+006 | NUC. FLUX 0.000E+000 | DEP. RATE 1.667E-003 | ALPSIL 5.0784E-002 | |
| \ SILC | OUT SILOU | IT S | ILOUT | SILOU | r s | ILOUT | SIL | .out | SILOUT | SILOUT | SILOUT | SILOUT | SILOUT | SILOUT | SILOUT |
| SILIC | a concentrat | 'ION HAS | DROPPED | BELOW SI | LOUT = | 0.2500 | | | | | | | | | |
| ∢ | | ,,,,,,,,,,, | ,,,,,,,,,, | | | ,,,,,,,,, | | | | | | | | | |

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA

ACTUALIZACIÓN DEL CÓDIGO SILNUC EN MATLAB PARA LA MODELACIÓN NUMÉRICA DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS ANEXO RESULTADOS EN VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – MATLAB 7 С 🙏 Command Window File Edit Debug Desktop Window Help KSTEP = 173 TSPEC= 4.8983E+001 TEMP = 41.51 PH = 8.16 FLASH = 0.4100 GLASH = 0.0000E+000 CSIL = 0.2495 FLC = 1.6949 SALT MOLALITY = 3.0508E-001 SOL. CORR. FACTOR = 1.0102 SOD. ACT. = 2.1859E-001 PHN = 8.6640 FPH = 3.5974 FINT = 0.4577 GAMZ = 48.27 GAMMA = 16.95 DQS = 6.840E+014 AKIN = 2.181 DKIN = 1.000 TOTF = 1.017E-003 ALPF = 1.0000 RKF1 = 1.298E+001RKF2 = 1.296E+001 RATEKF = 1.318E-002 RATEKT = 2.899E-011 PKW = 13.495 PKSIL = 9.601 PKF = 3.313 GSIL = 0.6797 GF = 0.7474 GNA = 0.7165 EPSD = 72.65 DENS = 0.9916 ADH = 0.5257 BDH = 0.3312 CSILS = 0.1573 ALPSIL = 0.0510 CSI = 0.0127 SRA = 1.5049 RATEK = 1.0466E-010 RDEPF = 2.7638E-010 FKINL = 3.5251E-008 SRR = 1.5202 RNUC = 8.417E-008 ANNUC = 5.530E+001 ZLD = 2.004E-002 CN = 7.208E-001 QLP = 3.340E+025 QT = 3.121E+020 RANUC = 4.508E+018 TAUC = 8.634E+002 NCLC = 94 TOTAL NO. = 1.8448E+019 AREA = 5.8919E+006 AVER. RAD. = 1.5444E-007 AREA = 3.1939E-013 MASS = 4.2252E-020 COLL. MASS = 0.7794 DIS. SIL. = 0.2495 SUM = 1.0289 SHOULD BE = 1.0288 PERCENT DIF. = 0.0110

| Actualización del código SILNUC en MATLAB para la modelación numérica |
|--|
| DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICOS |

RESULTADOS EN VENTANA DE COMANDOS — SILNUC — MATLAB 7

С

| 🍌 Command Window | | | | | | | | | |
|---|---|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|-----------------------|--------------|
| <u>File E</u> dit De <u>b</u> ug <u>D</u> | <u>)</u> esktop <u>W</u> indow <u>H</u> elp | 3 | | | | | | | ¥ |
| NUMBER OF PART | FICLES IN EACH CL | ASS | | | | | | | <u> </u> |
| | | | | | | | | | |
| 2.13613E+016 | 2.67017E+015 | 1.03898E+000 | 1.99013E+015 | 5.58714E+015 | 1.06534E+016 | 1.73328E+016 | 2.56948E+016 | 3.58033E+016 | 5.13184E+016 |
| 6.22569E+016 | 7.75780E+016 | 9.47597E+016 | 1.19305E+017 | 1.33276E+017 | 1.60775E+017 | 1.75991E+017 | 2.00240E+017 | 2.33101E+017 | 2.45721E+017 |
| 2.78831E+017 | 2.91373E+017 | 3.24525E+017 | 3.34755E+017 | 3.66972E+017 | 3.74421E+017 | 4.04921E+017 | 4.15030E+017 | 4.43146E+017 | 4.46961E+017 |
| 4.71652E+017 | 4.69151E+017 | 4.89830E+017 | 4.81551E+017 | 4.98082E+017 | 4.85010E+017 | 4.97620E+017 | 4.80953E+017 | 4.90106E+017 | 4.71047E+017 |
| 4.77323E+017 | 4.56952E+017 | 4.60959E+017 | 4.40161E+017 | 4.42467E+017 | 4.21919E+017 | 4.23024E+017 | 4.03205E+017 | 4.03528E+017 | 3.84757E+017 |
| 3.84633E+017 | 3.67097E+017 | 3.66791E+017 | 3.50582E+017 | 3.50295E+017 | 3.26680E+017 | 2.79194E+017 | 2.29949E+017 | 1.96913E+017 | 1.64146E+017 |
| 1.40744E+017 | 1.18170E+017 | 1.01311E+017 | 8.54324E+016 | 7.31835E+016 | 6.18762E+016 | 5.29356E+016 | 4.48184E+016 | 3.82798E+016 | 3.24247E+016 |
| 2.76429E+016 | 2.34098E+016 | 1.99179E+016 | 1.68561E+016 | 1.43125E+016 | 1.21000E+016 | 1.02530E+016 | 8.65732E+015 | 7.32116E+015 | 6.17340E+015 |
| 5.21058E+015 | 4.38756E+015 | 3.69657E+015 | 3.10839E+015 | 2.61450E+015 | 2.19569E+015 | 1.84454E+015 | 1.54790E+015 | 1.29922E+015 | 1.08947E+015 |
| 9.13611E+014 | 7.65511E+014 | 6.41362E+014 | 5.36954E+014 | | | | | | |
| | | | | | | | | | |
| | | | | | | | | | |
| PARTICLE RADII | ſ | | | | | | | | |
| 5.35250E-007 | 8.85250E-007 | 2.79442E-007 | 2.72540E-007 | 2.68418E-007 | 2.61621E-007 | 2.57831E-007 | 2.54149E-007 | 2.50555 E -007 | 2.49879E-007 |
| 2.46417E-007 | 2.43027E-007 | 2.39693E-007 | 2.39212E-007 | 2.36002E-007 | 2.35598E-007 | 2.32483E-007 | 2.29390E-007 | 2.29049E-007 | 2.26111E-007 |
| 2.14944E-007 | 1.96181E-007 | 1.95912E-007 | 1.87062E-007 | 1.86823E-007 | 1.82737E-007 | 1.82529E-007 | 1.74305E-007 | 1.74123E-007 | 1.68099E-007 |
| 1.67943E-007 | 1.63628E-007 | 1.63497E-007 | 1.58879E-007 | 1.58654E-007 | 1.53153E-007 | 1.53063E-007 | 1.47875E-007 | 1.47802E-007 | 1.43553E-007 |
| 1.43401E-007 | 1.39991E-007 | 1.39943E-007 | 1.35915E-007 | 1.35875E-007 | 1.28661E-007 | 1.28628E-007 | 1.23877E-007 | 1.23848E-007 | 1.20176E-007 |
| 1.20150E-007 | 1.17298E-007 | 1.17273E-007 | 1.13998E-007 | 1.13972E-007 | 1.10745E-007 | 1.11305E-007 | 1.10103E-007 | 1.10710E-007 | 1.08976E-007 |
| 1.09817E-007 | 1.06890E-007 | 1.08963E-007 | 1.06371E-007 | 1.06912E-007 | 1.05894E-007 | 1.06436E-007 | 1.05465E-007 | 1.06007E-007 | 1.05084E-007 |
| 1.05628E-007 | 1.04152E-007 | 1.05301E-007 | 1.03873E-007 | 1.04964E-007 | 1.02245E-007 | 1.04197E-007 | 1.01803E-007 | 1.04021E-007 | 1.01672E-007 |
| 1.03893E-007 | 1.01591E-007 | 1.03813E-007 | 1.01555E-007 | 1.03778E-007 | 1.01565E-007 | 1.03787E-007 | 1.01616E-007 | 1.03836E-007 | 1.01706E-007 |
| 1.03924E-007 | 1.01834E-007 | 1.04049E-007 | 1.02258E-007 | | | | | | |
| 4 | | | | | | | | | |

| Actualización del código SILNUC en MATLAB para la modelación numérica |
|---|
| DE LOS PROCESOS DE NUCLEACIÓN HOMOGÉNEA Y DEPOSICIÓN MOLECULAR DE SÍLICE EN SISTEMAS GEOTÉRMICO |

RESULTADOS EN VENTANA DE COMANDOS — SILNUC — MATLAB 7

С

| Eile Edit Debug Desktop Window Help TOTAL MASS IN EACH CLASS 3.03098E-002 1.71404E-002 2.09782E-019 3.72786E-004 9.99797E-004 1.76518E-003 2.74890E-003 3.90298E-003 5.21100E-003 7.406 8.61955E-003 1.03036E-002 1.20746E-002 1.51109E-002 1.62100E-002 1.94543E-002 2.04620E-002 2.23647E-002 2.59189E-002 2.6262 | 180E-003 |
|---|-------------------|
| TOTAL MASS IN EACH CLASS 3.03098E-002 1.71404E-002 2.09782E-019 3.72786E-004 9.99797E-004 1.76518E-003 2.74890E-003 3.90298E-003 5.21100E-003 7.406 8.61955E-003 1.03036E-002 1.20746E-002 1.51109E-002 1.62100E-002 1.94543E-002 2.04620E-002 2.23647E-002 2.59189E-002 2.626 | 180 E -003 |
| 3.03098E-002 1.71404E-002 2.09782E-019 3.72786E-004 9.99797E-004 1.76518E-003 2.74890E-003 3.90298E-003 5.21100E-003 7.404 8.61955E-003 1.03036E-002 1.20746E-002 1.51109E-002 1.62100E-002 1.94543E-002 2.04620E-002 2.23647E-002 2.59189E-002 2.624 | 380E-003 |
| 8.61955E-003 1.03036E-002 1.20746E-002 1.51109E-002 1.62100E-002 1.94543E-002 2.04620E-002 2.23647E-002 2.59189E-002 2.620 | |
| | 340E-002 |
| 2.56214E-002 2.03566E-002 2.25797E-002 2.02753E-002 2.21418E-002 2.11411E-002 2.27851E-002 2.03375E-002 2.16471E-002 1.964 | 150E-002 |
| 2.06725E-002 1.90184E-002 1.98089E-002 1.78702E-002 1.84052E-002 1.61219E-002 1.65119E-002 1.43905E-002 1.46426E-002 1.289 | 940E-002 |
| 1.30243E-002 1.15999E-002 1.16896E-002 1.02258E-002 1.02704E-002 8.31484E-003 8.33020E-003 7.09227E-003 7.09302E-003 6.17 | €913E-003 |
| 6.17311E-003 5.48206E-003 5.47394E-003 4.80585E-003 4.79861E-003 4.10564E-003 3.56233E-003 2.83999E-003 2.47242E-003 1.965 | 566E-003 |
| 1.72473E-003 1.33537E-003 1.21276E-003 9.51423E-004 8.27513E-004 6.79871E-004 5.90601E-004 4.86475E-004 4.21950E-004 3.48 | 153E-004 |
| 3.01448E-004 2.44732E-004 2.15190E-004 1.74802E-004 1.53151E-004 1.19672E-004 1.07325E-004 8.45174E-005 7.62471E-005 6.002 | 370E-005 |
| 5.40671E-005 4.25666E-005 3.82685E-005 3.01253E-005 2.70393E-005 2.12855E-005 1.90810E-005 1.50285E-005 1.34591E-005 1.060 |)58E-005 |
| 9.48854E-006 7.48018E-006 6.68499E-006 5.31268E-006 | |
| | |
| | |
| | |
| | F |

ANEXO

RESULTADOS EN VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – MATLAB 7

С

🙏 Command Window File Edit Debug Desktop Window Help ΡH RDEPF NUC. RATE CAREA NUC. FLUX ALPSIL KSTEF TIME CSIL SRR FLC TEMP PHN FPH DEP. RATE 2.251E+000 0.9740 2.0113 1.6314 124.95 6.88 7.33 1.2023 3.982E-007 1.957E+015 4.752E+004 1.128E-005 1.892E-002 1.2564E-002 1 2.374E+000 4.052E-007 2.235E+018 6.013E+004 1.060E-002 2.436E-002 11 0.9800 2.1612 1.6466 118.80 6.91 7.37 1.2520 1.2612E-002 1.773E+019 1.425E+005 7.145E-002 2.452E+000 0.9787 2.2546 1.6564 114.89 6.93 7.40 1.2888 3.917E-007 5.580E-002 1.2698E-002 16 2.483E+000 0.9756 2.2879 1.6604 113.33 6.94 7.41 1.3057 3.814E-007 2.821E+019 2.115E+005 1.093E-001 8.068E-002 1.2764E-002 18 2.687E+005 2.499E+000 0.9725 2.3015 1.6624 6.95 7.42 1.3152 3.742E-007 3.508E+019 1.331E-001 1.005E-001 1.2816E-002 112.55 19 2.515E+000 0.9686 2.3135 1.6644 111.77 6.96 7.42 1.3254 3.660E-007 4.180E+019 3.365E+005 1.559E-001 1.232E-001 1.2878E-002 2.530E+000 0.9639 2.3237 1.6664 110.99 6.96 7.43 1.3361 3.569E-007 4.796E+019 4.149E+005 1.763E-001 1.481E-001 1.2950E-002 21 2.546E+000 0.9585 2.3322 7.44 1.3475 3.471E-007 5.321E+019 5.034E+005 1.933E-001 1.747E-001 1.3033E-002 22 1.6684 110.21 6.97 5.809E+019 6.023E+005 2.092E-001 2.027E-001 1.3128E-002 23 2.562E+000 0.9523 2.3389 1.6704 109.42 6.98 7.45 1.3596 3.365E-007 2.577E+000 0.9454 2.3437 1.6724 108.64 6.99 7.46 1.3723 3.253E-007 6.170E+019 7.103E+005 2.207E-001 2.310E-001 1.3234E-002 24 2.593E+000 3.137E-007 6.397E+019 8.255E+005 2.277E-001 2.589E-001 1.3350E-002 25 0.9378 2.3470 1.6744 107.86 6.99 7.46 1.3856 2.608E+000 0.9297 2.3489 1.6764 107.08 7.00 7.47 1.3994 3.018E-007 6.496E+019 9.463E+005 2.306E-001 2.856E-001 1.3476E-002 2.6 27 2.624E+000 0.9213 2.3495 1.6784 106.30 7.01 7.48 1.4138 2.898E-007 6.482E+019 1.071E+006 2.299E-001 3.104E-001 1.3610E-002 2.640E+000 0.9125 2.3492 1.6805 7.02 2.778E-007 6.378E+019 1.198E+006 2.262E-001 3.329E-001 1.3752E-002 28 105.52 7.49 1.4285 29 2.655E+000 0.9035 2.3481 1.6825 104.74 7.03 7.50 1.4437 2.660E-007 6.207E+019 1.326E+006 2.204E-001 3.528E-001 1.3900E-002 2.671E+000 0.8943 2.3464 1.6845 103.96 7.04 7.51 1.4592 2.544E-007 5.990E+019 1.454E+006 2.131E-001 3.700E-001 30 1.4054E-002 2.687E+000 0.8851 2.3442 1.6866 103.17 7.05 7.52 1.4751 2.430E-007 5.747E+019 1.582E+006 2.050E-001 3.844E-001 1.4213E-002 31 2.702E+000 0.8758 2.3417 1.6886 102.39 7.06 2.320E-007 5.493E+019 1.708E+006 1.964E-001 3.963E-001 1.4377E-002 7.53 1.4912 32 2.718E+000 0.8666 2.3390 1.6907 101.61 7.07 7.55 1.5075 2.214E-007 5.239E+019 1.832E+006 1.879E-001 4.056E-001 33 1.4544E-002 2.733E+000 0.8574 2.3361 1.6927 100.83 7.08 7.56 1.5240 2.111E-007 4.993E+019 1.955E+006 1.796E-001 4.127E-001 1.4715E-002 34 2.749E+000 0.8483 2.3331 1.6948 100.05 7.09 7.57 1.5408 2.013E-007 4.761E+019 2.075E+006 1.717E-001 4.176E-001 1.4889E-002 3.5 2.765E+000 0.8384 7.09 1.5533 1.941E-007 4.548E+019 2.190E+006 1.644E-001 4.251E-001 36 2.3096 1.6949 100.00 7.58 1.5048E-002 2.780E+000 0.8287 1.6949 100.00 7.10 1.5613 1.860E-007 3.621E+019 2.298E+006 1.343E-001 4.276E-001 1.5219E-002 37 2.2833 7.58 2.2587 38 2.796E+000 0.8198 1.6949 100.00 7.10 7.58 1.5689 1.785E-007 2.551E+019 2.392E+006 9.799E-002 4.270E-001 1.5382E-002 2.812E+000 0.8116 2.2358 1.6949 100.00 7.11 1.5760 1.715E-007 1.822E+019 2.474E+006 7.232E-002 4.244E-001 1.5537E-002 39 7.59 40 2.827E+000 0.8039 2.2142 1.6949 100.00 7.11 7.59 1.5828 1.650E-007 1.310E+019 2.548E+006 5.369E-002 4.204E-001 1.5686E-002 2.1936 100.00 4.152E-001 1.5831E-002 41 2.843E+000 0.7966 1.6949 7.12 7.60 1.5894 1.587E-007 9.457E+018 2.616E+006 3.996E-002 42 2.858E+000 0.7895 2.1739 1.6949 100.00 7.12 7.60 1.5958 1.527E-007 6.836E+018 2.679E+006 2.976E-002 4.092E-001 1.5972E-002 7.12 43 2.874E+000 0.7828 2.1549 1.6949 100.00 7.61 1.6020 1.470E-007 4.939E+018 2.738E+006 2.215E-002 4.025E-001 1.6111E-002 2.890E+000 0.7763 2.1366 1.6949 100.00 7.13 7.61 1.6080 1.415E-007 3.565E+018 2.794E+006 1.645E-002 3.952E-001 1.6247E-002 44 45 2.905E+000 0.7700 2.1188 1.6949 100.00 7.13 7.61 1.6139 1.361E-007 2.567E+018 2.846E+006 1.219E-002 3.875E-001 1.6381E-002 2.921E+000 0.7639 2.1016 1.6949 100.00 7.14 7.62 1.6197 1.310E-007 1.843E+018 2.896E+006 9.003E-003 3.794E-001 1.6513E-002 46 2.937E+000 0.7580 2.0849 100.00 7.14 1.260E-007 1.320E+018 2.944E+006 6.628E-003 3.709E-001 1.6643E-002 47 1.6949 7.62 1.6254 2.952E+000 0.7523 2.0686 1.6949 100.00 7.14 7.62 1.6310 1.211E-007 9.419E+017 2.990E+006 4.863E-003 3.622E-001 1.6772E-002 48 49 2.968E+000 0.7467 2.0528 1.6949 100.00 7.15 7.63 1.6365 1.165E-007 6.700E+017 3.034E+006 3.556E-003 3.533E-001 1.6899E-002 50 2.983E+000 0.7413 2.0374 100.00 7.15 1.6418 1.119E-007 4.751E+017 3.077E+006 2.591E-003 3.443E-001 1.7024E-002 1.6949 7.63 51 2.999E+000 0.7361 2.0224 1.6949 100.00 7.15 7.63 1.6471 1.075E-007 3.359E+017 3.117E+006 1.881E-003 3.352E-001 1.7148E-002

•

°¥ ≜

ANEXO

RESULTADOS EN VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – MATLAB 7

С

0.000E+000

0.000E+000

0.000E+000

0.000E+000

0.000E+000

0.000E+000

0.000E+000

0.000E+000

0.000E+000 1.775E-002

0.000E+000 8.466E-003

2.283E-002

1.697E-002

9.259E-003

5.455E-003

5.087E-003

4.744E-003

4.426E-003

4.131E-003

2.3728E-002

2.3981E-002

2.4181E-002

2.4571E-002

2.4788E-002

2.4991E-002

2.5123E-002

2.5248E-002

2.5365E-002

2.5476E-002

2.5580E-002

4.515E+006

4.537E+006

4.577E+006

4.596E+006

4.612E+006

4.620E+006

4.627E+006

4.632E+006

4.637E+006

4.640E+006

ъ

۰

🙏 Command Window - X File Edit Debug Desktop Window Help 3.015E+000 0.7310 2.0079 1.6949 100.00 7.16 1.033E-007 2.369E+017 3.157E+006 1.362E-003 3.261E-001 1.7270E-002 7.64 1.6523 3.030E+000 100.00 7.16 9.932E-008 1.668E+017 3.194E+006 9.849E-004 3.173E-001 53 0.7261 1.9938 1.6949 7.64 1.6573 1.7390E-002 54 3.046E+000 0.7212 1.9801 1.6949 100.00 7.16 7.64 1.6623 9.556E-008 1.172E+017 3.231E+006 7.106E-004 3.088E-001 1.7509E-002 55 3.062E+000 0.7166 1.9667 1.6949 100.00 7.16 7.64 1.6671 9.201E-008 8.226E+016 3.266E+006 5.116E-004 3.006E-001 1.7625E-002 56 3.077E+000 0.7120 1.9537 1.6949 100.00 7.17 7.65 1.67198.866E-008 5.692E+016 3.301E+006 3.635E-004 2.926E-001 1.7740E-002 3.108E+000 0.7031 1.9411 1.6949 100.00 7.17 1.6766 8.548E-008 0.000E+000 3.367E+006 0.000E+000 2.878E-001 1.7854E-002 57 7.65 58 3.140E+000 0.6947 1.9164 1.6949 100.00 7.18 7.66 1.6858 7.951E-008 0.000E+000 3.429E+006 0.000E+000 2.727E-001 1.8080E-002 100.00 59 3.171E+000 0.6867 1.8930 1.6949 7.18 7.66 1.6947 7.415E-008 0.000E+000 3.488E+006 0.000E+000 2.586E-001 1.8299E-002 0.6790 100.00 7.19 6.931E-008 0.000E+000 0.000E+000 60 3.202E+000 1.8707 1.6949 7.67 1.7033 3.543E+006 2.456E-001 1.8513E-002 0.6718 3.233E+000 1.8496 1.6949 100.00 7.19 7.67 1.7115 6.494E-008 0.000E+000 3.595E+006 0.000E+000 2.335E-001 1.8720E-002 61 62 3.265E+000 0.6649 1.8295 1.6949 100.00 7.20 7.68 1.7195 6.098E-008 0.000E+000 3.644E+006 0.000E+000 2.222E-001 1.8922E-002 63 3.296E+000 0.6583 1.8104 1.6949 100.00 7.20 7.68 1.7271 5.737E-008 0.000E+000 3.691E+006 0.000E+000 2.118E-001 1.9118E-002 1.7921 3.358E+000 0.6457 1.6949 100.00 7.20 1.7345 5.408E-008 0.000E+000 3.780E+006 0.000E+000 2.044E-001 1.9309E-002 64 7.69 65 3.421E+000 0.6342 1.7571 1.6949 100.00 7.21 7.69 1.7490 4.816E-008 0.000E+000 3.860E+006 0.000E+000 1.859E-001 1.9686E-002 3.483E+000 0.6237 1.7252 1.6949 100.00 7.22 7.70 1.7624 4.320E-008 0.000E+000 3.933E+006 0.000E+000 1.699E-001 2.0043E-002 66 67 3.546E+000 0.6141 1.6960 1.6949 100.00 7.23 7.71 1.7750 3.901E-008 0.000E+000 3.999E+006 0.000E+000 1.557E-001 2.0381E-002 3.608E+000 0.6054 1.6693 1.6949 100.00 7.24 7.72 1.7867 3.543E-008 0.000E+000 4.057E+006 0.000E+000 1.400E-001 2.0701E-002 68 69 3.671E+000 0.5978 1.6452 1.6949 100.00 7.24 7.72 1.7975 3.242E-008 0.000E+000 4.107E+006 0.000E+000 1.222E-001 2.0997E-002 100.00 70 3.733E+000 0.5910 1.6242 1.6949 7.25 7.73 1.8070 2.995E-008 0.000E+000 4.152E+006 0.000E+000 1.106E-001 2.1263E-002 71 3.796E+000 0.5850 1.6052 1.6949 100.00 7.25 7.73 1.8157 2.784E-008 0.000E+000 4.191E+006 0.000E+000 9.642E-002 2.1509E-002 72 3.858E+000 0.5796 1.5886 1.6949 100.00 7.26 7.74 1.8235 2.608E-008 0.000E+000 4.225E+006 0.000E+000 8.723E-002 2.1729E-002 73 3.983E+000 0.5698 1.5736 1.6949 100.00 7.26 7.74 1.8306 2.456E-008 0.000E+000 4.286E+006 0.000E+000 7.955E-002 2.1932E-002 74 4.108E+000 0.5614 1.5462 1.6949 100.00 7.27 7.75 1.8437 2.196E-008 0.000E+000 4.338E+006 0.000E+000 6.812E-002 2.2311E-002 75 4.233E+000 0.5547 1.5231 1.6949 100.00 7.28 7.76 1.8550 1.992E-008 0.000E+000 4.378E+006 0.000E+000 5.431E-002 2.2643E-002 100.00 4.637E-002 76 4.358E+000 0.5489 1.5044 1.6949 7.28 7.76 1.8643 1.837E-008 0.000E+000 4.411E+006 0.000E+000 2.2918E-002 77 4.483E+000 0.5440 1.4884 1.6949 100.00 7.29 7.77 1.8723 1.712E-008 0.000E+000 4.439E+006 0.000E+000 3.940E-002 2.3158E-002 78 4.733E+000 0.5357 1.4748 1.6949 100.00 7.29 7.77 1.8792 1.611E-008 0.000E+000 4.485E+006 0.000E+000 3.362E-002 2.3366E-002

1.448E-008

1.344E-008

1.267E-008

1.129E-008

1.059E-008

9.968E-009

9.583E-009

9.232E-009

8.913E-009

8.622E-009

0.000E+000

7.81 1.9497 8.356E-009 0.000E+000 4.642E+006 0.000E+000 3.858E-003

100.00

100.00

100.00

100.00

100.00

100.00

100.00

100.00

100.00

100.00

100.00

1.6949

1.6949

1.6949

1.6949

1.6949

1.6949

1.6949

1.6949

1.6949

7.30

7.30

7.30

7.31

7.32

7.32

7.32

7.32

7.33

7.33

7.33

7.78

7.78

7.79

7.79

7.80

7.80

7.81

7.81

1.8911

1.8993

1.9058

1.9182

1.9251

1.9314

1.9431

1.9465

7.80 1.9356

7.80 1.9395

•

79

80

81

82

83

84

85

86

87

88

89

4.983E+000

5.233E+000

5.733E+000

6.233E+000

6.733E+000

7.233E+000

7.733E+000

8.233E+000

8.733E+000

9.233E+000

0.5301

0.5174

0.5128

0.5087

0.5060

0.5012

0.4990

0.4970

9.733E+000 0.4951 1.3442 1.6949

1.4518

0.5257 1.4361 1.6949

1.4239

1.4008

1.3882

1.3767

1.3623

1.3558

1.3498

0.5035 1.3692

ANEXO

116

117

118

119

120

121

122 123

124

125

126

127

128

4

2.048E+001

2.098E+001

2.148E+001

2.248E+001

2.298E+001

2.348E+001

2.598E+001

2.198E+001 0.3588

2.398E+001 0.3404

2.448E+001 0.3362

2.498E+001 0.3322

2.548E+001 0.3284

2.648E+001 0.3212

0.3751

0.3694

0.3640

0.3539

0.3492

0.3447

0.3247

1.5576

1.5599

1.5638

1.5687

1.5744

1.5815

1.5894

1.5981

1.6075

1.6179

1.6291

1.6414

1.6547 1.6949

1.6949

1.6949

1.6949

1.6949

1.6949

1.6949

1.6949

1.6949

1.6949

1.6949

1.6949

1.6949

68.17

66.92

65.67

64.42

63.17

61.92

60.67

59.42

58.17

56.92

55.67

54.42

53.17

7.69

7.71

7.73

7.74

7.76

7.78

7.80

7.82

7.84

7.85

7.87

7.89

7.91

8.18

8.20

8.22

8.26

8.28

8.29

8.31

8.33

8.37

8.39

2.6315

2.6682

2.7047

2.7778

2.8143

2.8509

2.8877

2.9248

2.9993

3.0367

8.24 2.7412

8.35 2.9619

RESULTADOS EN VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – MATLAB 7

С

🙏 Command Window - X File Edit Debug Desktop Window Help 1.023E+001 0.4938 1.3389 1.6949 100.00 7.33 7.81 1.9527 8.113E-009 0.000E+000 4.641E+006 0.000E+000 2.611E-003 90 2.5677E-002 1.073E+001 0.4926 1.6949 100.00 7.33 7.81 1.9547 7.952E-009 0.000E+000 4.639E+006 0.000E+000 2.476E-003 91 1.3354 2.5744E-002 92 1.123E+001 0.4914 1.3320 1.6949 100.00 7.33 7.81 1.9566 7.801E-009 0.000E+000 4.636E+006 0.000E+000 2.350E-003 2.5807E-002 93 1.173E+001 0.4903 1.3288 1.6949 100.00 7.33 7.82 1.9585 7.659E-009 0.000E+000 4.633E+006 0.000E+000 2.232E-003 2.5868E-002 94 1.223E+001 0.4893 1.3258 1.6949 100.00 7.34 7.82 1.9602 7.527E-009 0.000E+000 4.630E+006 0.000E+000 2.121E-003 2.5925E-002 1.323E+001 0.4864 1.3596 1.6949 97.58 7.35 7.83 1.9917 7.853E-009 0.000E+000 4.627E+006 0.000E+000 5.111E-003 2.6032E-002 96 97 1.373E+001 0.4834 1.3966 1.6949 95.08 7.37 7.85 2.0249 8.180E-009 0.000E+000 4.634E+006 0.000E+000 8.653E-003 2.6133E-002 1.4316 98 1.423E+001 0.4779 1.6949 92.58 7.39 7.87 2.0611 8.327E-009 0.000E+000 4.656E+006 0.000E+000 1.385E-002 2.6299E-002 1.473E+001 1.6949 90.08 7.41 8.154E-009 0.000E+000 4.691E+006 0.000E+000 99 0.4702 1.4606 7.90 2.1025 1.835E-002 2.6598E-002 100 1.523E+001 0.4616 1.4833 1.6949 87.58 7.44 7.92 2.1491 7.705E-009 0.000E+000 4.732E+006 0.000E+000 2.162E-002 2.7033E-002 101 1.573E+001 0.4519 1.5034 1.6949 85.08 7.46 7.95 2.1989 7.156E-009 0.000E+000 4.782E+006 0.000E+000 2.221E-002 2.7540E-002 1.984E-002 102 1.598E+001 0.4474 1.4954 1.6949 83.83 7.48 7.97 2.2342 6.356E-009 0.000E+000 4.804E+006 0.000E+000 2.8131E-002 1.623E+001 0.4427 1.5047 1.6949 82.58 7.50 7.98 2.2607 6.094E-009 0.000E+000 4.828E+006 0.000E+000 1.924E-002 2.8416E-002 103 104 1.648E+001 0.4381 1.5136 1.6949 81.33 7.51 8.00 2.2878 5.827E-009 0.000E+000 4.851E+006 0.000E+000 1.979E-002 2.8714E-002 105 1.673E+001 0.4334 1.5228 1.6949 80.08 7.53 8.01 2.3153 5.571E-009 0.000E+000 4.876E+006 0.000E+000 2.016E-002 2.9016E-002 106 1.698E+001 0.4287 1.5317 1.6949 78.83 7.54 8.03 2.3434 5.315E-009 0.000E+000 4.901E+006 0.000E+000 2.035E-002 2.9329E-002 107 1.723E+001 0.4241 1.5404 1.6949 77.58 7.56 8.05 2.3722 5.061E-009 0.000E+000 4.925E+006 0.000E+000 1.953E-002 2.9655E-002 108 1.748E+001 0.4195 1.5498 1.6949 76.33 7.57 8.06 2.4011 4.827E-009 0.000E+000 4.950E+006 0.000E+000 1.955E-002 2.9976E-002 109 1.773E+001 0.4149 1.5592 1.6949 75.08 7.59 8.08 2.4305 4.599E-009 0.000E+000 4.975E+006 0.000E+000 1.876E-002 3.0305E-002 110 1.798E+001 0.4105 1.5560 1.6949 74.42 7.60 8.09 2.4508 4.331E-009 0.000E+000 4.999E+006 0.000E+000 1.777E-002 3.0640E-002 1.823E+001 0.4063 1.5524 1.6949 73.79 7.61 8.10 2.4702 4.083E-009 0.000E+000 5.022E+006 0.000E+000 1.685E-002 3.0968E-002 111 0.4023 112 1.848E+001 1.5497 1.6949 73.17 7.62 8.11 2.4894 3.861E-009 0.000E+000 5.043E+006 0.000E+000 1.601E-002 3.1286E-002 113 1.898E+001 0.3947 1.5613 1.6949 71.92 7.63 8.12 2.5189 3.707E-009 0.000E+000 5.084E+006 0.000E+000 1.608E-002 3.1594E-002 114 1.948E+001 0.3877 1.5579 1.6949 70.67 7.65 8.14 2.5570 3.341E-009 0.000E+000 5.122E+006 0.000E+000 1.462E-002 3.2208E-002 69.42 115 1.998E+001 0.3811 1.5570 1.6949 7.67 8.16 2.5943 3.040E-009 0.000E+000 5.158E+006 0.000E+000 1.342E-002 3.2788E-002

2.781E-009

2.561E-009

2.372E-009

2.204E-009

2.052E-009

1.921E-009

1.801E-009

1.693E-009

1.594E-009

1.504E-009

1.423E-009

1.349E-009

0.000E+000

8.41 3.0742 1.283E-009 0.000E+000 5.491E+006 0.000E+000 7.043E-003

5.191E+006

5.221E+006

5.251E+006

5.279E+006

5.306E+006

5.332E+006

5.357E+006

5.382E+006

5.406E+006

5.428E+006

5.450E+006

5.471E+006

0.000E+000

1.274E-002

1.181E-002

1.130E-002

1.080E-002

1.012E-002

9.710E-003

9.436E-003

8.968E-003

8.591E-003

8.158E-003

7.754E-003

7.381E-003

3.3352E-002

3.3892E-002

3.4412E-002

3.4924E-002

3.5429E-002

3.5916E-002

3.6398E-002

3.6875E-002

3.7348E-002

3.7812E-002

3.8268E-002

3.8713E-002

3.9147E-002

•

ъ

۰

ANEXO

RESULTADOS EN VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – MATLAB 7

С

°¥ ▲

🉏 Command Window -X. File Edit Debug Desktop Window Help 3 2.698E+001 0.3179 1.6690 1.6949 51.92 7.93 1.222E-009 0.000E+000 5.510E+006 0.000E+000 6.735E-003 3.9571E-002 * 129 8.43 3.1119 50.67 7.95 1.167E-009 0.000E+000 5.528E+006 0.000E+000 6.453E-003 3.9985E-002 130 2.748E+001 0.3147 1.6844 1.6949 8.44 3.1497 131 2.798E+001 0.3117 1.6873 1.6949 49.91 7.96 8.46 3.1763 1.108E-009 0.000E+000 5.545E+006 0.000E+000 6.144E-003 4.0390E-002 132 2.848E+001 0.3088 1.6756 1.6949 49.71 7.97 8.46 3.1899 1.044E-009 0.000E+000 5.561E+006 0.000E+000 5.805E-003 4.0786E-002 133 2.898E+001 0.3060 1.6648 1.6949 49.51 7.97 8.47 3.2032 9.860E-010 0.000E+000 5.577E+006 0.000E+000 5.499E-003 4.1168E-002 2.948E+001 0.3034 1.6547 1.6949 49.31 7.98 3.2160 9.337E-010 0.000E+000 5.591E+006 0.000E+000 5.221E-003 134 8.48 4.1537E-002 135 2.998E+001 0.3010 1.6453 1.6949 49.11 7.98 8.48 3.2286 8.862E-010 0.000E+000 5.605E+006 0.000E+000 4.968E-003 4.1893E-002 8.429E-010 0.000E+000 136 3.048E+001 0.2986 1.6366 1.6949 48.91 7.99 8.49 3.2408 0.000E+000 5.619E+006 4.736E-003 4.2238E-002 1.6949 48.71 8.033E-010 137 3.098E+001 0.2963 1.6285 8.00 8.49 3.2528 0.000E+000 5.631E+006 0.000E+000 4.524E-003 4.2572E-002 1.6209 3.148E+001 0.2942 1.6949 48.51 8.00 8.50 3.2645 7.669E-010 0.000E+000 5.644E+006 0.000E+000 4.328E-003 4.2896E-002 138 139 3.198E+001 0.2921 1.6138 1.6949 48.31 8.01 8.51 3.2759 7.334E-010 0.000E+000 5.655E+006 0.000E+000 4.148E-003 4.3210E-002 140 3.248E+001 0.2901 1.6072 1.6949 48.11 8.01 8.51 3.2872 7.026E-010 0.000E+000 5.666E+006 0.000E+000 3.981E-003 4.3516E-002 3.298E+001 0.2882 1.6010 1.6949 47.91 8.02 8.52 3.2983 6.740E-010 0.000E+000 5.677E+006 0.000E+000 3.826E-003 4.3814E-002 141 142 3.348E+001 0.2864 1.5952 1.6949 47.71 8.02 8.52 3.3091 6.474E-010 0.000E+000 5.687E+006 0.000E+000 3.682E-003 4.4104E-002 143 3.398E+001 0.2846 1.5898 1.6949 47.51 8.03 8.53 3.3198 6.228E-010 0.000E+000 5.697E+006 0.000E+000 3.548E-003 4.4386E-002 3.448E+001 0.2829 1.5847 1.6949 47.31 8.03 8.53 3.3303 5.998E-010 0.000E+000 5.707E+006 0.000E+000 3.423E-003 4.4662E-002 144 145 3.498E+001 0.2813 1.5799 1.6949 47.11 8.04 8.54 3.3407 5.784E-010 0.000E+000 5.716E+006 0.000E+000 3.306E-003 4.4932E-002 146 3.548E+001 0.2797 1.5754 1.6949 46.91 8.04 8.54 3.3510 5.583E-010 0.000E+000 5.725E+006 0.000E+000 3.196E-003 4.5195E-002 1.5712 5.395E-010 147 3.598E+001 0.2781 1.6949 46.71 8.05 8.55 3.3611 0.000E+000 5.733E+006 0.000E+000 3.093E-003 4.5452E-002 148 3.648E+001 0.2766 1.5673 1.6949 46.51 8.05 8.55 3.3710 5.218E-010 0.000E+000 5.742E+006 0.000E+000 2.996E-003 4.5704E-002 149 3.698E+001 0.2752 1.5636 1.6949 46.31 8.06 8.56 3.3809 5.052E-010 0.000E+000 5.750E+006 0.000E+000 2.905E-003 4.5951E-002 1.5602 150 3.748E+001 0.2738 1.6949 46.11 8.06 8.56 3.3906 4.896E-010 0.000E+000 5.757E+006 0.000E+000 2.819E-003 4.6193E-002 151 3.798E+001 0.2724 1.5570 1.6949 45.91 8.07 8.57 3.4003 4.748E-010 0.000E+000 5.765E+006 0.000E+000 2.737E-003 4.6430E-002 152 3.848E+001 0.2711 1.5540 1.6949 45.71 8.07 8.57 3.4098 4.609E-010 0.000E+000 5.772E+006 0.000E+000 2.661E-003 4.6663E-002 1.5512 4.477E-010 153 3.898E+001 0.2698 1.6949 45.51 8.08 8.58 3.4192 0.000E+000 5.780E+006 0.000E+000 2.588E-003 4.6891E-002 154 3.948E+001 0.2685 1.5486 1.6949 45.31 8.08 8.58 3.4286 4.352E-010 0.000E+000 5.787E+006 0.000E+000 2.519E-003 4.7115E-002 155 3.998E+001 0.2673 1.5461 1.6949 45.11 8.09 8.59 3.4379 4.234E-010 0.000E+000 5.793E+006 0.000E+000 2.453E-003 4.7336E-002 3.4470 5.800E+006 0.000E+000 156 4.048E+001 0.2661 1.5439 1.6949 44.91 8.09 8.59 4.122E-010 0.000E+000 2.391E-003 4.7552E-002 157 4.098E+001 0.2650 1.5418 1.6949 44.71 8.09 8.59 3.4562 4.015E-010 0.000E+000 5.806E+006 0.000E+000 2.331E-003 4.7765E-002 158 4.148E+001 0.2638 1.5398 1.6949 44.51 8.10 8.60 3.4652 3.913E-010 0.000E+000 5.813E+006 0.000E+000 2.275E-003 4.7975E-002 1.5380 159 4.198E+001 0.2627 1.6949 44.31 8.10 8.60 3.4742 3.817E-010 0.000E+000 5.819E+006 0.000E+000 2.221E-003 4.8181E-002 4.248E+001 0.2616 1.5364 1.6949 44.11 8.11 3.4831 3.724E-010 0.000E+000 5.825E+006 0.000E+000 2.169E-003 4.8384E-002 160 8.61 161 4.298E+001 0.2606 1.5348 1.6949 43.91 8.11 8.61 3.4919 3.636E-010 0.000E+000 5.831E+006 0.000E+000 2.120E-003 4.8584E-002 162 4.348E+001 0.2596 1.5334 1.6949 43.71 8.12 8.62 3.5007 3.552E-010 0.000E+000 5.836E+006 0.000E+000 2.073E-003 4.8781E-002 4.398E+001 0.2585 1.5322 1.6949 43.51 8.12 3.472E-010 0.000E+000 5.842E+006 0.000E+000 2.028E-003 4.8975E-002 163 8.62 3.5095 165 4.498E+001 0.2566 1.5300 1.6949 43.11 8.13 8.63 3.5268 3.321E-010 0.000E+000 5.853E+006 0.000E+000 1.944E-003 4.9356E-002 167 4.598E+001 0.2547 1.5283 1.6949 42.71 8.14 8.64 3.5439 3.183E-010 0.000E+000 5.863E+006 0.000E+000 1.866E-003 4.9726E-002 169 4.698E+001 0.2529 1.5270 1.6949 42.31 8.15 8.65 3.5608 3.056E-010 0.000E+000 5.873E+006 0.000E+000 1.795E-003 5.0087E-002 **4** x 🍌 Command Window

File Edit Debug Desktop Window Help 1.6949 41.91 3.5776 2.938E-010 0.000E+000 5.883E+006 0.000E+000 1.728E-003 171 4.798E+001 0.2512 1.5261 8.15 8.65 5.0440E-002 4.898E+001 0.2495 1.5255 1.6949 41.51 8.16 8.66 3.5943 2.829E-010 0.000E+000 5.892E+006 0.000E+000 1.667E-003 5.0784E-002 173 4

RESULTADOS EN VENTANAS EMERGENTES - SILNUC - MATLAB 7

| | | Tab | a-D.1 | |
|---|-------------|--------------|------------------|-----------|
| 🚺 Tab | ola 1 | | | |
| File | Edit View I | insert Tools | Desktop Wi | ndow Help |
| - C 🖨 | | 8 2 2 4 | n • 4 | |
| | | | | |
| | TREF | FLASH | TEMP | PH |
| 1 | jp.o | 0.0 | 300.0 | 0.0 |
| 2 | 0.25 | 0.085 | 275.0 | 0.0 |
| 3 | 0.5 | 0.151 | 250.0 | 0.0 |
| 4 | 0.75 | 0.206 | 225.0 | 0.0 |
| 5 | 1.0 | 0.254 | 200.0 | 0.0 |
| 6 | 1.5 | 0.297 | 175.0 | 0.0 |
| 7 | 1.75 | 0.337 | 150.0 | 0.0 |
| 8 | 2.25 | 0.387 | 125.0 | 0.0 |
| 9 | 2.75 | 0.41 | 100.0 | 0.0 |
| 10 | 12.75 | 0.41 | 100.0 | 0.0 |
| 11 | 17.75 | 0.41 | 75.0 | 0.0 |
| 12 | 27.75 | 0.41 | 50.0 | 0.0 |
| and the second se | 1 | | 10101210 | 12020 |

Impresión de los datos de entrada de Tiempo, Agua Flasheada, Temperatura y pH.



Impresión de los datos de entrada de número de partículas coloidales, radios y masas de cada una, asi como del resultado del cálculo del número de partículas de sílice presentes para cada partícula coloidal.



Figura D.1-Numero de partículas coloidales presentes a los 2.25 min – Inicio de la nucleación.



Figura D.2-Numero de partículas coloidales presentes a los 48.983 min – Fin de la nucleación.



Figura D.3-Radio de las partículas coloidales presentes a los 2.25 min – Inicio de la nucleación.



Figura D.4-Radio de las partículas coloidales presentes a los 48.983 min – Fin de la nucleación.



Figura D.5-Masa de las partículas coloidales presentes a los 2.25 min – Inicio de la nucleación.



Figura D.6-Masa de las partículas coloidales presentes a los 48.983 min – Fin de la nucleación.



Figura D.7-Linea de evolución en el tiempo de cada uno los pasos de deposición molecular.



Figura D.8-Linea de evolución de la concentración de sílice disuelta.



Figura D.9-Linea de evolución de la tasa de saturación y solubilidad de sílice amorfa.



Figura D.10-Linea de evolución del factor de concentración por flasheo.



Figura D.11-Linea de evolución de la temperatura.



Figura D.12-Linea de evolución del pH.



Figura D.13-Linea de evolución del pH nominal.



Figura D.14-Linea de evolución de la función F(pH,pHnom).

D

ANEXO RESULTADOS EN VENTANAS EMERGENTES – SILNUC – MATLAB 7



Figura D.15-Linea de evolución de la tasa de deposición molecular.



Figura D.16-Linea de evolución de la tasa de nucleación.



Figura D.17-Linea de evolución del área superficial de la sílice coloidal.



Figura D.18-Linea de evolución de la tasa de conversión de sílice disuelta a sílice coloidal por nucleación de nuevas partículas.



Figura D.19-Linea de evolución de la tasa de deposición.



Figura D.20-Linea de evolución de la fracción de sílice monomérica en forma iónica.

RESULTADOS EN VENTANAS EMERGENTES — SILNUC — MATLAB 7

D

Tabla-D.3-Parte 1

📣 Tabla 3

<u>File Edit View Insert Tools Desktop Window H</u>elp

🗅 🚅 🖶 🎒 🔖 🔍 약 🌒 🐙 🔲 📰 💷 🗔

| KSTE | P TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
|---------|--------------|-------------|---------------|-------------|---------------|---------------|---------------|--------------|---------------|---------------|---------------|---------------|-------------|---------------|-----|
| 1 1.0 | 2.2509765625 | 0.973951763 | | 1.631440925 | .124.9511718 | . 6.880821902 | 7.332978842 | 1.202308037. | 3.982094165 | 1.956758295 | 47517.39542 | 1.127656262 | 0.018921874 | 0.012563734 | |
| 2 11.0 | 2.3740234375 | 0.980025069 | . 2.161152864 | 1.646646405 | .118.7988281 | . 6.911111939 | 7.369992307 | 1.251991458. | 4.051565359 | . 2.234909203 | 60133.58225 | . 0.010595680 | 0.024363513 | . 0.012611609 | 1 — |
| 3 16.0 | 2.4521484375 | 0.978693732 | . 2.254586402 | 1.656448664 | . 114.8925781 | 6.933596399 | 7.396718961 | 1.288797715. | 3.916912826 | . 1.773414616 | 142468.1101 | .0.071452435 | 0.055803516 | 0.012697807 | |
| 4 18.0 | 2.4833984375 | 0.975569687 | . 2.287941444 | 1.660402323 | . 113.3300781 | . 6.943967782 | 7.408781659 | 1.305698943. | 3.813920549 | . 2.821436673 | 211528.9953 | .0.109276103 | 0.080675478 | 0.012763897 | |
| 5 19.0 | 2.4990234375 | 0.972470563 | . 2.301510745 | 1.662386238 | .112.5488281 | . 6.949861836 | 7.415520203 | 1.315242297. | 3.741536511 | 3.508166255 | 268666.8866 | .0.133132135 | 0.100522696 | . 0.012815845 | |
| 6 20.0 | 2.5146484375 | 0.968596845 | . 2.313457122 | 1.664374900 | .111.7675781 | . 6.956134219 | 7.422636306 | 1.325382867. | . 3.659696074 | 4.179661631 | 336513.7518 | .0.155887954 | 0.123153805 | . 0.012877829 | |
| 7 21.0 | 2.5302734375 | 0.963943106 | . 2.323704389 | 1.666368325 | . 110.9863281 | . 6.962794590 | 7.430139633 | 1.336141061. | 3.569105730 | 4.795949684 | 414911.3815 | .0.176325023 | 0.148086258 | 0.012950267 | |
| 8 22.0 | 2.5458984375 | 0.958523051 | 2.332216535 | 1.668366532 | . 110.2050781 | . 6.969845646 | 7.438032887 | 1.347527307. | 3.470668327 | . 5.320515808 | 503416.7826 | . 0.193339343 | 0.174719268 | . 0.013033406 | |
| 9 23.0 | 2.5615234375 | 0.952306302 | 2.338855543 | 1.670369536 | . 109.4238281 | . 6.977309716 | 7.446338404 | 1.359582102. | 3.364743169 | . 5.808909595 | . 602341.3583 | . 0.209152158 | 0.202672397 | . 0.013128103 | |
| 10 24.0 | 2.5771484375 | 0.945370687 | . 2.343729598 | 1.672377356 | . 108.6425781 | . 6.985164062 | 7.455033449 | 1.372278288. | 3.252888412 | 6.170149552 | 710264.7735 | . 0.220661422 | 0.231041205 | . 0.013233908 | |
| 11 25.0 | 2.5927734375 | 0.937813583 | 2.347001390 | 1.674390008 | . 107.8613281 | . 6.993376830 | 7.464086177 | 1.385574477. | 3.136763104 | . 6.397123569 | 825513.3017 | . 0.227732170 | 0.258943966 | . 0.013350103 | |
| 12 26.0 | 2.6083984375 | 0.929741849 | . 2.348868055 | 1.676407511 | . 107.0800781 | . 7.001910637 | 7.473459208 | 1.399420170. | 3.018001865 | 6.495704266 | 946329.6654 | . 0.230618697 | 0.285602469 | . 0.013475791 | |
| 13 27.0 | 2.6240234375 | 0.921262354 | . 2.349540465 | 1.678429881 | . 106.2988281 | . 7.010726200 | 7.483113265 | 1.413761076. | 2.898111250 | . 6.482084906 | . 1071026.796 | . 0.229877784 | 0.310395480 | . 0.013609996 | |
| 14 28.0 | 2.6396484375 | 0.912475149 | . 2.349226888 | 1.680457136 | . 105.5175781 | . 7.019785148 | 7.493009983 | 1.428543321. | 2.778406013 | . 6.378064448 | . 1198092.441 | . 0.226223739 | 0.332878724 | . 0.013751741 | . – |
| 15 29.0 | 2.6552734375 | 0.903469407 | . 2.348121946 | 1.682489295 | . 104.7363281 | . 7.029051885 | 7.503113770 | 1.443716314. | 2.659981734 | 6.206913964 | 1326244.208 | . 0.220404891 | 0.352778536 | 0.013900098 | |
| 16 30.0 | 2.6708984375 | 0.894321700 | . 2.346400452 | 1.684526375 | . 103.9550781 | . 7.038494594 | 7.513392817 | 1.459234371. | 2.543714640 | 5.990467756 | 1454444.783 | .0.213118199 | 0.369969248 | 0.014054224 | |
| 17 31.0 | 2.6865234375 | 0.885095901 | . 2.344214958 | 1.686568393 | . 103.1738281 | . 7.048085604 | 7.523819455 | 1.475057397. | 2.430278464 | . 5.747499840 | 1581890.435 | . 0.204962334 | 0.384443425 | . 0.014213372 | |
| 8 32.0 | 2.7021484375 | 0.875844073 | 2.341695785 | 1.688615368 | . 102.3925781 | 7.057801331 | 7.534370107 | 1.491150931. | 2.320169852 | . 5.493121215 | 1707984.755 | .0.196420810 | 0.396281473 | . 0.014376895 | |
| 9 33.0 | 2.7177734375 | 0.866607833 | 2.338952488 | 1.690667318 | . 101.6113281 | . 7.067621985 | 7.545024987 | 1.507485816. | 2.213736390 | . 5.238844983 | . 1832306.531 | . 0.187864642 | 0.405624364 | . 0.014544239 | |
| 0 34.0 | 2.7333984375 | 0.857419857 | . 2.336075998 | 1.692724261 | . 100.8300781 | . 7.077531166 | 7.555767701 | 1.524037695. | 2.111203635 | 4.993010834 | 1954577.425 | . 0.179565483 | 0.412651096 | . 0.014714935 | |
| 1 35.0 | 2.7490234375 | 0.848305334 | . 2.333140953 | 1.694786215 | . 100.0488281 | . 7.087515437 | 7.566584816 | 1.540786454. | 2.012699368 | 4.761350243 | . 2074632.570 | .0.171712872 | 0.417561166 | . 0.014888594 | |
| 2 36.0 | 2.7646484375 | 0.838388393 | . 2.309641347 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.094234612 | 7.575086754 | 1.553284811. | 1.940993975 | 4.547559953 | 2190286.820 | .0.164431731 | 0.425133352 | . 0.015047685 | |
| 3 37.0 | 2.7802734375 | 0.828689338 | 2.283314453 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.099213432 | 7.580065574 | 1.561291360. | 1.860410639 | . 3.620950771 | 2298336.603 | . 0.134269891 | 0.427584987 | . 0.015218546 | |
| 4 38.0 | 2.7958984375 | 0.819840135 | . 2.258734961 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.103913883 | 7.584766026 | 1.568866604. | 1.785298865 | . 2.551293334 | . 2391561.738 | . 0.097985628 | 0.426965245 | .0.015381607 | |
| 5 39.0 | 2.8115234375 | 0.811621850 | 2.235822495 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.108341836 | . 7.589193978 | 1.576017156. | 1.715411488 | . 1.821855567 | . 2474012.388 | . 0.072321941 | 0.424394927 | . 0.015536786 | |
| 6 40.0 | 2.8271484375 | 0.803892325 | 2.214203874 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.112561551 | 7.593413693 | 1.582844448. | 1.649606196 | . 1.310273318 | . 2548337.087 | . 0.053687900 | 0.420375264 | . 0.015686102 | |
| 7 41.0 | 2.8427734375 | 0.796554985 | 2.193625439 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.116616683 | 7.597468826 | 1.589417382. | 1.587107847 | 9.457298166 | 2616348.618 | . 0.039958700 | 0.415242742 | . 0.015830924 | |
| 8 42.0 | 2.8583984375 | 0.789541923 | . 2.173908847 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.120537827 | 7.601389970 | 1.595784220. | 1.527372598 | 6.835500376 | . 2679334.600 | . 0.029759090 | 0.409234225 | . 0.015972212 | |
| 9 43.0 | 2.8740234375 | 0.782804581 | . 2.154926770 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.124346641 | 7.605198783 | 1.601979067. | 1.470013074 | 4.939472227 | . 2738228.761 | . 0.022145405 | 0.402523208 | . 0.016110639 | |
| 0 44.0 | 2.8896484375 | 0.776307873 | . 2.136587496 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.128058475 | 7.608910617 | 1.608026015. | 1.414750893 | . 3.564528335 | . 2793718.532 | . 0.016449746 | 0.395241579 | . 0.016246677 | |
| 1 45.0 | 2.9052734375 | 0.770026304 | . 2.118824735 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.131684123 | . 7.612536266 | 1.613941901. | 1.361385163 | . 2.566763816 | 2846315.691 | . 0.012188024 | 0.387493195 | . 0.016380647 | |
| 2 46.0 | 2.9208984375 | 0.763941299 | 2.101590578 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.135231045 | 7.616083187 | 1.619738241. | 1.309770747 | . 1.843302068 | . 2896404.532 | . 0.009003151 | 0.379362592 | . 0.016512759 | |
| 3 47.0 | 2.9365234375 | 0.758039313 | . 2.084850502 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.138704239 | . 7.619556381 | 1.625422614. | 1.259802781 | . 1.319738356 | . 2944275.738 | . 0.006628453 | 0.370920676 | . 0.016643140 | |
| 48.0 | 2.9521484375 | 0.752310463 | 2.068579714 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.142106896 | 7.622959038 | 1.630999692. | 1.211405389 | 9.418580909 | . 2990150.804 | . 0.004863181 | 0.362228479 | . 0.016771854 | |
| 5 49.0 | 2.9677734375 | 0.746747504 | . 2.052760439 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.145440888 | . 7.626293030 | 1.636472028. | 1.164523301 | . 6.699967927 | . 3034199.949 | . 0.003555545 | 0.353339654 | .0.016898919 | |
| 36 50.0 | 2.9833984375 | 0.741345079 | . 2.037379889 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.148707143 | 7.629559285 | 1.641840651. | 1.119115587 | 4.750939898 | 3076555.444 | 0.002590593 | 0.344302115 | . 0.017024320 | |
| 7 51.0 | 2.9990234375 | 0.736099141 | . 2.022428718 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.151905934 | . 7.632758076 | 1.647105536. | 1.075150952 | . 3.358716968 | 3117321.569 | .0.001881325 | 0.335159125 | .0.017148018 | |
| 38 52.0 | 3.0146484375 | 0.731004677 | . 2.007899859 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.155037108 | . 7.635889251 | 1.652265962. | 1.032978987 | . 2.368577829 | 3156596.302 | .0.001362474 | 0.326069765 | 0.017269955 | |
| 9 53.0 | 3.0302734375 | 0.726054083 | . 1.993782504 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.158101377 | 7.638953519 | 1.657322652. | 9.931909955 | . 1.667652515 | 3194486.471 | 9.848586042 | 0.317273519 | .0.017390112 | |
| 0 54.0 | 3.0458984375 | 0.721240591 | 1.980057941 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.161101258 | 7.641953401 | 1.662279332. | 9.556259777 | . 1.172243614 | . 3231083.415 | . 7.105503719 | 0.308770724 | .0.017508539 | |
| 1 55.0 | 3.0615234375 | 0.716558154 | . 1.966709166 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.164039015 | 7.644891158 | 1.667139334. | 9.201239192 | 8.226240710 | 3266465.963 | . 5.116492620 | 0.300555346 | .0.017625282 | |
| 2 56.0 | 3.0771484375 | 0.712005037 | . 1.953731293 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.166914325 | 7.647766467 | 1.671901735. | 8.865671191 | 5.692387453 | 3300650.213 | . 3.635139465 | 0.292624795 | 0.017740282 | |
| 3 57.0 | 3.1083984375 | 0.703102776 | . 1.941105220 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.169730080 | . 7.650582222 | 1.676570957. | 8.548097984 | . 0.0 | 3366962.544 | . 0.0 | 0.287811257 | 0.017853615 | |
| 4 58.0 | 3.1396484375 | 0.694665160 | . 1.916394231 | 1.694915254 | . 100.0 | 7.175294303 | 7.656146445 | 1.685813663. | 7.951326593 | . 0.0 | 3429230.691 | . 0.0 | 0.272669331 | 0.018079667 | |
| 45 59.0 | 3.1708984375 | 0.686656443 | 1.892973010 | 1.694915254 | .100.0 | 7.180634736 | 7.661486878 | 1.694704348. | 7.415042561 | .0.0 | 3487806.399 | .0.0 | 0.258622328 | 0.018299268 | |

_ 0 <u>_ ×</u>

RESULTADOS EN VENTANAS EMERGENTES – SILNUC – MATLAB 7

D

Tabla-D.3-Parte 2

📣 Tabla 3

<u>File Edit View Insert Tools Desktop Window H</u>elp

🗅 🚅 🖶 🎒 🔖 🔍 약 🌒 🐙 🔲 📰 💷 🗔

| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
|----------|--------------|-------------|---------------|-------------|--------------|--------------|----------------|----------------|----------------|-----------|--------------|-----------|--------------|---------------|----------|
| 46 60.0 | 3.2021484375 | 0.679046566 | . 1.870742330 | 1.694915254 | 100.0 | 7.185765184 | . 7.666617326 | 1.703263564 | . 6.931492147 | . 0.0 | 3543025.044. | 0.0 | 0.245584502 | 0.018512699 | |
| 47 61.0 | 3.2333984375 | 0.671807651 | . 1.849618754 | 1.694915254 | 100.0 | 7.190696937 | 7.671549079 | 1.711507956. | . 6.494221044 | . 0.0 | 3595166.023. | 0.0 | 0.233478028 | .0.018720165 | 1 - |
| 48 62.0 | 3.2646484375 | 0.664913943 | 1.829524901 | 1.694915254 | 100.0 | 7.195440833 | 7.676292975. | 1.719453660. | . 6.097676910 | . 0.0 | 3644480.591. | 0.0 | 0.222228651 | 0.018921880 | 1 |
| 49 63.0 | 3,2958984375 | 0.658341696 | 1.810389272 | 1.694915254 | 100.0 | 7.200007190. | 7.680859332. | 1.727116168 | 5.737074883 | .0.0 | 3691194.855. | 0.0 | 0.211766612. | 0.019118059 | 1 |
| 50 64.0 | 3.3583984375 | 0.645721326 | 1.792145962. | 1.694915254 | 100.0 | 7.204405779. | 7.685257922. | 1.734510250. | . 5.408282691 | .0.0 | 3780126.458. | 0.0 | 0.204439924 | 0.019308915 | 1 |
| 51 65.0 | 3.4208984375 | 0.634233358 | 1.757114208 | 1.694915254 | 100.0 | 7.212979167. | 7.693831309 | 1.748958980. | 4.816347036 | .0.0 | 3860214.707. | 0.0 | 0.185921336 | 0.019686301 | |
| 52 66.0 | 3 4833984375 | 0.623721306 | 1.725225790 | 1 694915254 | 100.0 | 7.220933216 | 7 701785358 | 1.762407158 | 4.320496262 | 0.0 | 3932751.957 | 0.0 | 0.169914401 | 0.020042882 | 1 |
| 53 67.0 | 3 5458984375 | 0.614080264 | 1 696046325 | 1 694915254 | 100.0 | 7.228341447 | 7 709193590 | 1 774969686 | 3 900716655 | 0.0 | 3998719.561 | 0.0 | 0.155745186 | 0.020380680 | 1 |
| 54 68 0 | 3 6083984375 | 0.605416913 | 1 669284621 | 1 694915254 | 100.0 | 7 235248765 | 7 716100907 | 1 786714909 | 3 542800626 | 0.0 | 4057283.180 | 0.0 | 0 140007871 | 0.020700656 | 1 |
| 55 69.0 | 3 6708984375 | 0.597836737 | 1 645236802 | 1 694915254 | 100.0 | 7 241550742 | 7 722402884 | 1 797457704 | 3 242243238 | 0.0 | 4107391 568 | 0.0 | 0.122181331 | 0.020996876 | 1 |
| 56 70.0 | 3 7333984375 | 0.591009210 | 1.624195671 | 1 694915254 | 100.0 | 7 247140809 | 7 727992951 | 1 807008300 | 2 994912195 | 0.0 | 4152344 224 | 0.0 | 0 110619228 | 0.021263103 | 1 |
| 57 71 0 | 3 7958984375 | 0.585019494 | 1 605243753 | 1 694915254 | 100.0 | 7 252238169 | 7 733090311 | 1 815734547 | 2 784149284 | 0.0 | 4190503 995 | 0.0 | 0.096424740 | 0.021508741 | 1 |
| 58 72.0 | 3 8583984375 | 0.579598410 | 1 588617436 | 1 694915254 | 100.0 | 7 256759833 | 7 737611975 | 1 823489118 | 2 608291029 | 0.0 | 4224873 710 | 0.0 | 0.087229153 | 0.021728958 | 1 |
| 59 73.0 | 3 9833984375 | 0.569754164 | 1 573569534 | 1 694915254 | 100.0 | 7 260893219 | 7 741745361 | 1 830589166 | 2 456179158 | 0.0 | 4286342 413 | 0.0 | 0.079548419 | 0.021932193 | 1 |
| 60 74 0 | 4 1083984375 | 0.561406845 | 1 546243775 | 1 694915254 | 100.0 | 7 268501193 | 7 749353336 | 1.843685880 | 2 196437795 | 0.0 | 4338066 286 | 0.0 | 0.068118344 | 0.022311139 | 1 1 |
| 61 75.0 | 4 2333984375 | 0.554673171 | 1 523073200 | 1 694915254 | 100.0 | 7 275058381 | 7 755910523 | 1.855002965 | 1 992135808 | 0.0 | 4377524 113 | 0.0 | 0.054313993 | 0.022642873 | 1 |
| 62 76 0 | 4 3583984375 | 0.548919324 | 1 504381800 | 1 694915254 | 100.0 | 7 280421087 | 7 761273229 | 1.864278510 | 1 837499796 | 0.0 | 4411081 020 | 0.0 | 0.004010000. | 0.022917755 | |
| 63 77 0 | 4 4833984375 | 0.544027537 | 1 488410210 | 1 694915254 | 100.0 | 7 285056517 | 7 765908659 | 1 872310585 | 1 712279369 | 0.0 | 4438998 893 | 0.0 | 0.039402522 | 0.023157983 | 1 |
| 64 78.0 | 4 7333984375 | 0.535724466 | 1 474831537 | 1 694915254 | 100.0 | 7 289036742 | 7 769888884 | 1 879218004 | 1 610663931 | 0.0 | 4485156 505 | 0.0 | 0.033618783 | 0.023366215 | - |
| 65 79.0 | 4 9833984375 | 0.530080908 | 1 451783788 | 1 694915254 | 100.0 | 7 295877215 | 7 776729357 | 1 891112104 | 1 448002516 | 0.0 | 4514765 715 | 0.0 | 0.022830638 | 0.023728362 | - |
| 66 80.0 | 5 2333984375 | 0.535688182 | 1 436118342 | 1 694915254 | 100.0 | 7 300588928 | 7 781441071 | 1 800321520 | 1 344231386 | 0.0 | 4536741 875 | 0.0 | 0.017753863 | 0.023020302 | - |
| 67 81 0 | 5 7333084375 | 0.517361856 | 1 423924966 | 1 694915254 | 100.0 | 7 304292053 | 7 7851441011. | 1 905783211 | 1 267122366 | 0.0 | 4577462 518 | 0.0 | 0.016968673 | 0.024181377 | - |
| 68 82.0 | 6 2333984375 | 0.517818252 | 1 400812666 | 1 694915254 | 100.0 | 7 311 30007 | 7 792251240 | 1 918207976 | 1 1 20/ 122300 | 0.0 | 4596279.092 | 0.0 | 0.010300013. | 0.024570548 | 1 |
| 60 92.0 | 6 7222094275 | 0.512010232 | 4 299200492 | 1 604015254 | 100.0 | 7 315336066 | 7 7061 70109 | 4 025099004 | 4 059903434 | 0.0 | 4610499.106 | 0.0 | 0.009465670 | 0.024310340 | - |
| 70 94 0 | 7 000004010 | 0.505091510 | 4 376655046 | 1 604015254 | 100.0 | 7 319054036 | 7 700906160 | 1 021440451 | 0.069200991 | 0.0 | 4620290.979 | 0.0 | 0.005455420 | 0.024000029 | |
| 70 04.0 | 7 7222094275 | 0.503301310 | 4 260222092 | 1 604015054 | 100.0 | 7.310334020 | 7 900157110 | 1 025577004 | 0 590792404 | 0.0 | 4626360.070. | 0.0 | 0.005455425 | 0.024330330 | 4 |
| 72 96 0 | 9 000004075 | 0.503403075 | 4 3632000033 | 1 604015054 | 100.0 | 7.321304377 | 7 904264724 | 1.030450644 | 0 000050400 | 0.0 | 4020300.077. | 0.0 | 0.003000000 | 0.025125179 | - |
| 72 97 0 | 9.7333094375 | 0.301134410 | 4 2550220023 | 1 604015054 | 100.0 | 7.323303301 | 7 90640901724. | 4 042092029 | 9.012179019 | 0.0 | 4636534,353 | 0.0 | 0.004744102 | 0.025265164 | 4 |
| 73 07.0 | 0.7333904375 | 0.490901172 | 4 240704270 | 4 604045054 | 100.0 | 7.323373070 | 7.000420019 | 1.943003920. | 0.913170910 | 0.0 | 4030324.232. | 0.0 | 0.004420170 | 0.025305104 | 4 |
| 74 00.0 | 9.2333904375 | 0.490952040 | 4 244464420 | 4 604045054 | 100.0 | 7.327312303 | 7.000304032 | 4 040697750 | 0.022232423. | 0.0 | 4033030.337. | 0.0 | 0.004131396 | 0.025475639 | 4 |
| 75 09.0 | 40.0000040 | 0.495050021 | 4 339003660 | 4 604045054 | 100.0 | 7.323327023 | 7.010179907 | 4 050606047 | 0.330402341 | 0.0 | 4041703.412. | 0.0 | 0.003030430 | 0.025579610 | 4 |
| 70 90.0 | 10.23339043 | 0.493701309 | 4 005050064 | 4 604045054 | 100.0 | 7.331023020 | 7.011001900 | 4 054745044 | 7 054032403 | 0.0 | 4040371.171. | 0.0 | 0.002011100 | 0.025077402 | 4 |
| 72 02 0 | 10.73339043 | 0.492570550 | 4 334 000000 | 4 604045054 | 100.0 | 7.332101300 | 7.013033302 | 4.056646400 | 7.951923492 | 0.0 | 4030730.703. | 0.0 | 0.002476106 | 0.025743902 | 4 |
| 70 92.0 | 44 7000040 | 0.491421704 | 4 220007044 | 4 004045054 | 100.0 | 7.333276019 | . 7.014120101 | 4.05040122 | | .0.0 | 4030349.010. | 0.0 | 0.002349717 | 0.02007195 | 4 |
| 79 93.0 | 11.73339043 | 0.490331251 | 4.0007944 | 4 004045254 | 100.0 | 7.334316942 | . 7.010109004 | 4.00000000 | 7.009401001 | .0.0 | 4633390,939. | 0.0 | 0.002231595 | 0.025067523 | 4 |
| 00 94.0 | 12.23339043 | 0.409295114 | 4.050500450 | 4 004045054 | 100.0 | 7.335307422. | . 7.010109004 | 1.960229935. | | .0.0 | 4629096.075. | | 0.002121265. | 0.025925054 | 4 |
| 01 90.0 | 13.23339043 | 0.400425606 | 1.359569452 | 1.094915254 | 97.50300701 | 7.352407679 | . 7.034333472. | . 1.991676670. | | . 0.0 | 4627199.572. | 0.0 | 0.005111249 | .0.026032377 | 4 |
| 02 97.0 | 13.73339843 | 0.483363171 | 1.396574623 | 4 004015254 | 95.08300781 | 7.370545999 | . 7.853402130 | 2.024892722 | 0.180296865 | .0.0 | 4034025.926. | | 0.008652647 | 0.026133213 | - |
| 03 98.0 | 14.23339843 | 0.477928205 | 4.400500000 | 4 004015254 | 92.58300781 | 7.390184134 | . 7.674033253 | 2.061129346. | 0.327098913 | .0.0 | 4050180.254. | | 0.013854352 | 0.026298785 | 4 |
| 84 99.0 | 14.73339843 | 0.470243328 | 1.460593389 | 1.694915254 | 90.08300781 | 7.412547422 | . 7.897372541 | . 2.102511013 | 8.154487470 | .0.0 | 4691162.656. | | 0.018347190 | 0.026597853 | 4 |
| 85 100.0 | 15.23339843 | 0.461585476 | 1.483346150 | 1.694915254 | 87.58300781 | 7.437609157 | . 7.923393629 | 2.149088813 | 7.704682887 | .0.0 | 4731604.042. | 0.0 | 0.021617203 | 0.027032524 | 4 |
| 86 101.0 | 15.73339843 | 0.451883520 | 1.503444698 | 1.694915254 | 85.08300781 | 7.464254483 | . 7.950981978 | 2.198918124. | 7.156288701 | .0.0 | 4782205.369. | 0.0 | 0.022211894 | .0.027539567 | - |
| 87 102.0 | 15.98339843 | U.447354108 | . 1.495350095 | 1.694915254 | 83.83300781 | 7.483117679 | . 7.970310653 | . 2.234213380 | 6.356207101 | .0.0 | 4803848.821. | U.O | 0.019841860 | . 0.028130843 | 4 |
| 88 103.0 | 16.23339843 | 0.442702906 | . 1.504651515 | 1.694915254 | 82.58300781 | 7.497128479 | . 7.984782959 | . 2.260679011 | 6.093757878 | . 0.0 | 4828165.159. | | 0.019237354 | . U.U28415664 | 4 |
| 89 104.0 | 16.48339843 | 0.438102616 | . 1.513594560 | 1.694915254 | 81.33300781. | 7.511446168 | . 7.999558216 | . 2.287817518. | . 5.826589189 | . 0.0 | 4851078.481. | 0.0 | 0.019785137 | . 0.028714210 | 1 |
| 90 105.0 | 16.73339843 | 0.433423726 | . 1.522774645 | 1.694915254 | 80.08300781. | | . 8.014466910 | . 2.315316869 | 5.570884895 | . [0.0] | 4875863.709. | | 0.020163182 | .0.029015723 | <u> </u> |

_ 0 ×

RESULTADOS EN VENTANAS EMERGENTES – SILNUC – MATLAB 7

D

Tabla-D.3-Parte 3

📣 Tabla 3

<u>File Edit View Insert Tools Desktop Window H</u>elp

🗅 🚅 🖶 🎒 🔖 🔍 약 🌒 🐙 🔲 📰 💷 🗔

| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
|-----------|-------------|---------------|-------------|-------------|----------------|--------------|----------------|----------------|---------------|-----------|-------------|-----------|--------------|-------------|----------|
| 91 106.0 | 16.98339843 | .0.428664416 | 1.531727902 | 1.694915254 | . 78.83300781 | 7.540628505. | 8.029643996. | . 2.343432080 | 5.315485740 | .0.0 | 4901140.326 | 0.0 | 0.020352432. | 0.029328953 | |
| 92 107.0 | 17.23339843 | .0.424073214 | 1.540431241 | 1.694915254 | . 77.58300781 | 7.555635724. | 8.045097153. | . 2.372181952. | . 5.061074286 | . 0.0 | 4925364.542 | 0.0 | 0.019529887. | 0.029654582 | |
| 93 108.0 | 17.48339843 | .0.419464144 | 1.549803421 | 1.694915254 | . 76.33300781 | 7.570666483. | 8.060570034. | . 2.401085267 | 4.827320535 | . 0.0 | 4950299.536 | 0.0 | 0.019551823. | 0.029975636 | |
| 94 109.0 | 17.73339843 | 0.414882462 | 1.559162031 | 1.694915254 | 75.08300781 | 7.585916638. | .8.076258523. | . 2.430513071. | 4.599077938 | . 0.0 | 4975429.625 | 0.0 | 0.018764082. | 0.030305008 | |
| 95 110.0 | 17.98339843 | .0.410484570 | 1.555954886 | 1.694915254 | 74.41650390 | 7.596419008. | 8.086993075. | . 2.450767573. | 4.330583313 | . 0.0 | 4999117.638 | 0.0 | 0.017771033. | 0.030639676 | |
| 96 111.0 | 18.23339843 | . 0.406314151 | 1.552424461 | 1.694915254 | 73.79150390 | 7.606467990. | .8.097258813. | . 2.470190811 | 4.083183768 | . 0.0 | 5021727.351 | 0.0 | 0.016847374. | 0.030967946 | |
| 97 112.0 | 18.48339843 | . 0.402349389 | 1.549657062 | 1.694915254 | . 73.16650390 | 7.616356633. | .8.107363278. | . 2.489353250. | 3.861278597 | . 0.0 | 5043170.611 | 0.0 | 0.016014822. | 0.031285802 | |
| 98 113.0 | 18.98339843 | .0.394676061 | 1.561295337 | 1.694915254 | . 71.91650390 | 7.631490028. | .8.122925528. | . 2.518876764 | . 3.707010699 | . 0.0 | 5084305.141 | 0.0 | 0.016081646. | 0.031594093 | |
| 99 114.0 | 19.48339843 | .0.387695801 | 1.557933241 | 1.694915254 | . 70.66650390 | 7.651018600. | 8.142879258. | . 2.556985675 | . 3.341459793 | . 0.0 | 5121908.506 | 0.0 | 0.014624044. | 0.032208349 | |
| 100 115.0 | 19.98339843 | . 0.381142521 | 1.557029921 | 1.694915254 | . 69.41650390 | 7.670075280. | .8.162357421. | . 2.594344044. | . 3.040464739 | . 0.0 | 5157971.296 | 0.0 | 0.013420664. | 0.032788243 | |
| 101 116.0 | 20.48339843 | . 0.375068283 | 1.557596585 | 1.694915254 | . 68.16650390 | 7.688937518. | .8.181637491. | . 2.631476177. | 2.781429347 | . 0.0 | 5190549.595 | 0.0 | 0.012737027. | 0.033351997 | |
| 102 117.0 | 20.98339843 | .0.369401116 | 1.559938829 | 1.694915254 | . 66.91650390 | 7.707523792. | .8.200637966. | . 2.668213693 | . 2.561330922 | . 0.0 | 5220930.670 | 0.0 | 0.011811729. | 0.033892133 | |
| 103 118.0 | 21.48339843 | .0.363988678 | 1.563839229 | 1.694915254 | . 65.66650390 | 7.725899911. | .8.219424675. | . 2.704675164 | . 2.372018926 | . 0.0 | 5250651.494 | 0.0 | 0.011295142. | 0.034412089 | |
| 104 119.0 | 21.98339843 | .0.358796472 | 1.568703152 | 1.694915254 | . 64.41650390 | 7.744236998. | . 8.238168763. | . 2.741188766. | . 2.203573902 | . 0.0 | 5279214.727 | 0.0 | 0.010799880. | 0.034923790 | |
| 105 120.0 | 22.48339843 | . 0.353929931 | 1.574425661 | 1.694915254 | 63.16650390 | 7.762569859. | . 8.256905053. | . 2.777818107. | . 2.052478115 | . 0.0 | 5305922.936 | 0.0 | 0.010117298. | 0.035429178 | |
| 106 121.0 | 22.98339843 | . 0.349244838 | 1.581541297 | 1.694915254 | . 61.91650390 | 7.780757728. | .8.275492797. | . 2.814279498. | . 1.920801102 | . 0.0 | 5331869.677 | 0.0 | 0.009710285. | 0.035916330 | |
| 107 122.0 | 23.48339843 | . 0.344728030 | 1.589445030 | 1.694915254 | . 60.66650390 | 7.798974593. | .8.294106000. | . 2.850911704. | . 1.801464126 | . 0.0 | 5357038.636 | 0.0 | 0.009435961. | 0.036398145 | |
| 108 123.0 | 23.98339843 | . 0.340365554 | 1.598114529 | 1.694915254 | . 59.41650390 | 7.817233346. | 8.312757570. | . 2.887736359 | . 1.692909838 | . 0.0 | 5381867.979 | . 0.0 | 0.008968498. | 0.036875053 | |
| 109 124.0 | 24.48339843 | . 0.336187433 | 1.607520877 | 1.694915254 | . 58.16650390 | 7.835548878. | . 8.331462415. | . 2.924779224. | . 1.593751910 | . 0.0 | 5405500.545 | 0.0 | 0.008590734. | 0.037347681 | |
| 110 125.0 | 24.98339843 | . 0.332179621 | 1.617851832 | 1.694915254 | . 56.91650390 | 7.853878049. | .8.350177407. | . 2.961949757 | . 1.504070575 | . 0.0 | 5428422.557 | 0.0 | 0.008157737. | 0.037811836 | |
| 111 126.0 | 25.48339843 | . 0.328358697 | 1.629084162 | 1.694915254 | . 55.66650390 | 7.872235648. | . 8.368917351. | . 2.999272835 | . 1.422619580 | . 0.0 | 5450167.405 | 0.0 | 0.007753514. | 0.038268044 | |
| 112 127.0 | 25.98339843 | . 0.324717537 | 1.641350795 | 1.694915254 | . 54.41650390 | 7.890595378. | . 8.387655962. | 3.036690612 | . 1.349130090 | . 0.0 | 5470915.246 | 0.0 | 0.007380976. | 0.038713347 | |
| 113 128.0 | 26.48339843 | . 0.321241540 | 1.654668285 | 1.694915254 | . 53.16650390 | 7.908962991. | . 8.406399006. | . 3.074209362 | 1.282718974 | . 0.0 | 5490689.906 | 0.0 | 0.007043012. | 0.039147452 | |
| 114 129.0 | 26.98339843 | . 0.317916361 | 1.669012616 | 1.694915254 | . 51.91650390 | 7.927355400. | .8.425163407. | . 3.111857938 | . 1.222421945 | . 0.0 | 5509578.881 | . 0.0 | 0.006735030. | 0.039571047 | |
| 115 130.0 | 27.48339843 | 0.314729287 | 1.684357725 | 1.694915254 | . 50.66650390 | 7.945790255. | . 8.443966825. | . 3.149666832 | . 1.167399320 | . 0.0 | 5527655.157 | 0.0 | 0.006452980. | 0.039984933 | |
| 116 131.0 | 27.98339843 | . 0.311673415 | 1.687272258 | 1.694915254 | 49.906640625 | 7.958795181. | . 8.457194125. | . 3.176340003 | .1.107994901 | . 0.0 | 5544984.961 | 0.0 | 0.006143815. | 0.040389836 | |
| 117 132.0 | 28.48339843 | . 0.308779987 | 1.675599486 | 1.694915254 | 49.706640625 | 7.965447630. | . 8.463904896. | . 3.189933788 | 1.043892248 | . 0.0 | 5561324.257 | 0.0 | 0.005805423. | 0.040785847 | |
| 118 133.0 | 28.98339843 | . 0.306039160 | 1.664753674 | 1.694915254 | 49.506640625 | 7.971912456. | . 8.470427955. | . 3.203154252 | 9.860407323 | . 0.0 | 5576803.948 | . 0.0 | 0.005498955. | 0.041168031 | |
| 119 134.0 | 29.48339843 | . 0.303436825 | 1.654687559 | 1.694915254 | 49.306640625 | 7.978198133. | .8.476771778. | . 3.216017696. | 9.337171247 | . 0.0 | 5591483.004 | 0.0 | 0.005220863. | 0.041536724 | |
| 120 135.0 | 29.98339843 | . 0.300960667 | 1.645329103 | 1.694915254 | 49.106640625 | 7.984320178. | . 8.482951882. | 3.228554875 | . 8.861999921 | . 0.0 | 5605433.722 | 0.0 | 0.004967535. | 0.041892952 | |
| 121 136.0 | 30.48339843 | . 0.298599875 | 1.636615476 | 1.694915254 | 48.906640625 | 7.990292275. | . 8.488981950. | . 3.240792918. | . 8.428854997 | . 0.0 | 5618719.446 | 0.0 | 0.004735937. | 0.042237626 | |
| 122 137.0 | 30.98339843 | . 0.296344916 | 1.628491584 | 1.694915254 | . 48.706640625 | 7.996126548. | .8.494874107. | . 3.252755880 | . 8.032646733 | . 0.0 | 5631395.951 | 0.0 | 0.004523501. | 0.042571566 | |
| 123 138.0 | 31.48339843 | 0.294187341 | 1.620908877 | 1.694915254 | 48.506640625 | 8.001833791. | . 8.500639148. | . 3.264465188. | . 7.669057029 | . 0.0 | 5643512.587 | 0.0 | 0.004328041. | 0.042895503 | |
| 124 139.0 | 31.98339843 | . 0.292119632 | 1.613824376 | 1.694915254 | 48.306640625 | 8.007423654. | . 8.506286721. | . 3.275940002 | . 7.334400352 | . 0.0 | 5655113.197 | . 0.0 | 0.004147686. | 0.043210099 | |
| 125 140.0 | 32.48339843 | . 0.290135073 | 1.607199871 | 1.694915254 | 48.106640625 | 8.012904798. | . 8.511825488. | . 3.287197528. | . 7.025513464 | . 0.0 | 5666236.898 | 0.0 | 0.003980822. | 0.043515953 | |
| 126 141.0 | 32.98339843 | . 0.288227642 | 1.601001257 | 1.694915254 | . 47.906640625 | 8.018285024. | .8.517263251. | . 3.298253270. | . 6.739667251 | . 0.0 | 5676918.718 | 0.0 | 0.003826054. | 0.043813608 | |
| 127 142.0 | 33.48339843 | . 0.286391919 | 1.595197983 | 1.694915254 | 47.706640625 | 8.023571386. | .8.522607062. | . 3.309121247 | . 6.474495691 | . 0.0 | 5687190.134 | 0.0 | 0.003682168. | 0.044103557 | |
| 128 143.0 | 33.98339843 | . 0.284623012 | 1.589762586 | 1.694915254 | . 47.506640625 | 8.028770277. | . 8.527863316. | 3.319814173 | . 6.227938208 | . 0.0 | 5697079.526 | . 0.0 | 0.003548105. | 0.044386253 | |
| 129 144.0 | 34.48339843 | . 0.282916492 | 1.584670296 | 1.694915254 | 47.306640625 | 8.033887515. | . 8.533037829. | 3.330343617 | . 5.998192587 | . 0.0 | 5706612.560 | .0.0 | 0.003422936. | 0.044662110 | |
| 130 145.0 | 34.98339843 | . 0.281268336 | 1.579898710 | 1.694915254 | 47.106640625 | 8.038928403. | . 8.538135906. | 3.340720131 | . 5.783676255 | . 0.0 | 5715812.516 | . 0.0 | 0.003305840. | 0.044931507 | |
| 131 146.0 | 35.48339843 | 0.279674884 | 1.575427505 | 1.694915254 | . 46.906640625 | 8.043897793. | .8.543162398. | 3.350953367 | . 5.582994273 | .0.0 | 5724700.570 | .0.0 | 0.003196097. | 0.045194793 | |
| 132 147.0 | 35.98339843 | . 0.278132790 | 1.571238193 | 1.694915254 | . 46.706640625 | 8.048800133. | . 8.548121753. | 3.361052176 | . 5.394912711 | . 0.0 | 5733296.029 | . 0.0 | 0.003093063. | 0.045452291 | 4 |
| 133 148.0 | 36.48339843 | 0.276638998 | 1.567313919 | 1.694915254 | . 46.506640625 | 8.053639510. | . 8.553018059. | 3.371024690 | . 5.218336399 | . 0.0 | 5741616.544 | .0.0 | 0.002996168. | 0.045704299 | |
| 134 149.0 | 36.98339843 | . 0.275190700 | 1.563639273 | 1.694915254 | . 46.306640625 | 8.058419688. | . 8.557855078. | 3.380878402 | . 5.052290228 | . 0.0 | 5749678.286 | . 0.0 | 0.002904904. | 0.045951093 | |
| 135 150.0 | 37.48339843 | 0.273785318 | 1.560200140 | 1.694915254 | 46.106640625 | 8.063144142. | . 8.562636287. | 3.390620225 | . 4.895903373 | . 0.0 | 5757496.105 | 0.0 | 0.002818814. | 0.046192928 | • |

RESULTADOS EN VENTANAS EMERGENTES — SILNUC — MATLAB 7

D

Tabla-D.3-Parte 4

📣 Tabla 3

<u>File Edit View Insert Tools Desktop Window H</u>elp

🗅 🚅 🖶 🎒 🔖 🔍 약 🌒 🐙 🔲 📰 💷 🗔

| KSTEP | TIME | CSIL | SRR | FLC | TEMP | PH | PHN | FPH | RDEPF | NUC. RATE | CAREA | NUC. FLUX | DEP. RATE | ALPSIL | |
|---------|-------------|-------------|-------------|--------------|---------------|---------------|---------------|---------------|--------------|-----------|--------------|-----------|--------------|--------------|-----|
| 9 124.0 | 24.48339843 | 0.336187433 | 1.607520877 | 1.694915254 | . 58.16650390 | 7.835548878 | 8.331462415 | . 2.924779224 | 1.593751910 | .0.0 | 5405500.545. | 0.0 | 0.008590734 | .0.037347681 | 1 3 |
| 0 125.0 | 24.98339843 | 0.332179621 | 1.617851832 | 1.694915254 | . 56.91650390 | . 7.853878049 | . 8.350177407 | . 2.961949757 | .1.504070575 | . 0.0 | 5428422.557. | 0.0 | 0.008157737 | .0.037811836 | |
| 1 126.0 | 25.48339843 | 0.328358697 | 1.629084162 | 1.694915254 | . 55.66650390 | 7.872235648 | 8.368917351 | . 2.999272835 | 1.422619580 | . 0.0 | 5450167.405. | 0.0 | 0.007753514 | .0.038268044 | |
| 2 127.0 | 25.98339843 | 0.324717537 | 1.641350795 | 1.694915254 | . 54.41650390 | 7.890595378 | 8.387655962 | .3.036690612 | 1.349130090 | .0.0 | 5470915.246. | 0.0 | 0.007380976 | .0.038713347 | |
| 3 128.0 | 26.48339843 | 0.321241540 | 1.654668285 | 1.694915254 | . 53.16650390 | 7.908962991 | 8.406399006 | . 3.074209362 | 1.282718974 | .0.0 | 5490689.906. | 0.0 | 0.007043012 | 0.039147452 | |
| 4 129.0 | 26.98339843 | 0.317916361 | 1.669012616 | 1.694915254 | . 51.91650390 | 7.927355400 | 8.425163407 | . 3.111857938 | 1.222421945 | . 0.0 | 5509578.881. | 0.0 | 0.006735030 | 0.039571047 | |
| 5 130.0 | 27.48339843 | 0.314729287 | 1.684357725 | 1.694915254 | . 50.66650390 | 7.945790255 | 8.443966825 | .3.149666832 | 1.167399320 | . 0.0 | 5527655.157. | 0.0 | 0.006452980 | 0.039984933 | |
| 3 131.0 | 27.98339843 | 0.311673415 | 1.687272258 | 1.694915254 | 49.906640625 | 7.958795181 | 8.457194125 | .3.176340003 | 1.107994901 | .0.0 | 5544984.961. | 0.0 | 0.006143815 | 0.040389836 | |
| 7 132.0 | 28.48339843 | 0.308779987 | 1.675599486 | 1.694915254 | 49.706640625 | 7.965447630 | 8.463904896 | . 3.189933788 | 1.043892248 | .0.0 | 5561324.257. | 0.0 | 0.005805423 | | |
| 3 133.0 | 28.98339843 | 0.306039160 | 1.664753674 | 1.694915254 | 49.506640625 | 7.971912456 | 8.470427955 | . 3.203154252 | 9.860407323 | . 0.0 | 5576803.948. | 0.0 | 0.005498955 | .0.041168031 | |
| 9 134.0 | 29.48339843 | 0.303436825 | 1.654687559 | 1.694915254 | 49.306640625 | 7.978198133 | 8.476771778 | . 3.216017696 | 9.337171247 | . 0.0 | 5591483.004. | 0.0 | 0.005220863 | 0.041536724 | |
| 135.0 | 29.98339843 | 0.300960667 | 1.645329103 | 1.694915254. | 49.106640625 | 7.984320178. | 8.482951882. | 3.228554875 | 8.861999921 | .0.0 | 5605433.722. | 0.0 | 0.004967535. | 0.041892952 | |
| 1 136.0 | 30,48339843 | 0.298599875 | 1.636615476 | 1.694915254 | 48,906640625 | 7.990292275 | 8.488981950. | 3.240792918 | 8.428854997 | .0.0 | 5618719.446. | 0.0 | 0.004735937 | 0.042237626 | |
| 137.0 | 30,98339843 | 0.296344916 | 1.628491584 | 1.694915254 | 48,706640625 | 7.996126548 | 8.494874107. | 3.252755880 | 8.032646733. | .0.0 | 5631395.951. | 0.0 | 0.004523501 | 0.042571566 | |
| 3 138.0 | 31.48339843 | 0.294187341 | 1.620908877 | 1.694915254 | 48.506640625 | 8.001833791 | 8.500639148 | 3.264465188 | 7.669057029. | | 5643512.587 | 0.0 | 0.004328041 | 0.042895503 | 1 |
| 139.0 | 31.98339843 | 0.292119632 | 1.613824376 | 1.694915254 | 48.306640625 | 8.007423654 | 8.506286721 | .3.275940002 | 7.334400352 | . 0.0 | 5655113.197. | 0.0 | 0.004147686. | 0.043210099 | |
| 140.0 | 32.48339843 | 0.290135073 | 1.607199871 | 1.694915254 | 48.106640625 | 8.012904798 | 8.511825488 | . 3.287197528 | 7.025513464 | .0.0 | 5666236.898. | 0.0 | 0.003980822 | | |
| 141.0 | 32,98339843 | 0.288227642 | 1.601001257 | 1.694915254. | 47.906640625 | 8.018285024 | 8.517263251. | 3.298253270 | 6.739667251 | .0.0 | 5676918.718. | 0.0 | 0.003826054. | 0.043813608 | |
| 142.0 | 33,48339843 | 0.286391919 | 1.595197983 | 1.694915254 | 47.706640625 | 8.023571386. | 8.522607062 | 3.309121247 | 6.474495691 | | 5687190.134. | 0.0 | 0.003682168 | 0.044103557 | 1 |
| 143.0 | 33,98339843 | 0.284623012 | 1.589762586 | 1.694915254 | 47.506640625 | 8.028770277. | 8.527863316. | 3.319814173. | 6.227938208. | .0.0 | 5697079.526. | 0.0 | 0.003548105 | 0.044386253 | |
| 144.0 | 34,48339843 | 0.282916492 | 1.584670296 | 1.694915254 | 47.306640625 | 8.033887515. | 8.533037829. | 3.330343617 | 5.998192587. | .0.0 | 5706612.560. | 0.0 | 0.003422936 | 0.044662110 | |
| 145.0 | 34,98339843 | 0.281268336 | 1.579898710 | 1.694915254 | 47.106640625 | 8.038928403 | 8.538135906 | 3.340720131. | 5.783676255. | .0.0 | 5715812.516. | 0.0 | 0.003305840 | 0.044931507 | |
| 146.0 | 35,48339843 | 0.279674884 | 1.575427505 | 1.694915254 | 46,906640625 | 8.043897793 | 8.543162398 | 3.350953367 | 5.582994273. | | 5724700.570. | 0.0 | 0.003196097 | 0.045194793 | 1 |
| 147.0 | 35,98339843 | 0.278132790 | 1.571238193 | 1.694915254 | 46,706640625 | 8.048800133. | 8.548121753. | 3.361052176. | 5.394912711. | .0.0 | 5733296.029. | 0.0 | 0.003093063. | 0.045452291 | |
| 148.0 | 36,48339843 | 0.276638998 | 1.567313919 | 1.694915254. | 46.506640625 | 8.053639510. | 8.553018059. | 3.371024690. | 5.218336399 | .0.0 | 5741616.544. | 0.0 | 0.002996168. | 0.045704299 | |
| 149.0 | 36,98339843 | 0.275190700 | 1.563639273 | 1.694915254 | 46.306640625 | 8.058419688. | 8.557855078 | 3.380878402 | 5.052290228. | .0.0 | 5749678.286. | 0.0 | 0.002904904 | 0.045951093 | |
| 150.0 | 37.48339843 | 0.273785318 | 1.560200140 | 1.694915254 | 46.106640625 | 8.063144142. | 8.562636287. | 3.390620225 | 4.895903373 | 0.0 | 5757496.105. | 0.0 | 0.002818814 | 0.046192928 | |
| 151.0 | 37.98339843 | 0.272420478 | 1.556983559 | 1.694915254 | 45,906640625 | 8.067816085. | 8.567364898. | 3.400256555. | 4.748395919 | .0.0 | 5765083.667. | 0.0 | 0.002737489. | 0.046430044 | |
| 152.0 | 38,48339843 | 0.271093988 | 1.553977608 | 1.694915254. | 45,706640625 | 8.072438494. | 8.572043889. | 3.409793317. | 4.609067473 | .0.0 | 5772453.570. | 0.0 | 0.002660562 | 0.046662660 | |
| 153.0 | 38,98339843 | 0.269803822 | 1.551171298 | 1.694915254 | 45.506640625 | 8.077014134. | 8.576676024. | 3.419236009. | 4.477287426 | .0.0 | 5779617.454. | 0.0 | 0.002587700. | 0.046890985 | |
| 154.0 | 39,48339843 | 0.268548102 | 1.548554481 | 1.694915254 | 45.306640625 | 8.081545574 | 8.581263873. | 3.428589746. | 4.352486611 | | 5786586.088. | 0.0 | 0.002518603 | 0.047115212 | |
| 155.0 | 39,98339843 | 0.267325089 | 1.546117769 | 1.694915254 | 45.106640625 | 8.086035210. | 8.585809831 | 3.437859290 | 4.234150103 | .0.0 | 5793369.458. | 0.0 | 0.002452999. | 0.047335521 | |
| 156.0 | 40.48339843 | 0.266133164 | 1.543852464 | 1.694915254. | 44.906640625 | 8.090485273. | 8.590316130. | 3.447049081 | 4.121811009 | .0.0 | 5799976.835. | 0.0 | 0.002390640 | 0.047552081 | |
| 157.0 | 40.98339843 | 0.264970822 | 1.541750495 | 1.694915254 | 44,706640625 | 8.094897852. | 8.594784858 | 3.456163270 | 4.015045083 | .0.0 | 5806416.842. | 0.0 | 0.002331302 | 0.047765051 | |
| 158.0 | 41.48339843 | 0.263836659 | 1.539804358 | 1.694915254 | 44.506640625 | 8.099274899 | 8.599217967 | . 3.465205737 | 3.913466039 | . 0.0 | 5812697.509. | 0.0 | 0.002274779 | 0.047974581 | 1 |
| 159.0 | 41.98339843 | 0.262729365 | 1.538007070 | 1.694915254 | 44.306640625 | 8.103618244 | 8.603617288 | .3.474180117 | .3.816721465 | . 0.0 | 5818826.329. | 0.0 | 0.002220883 | | |
| 160.0 | 42.48339843 | 0.261647716 | 1.536352122 | 1.694915254 | 44.106640625 | 8.107929602 | 8.607984537 | . 3.483089820 | 3.724489249 | . 0.0 | 5824810.299. | 0.0 | 0.002169444 | | |
| 161.0 | 42.98339843 | 0.260590566 | 1.534833438 | 1.694915254 | 43.906640625 | 8.112210589 | 8.612321327 | . 3.491938048 | 3.636474440 | . 0.0 | 5830655.962. | 0.0 | 0.002120303 | .0.048583891 | |
| 162.0 | 43.48339843 | 0.259556841 | 1.533445342 | 1.694915254 | 43.706640625 | 8.116462719 | 8.616629174 | . 3.500727810 | 3.552406497 | . 0.0 | 5836369.449. | 0.0 | 0.002073315 | 0.048780984 | |
| 3 163.0 | 43.98339843 | 0.258545534 | 1.532182521 | 1.694915254. | 43.506640625 | 8.120687423. | 8.620909509. | 3.509461941 | 3.472036848 | . 0.0 | 5841956.506. | 0.0 | 0.002028348. | 0.048975262 | |
| 165.0 | 44.98339843 | 0.256586443 | 1.530013116 | 1.694915254. | 43.106640625 | 8.129059862. | 8.629392952 | 3.526773836 | 3.321495370. | . 0.0 | 5852772.585 | 0.0 | 0.001943995 | 0.049355787 | 1 |
| 167.0 | 45.98339843 | 0.254706377 | 1.528288993 | 1.694915254. | 42.706640625 | 8.137337809. | 8.637781557 | 3.543893338. | 3.183225097. | . 0.0 | 5863143.609 | 0.0 | 0.001866370 | 0.049726243 | |
| 169.0 | 46.98339843 | 0.252899190 | 1.526978166 | 1.694915254. | 42.306640625 | 8.145530122. | 8.646084183. | 3.560837960. | 3.055837977 | | 5873104.533. | 0.0 | 0.001794725 | 0.050087326 | 1 |
| 2 171.0 | 47.98339843 | 0.251159408 | 1.526052284 | 1.694915254 | 41.906640625 | 8.153644754. | 8.654308785 | 3.577623404 | 2.938141832. | . 0.0 | 5882686.488. | 0.0 | 0.001728416 | 0.050439664 | |
| | 40.0000040 | 0.040400400 | 1 505100100 | 1 604015254 | 41 506640625 | 8 161688878 | 8 662462535 | 3 594263795 | 2 829107527 | 0.0 | 5891917 300 | 0.0 | 0.0016668886 | 0.050783827 | 1 |

_ 0 X

ANEXO RESULTADOS EN VENTANAS VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – FORTRAN 77

Е

| 🔤 C:\Users\joack\Desktop\silnucprogram\Debug\nucsil.exe |
|---|
| Enter data file name: card1y2.txt NREF,NCLC,INX = 13 2 1 IPR,IPR2 = 3 3 KDP,NDP = 10 50 ITPM,IMAX = 0 1000 IHCMA,IHCMI,IDH,IMAXM= 0 0 0 0 |
| DTPM = 1.000E+00 DHCMA,DHCMI = 4.000E+00 2.048E+03 DDH,TMAXM = 6.400E+01 6.400E+01 |
| Enter data file name: card3.txt SILIN,SILOUT = 0.5970 0.2500 PHI,SMLI = 0.9200 1.8000E-01 TOTFI = 6.0000E-04 CSII = 0.0075 TCP = 1.0000E+10 CDP = 0.0010 |
| MONOSILICIC ACID BUFFERIN IS ASSUMED. |
| Enter data file name: card4.txt TREF FLASH TEMP PH |
| 0.0000 0.0000 300.0000 0.0000 0.2500 0.0850 275.0000 0.0000 0.5000 0.1510 250.0000 0.0000 1.0000 0.2540 200.0000 0.0000 1.5000 0.2970 175.0000 0.0000 2.2500 0.3370 150.0000 0.0000 2.7500 0.4100 100.0000 0.0000 12.7500 0.4100 100.0000 0.0000 2.7500 0.4100 100.0000 0.0000 2.77500 0.4100 50.0000 0.0000 277.7500 0.4100 50.0000 0.0000 |
| C:\Users\joack\Desktop\silnucprogram\Debug\nucsil.exe |
| 0 K RADIUS MASS NUMBER 1 3.5000E-07 5.0000E-03 1.2603E+16 |
| 2 2.0000E-07 5.0000E-03 1.5754E+15 |
| KNUC = 58 ANNUC,AN = 57.8 77.5 ZLD,RLIM = 2.5324E-02 9.4193E-08 |
| TAUN,TAUD = 1.4976E+00 2.5968E+01 TAU,RTAU = 1.4976E+00 2.0000E+00 |
| HCMA,HCMI = 5.0000E-01 9.7656E-04 DELTH,TCMA = 2.3400E-02 7.7750E+01 DTP,NDP = 1.4976E+00 50 |
| D LOG10 TAU/D GAMMA 3 = 4.58307E-05 RECIPROCAL = 2.18194E+04 GAMMA = 36.29 GAMMA CUBED = 4.77746E+04 |
| NO SALTA A 5 EN MAIN LINEA 115 |

ANEXO RESULTADOS EN VENTANAS VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – FORTRAN 77

E

| 🔤 C:\Users\joack\Desktop\silnucprogram\Debug\nucsil.exe |
|--|
| |
| KSTEP = 0 TSPEC,TEMP,PH = 2.2500E+00 125.00 6.88 FLASH,GLASH = 0.3870 7.5041E-02 CSIL = 0.9739 FLC = 1.6313 |
| SALT MOLALITY,SOL.CORR.FACTOR = 2.9364E-01 1.0098 SOD. ACT. = 1.9541E-01 PHN,FPH,FINT = 7.3327 1.2019 0.0911 |
| GAMZ,GAMMA = 44.17 36.29 DQS = 6.840E+14 AKIN,DKIN = 1.942 1.000 |
| TOTF,ALPF = 9.788E-04 0.9989 RKF1,RKF2 = 2.639E-02 2.110E+00 RATEKF,RATEKT = 2.063E-03 2.117E-08 |
| PKW,PKSIL,PKF = 11.912 8.975 4.085 GSIL,GF,GNA = 0.6326 0.6853 0.6655 EPSD,DENS = 49.26 0.9390 ADH,BDH = 0.6439 0.3480 |
| CSILS,ALPSIL,CSI = 0.4831 0.0126 0.0122 SRA,SRR = 1.9907 2.0102 RATEK,RDEPF = 2.5486E-08 3.9813E-07 FKINL = 5.9629E-08 |
| RNUC,ANNUC = 8.540E-08 5.776E+01 ZLD,CN = 2.532E-02 7.278E+02 QLP,QT = 3.340E+25 5.829E+16 RANUC = 1.074E+18 TAUC = 5.357E-01 |
| NCLC = 3 TOTAL NO.,AREA = 2.3130E+16 4.7474E+04 AVER.RAD.,AREA,MASS = 3.8889E-07 2.0525E-12 7.0529E-19 |
| COLL.MASS,DIS.SIL. = 0.0163 0.9739 SUM = 0.9902 SHOULD BE = 0.9902 PERCENT DIF. = 0.0000 |
| NUMBER OF PARTICLES IN EACH CLASS |
| 2.05598E+16 2.56998E+15 1.00000E+00 |
| PARTICLE RADII |
| 3.50000E-07 7.00000E-07 9.41925E-08 |
| TOTAL MASS IN EACH CLASS |
| 8.15661E-03 8.15661E-03 7.73277E-21 |
| |

ANEXO RESULTADOS EN VENTANAS VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – FORTRAN 77

E

| 👞 C:\Users\joack\Desktop\silnucprogram\Debug\nucsil.exe | | a x |
|---|--------------------|---------------|
| | | - |
| KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL | RDEPF | NUC. |
| 1 2.251E+00 0.9740 2.0114 1.6314 124.95 6.88 7.33 1.2023 3.9 6E+15 4.752E+04 1.127E-05 1.893E-02 1.2563E-02 NEW DELTC = 1.9531E-03 AT STEP = 1 | 983E-07 | 1.95 |
| KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL | RDEPF | NUC. |
| NEW DELTC = 3.9063E-03 AT STEP = 2 | | |
| KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL | RDEPF | NUC. |
| NEW DELTC = 7.8125E-03 AT STEP = 3 | | |
| KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL | RDEPF | NUC. |
| NEW DELTC = 1.5625E-02 AT STEP = 4 | | |
| KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL | RDEPF | NUC. |
| NEW DELTH,TAUCS = 2.3123E-02 5.3568E-01 AT TCV(1),THN = 2.2803 E+00 | E+00 2 | .2733 |
| KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL | RDEPF | NUC. |
| NEW DELTH,TAUCS = 1.9844E-02 5.1881E-01 AT TCV(1),THN = 2.2959 E+00 | 'E+00 2 | .2947 |
| KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL | RDEPF | NUC. |
| NEW DELTH,TAUCS = 1.7313E-02 5.0505E-01 AT TCV(1),THN = 2.3271 E+00 | .E+00 2 | .3133 |
| KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL | RDEPF | NUC. |
| NEW DELTH,TAUCS = 1.5512E-02 4.9442E-01 AT TCV(1),THN = 2.3428 E+00 | E+00 2 | .3297 |
| KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL | RDEPF | NUC. |
| NEW DELTH,TAUCS = 1.4146E-02 4.8603E-01 AT TCV(1),THN = 2.3584 E+00 | E+00 2 | .3446 |
| KSTEP TIME CSIL SRR FLC TEMP PH PHN FPH RATE CAREA NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL | RDEPF | NUC. |
| 11 2.374E+00 0.9800 2.1629 1.6466 118.80 6.91 7.37 1.2515 4.0 1E+18 6.007E+04 1.054E-02 2.442E-02 1.2602E-02 NEW DELTH,TAUCS = 1.3067E-02 4.7918E-01 AT TCV<1>,THN = 2.3740 E+00 |)65E-07)E+00 2 | 2.22 .3582 |

ANEXO

RESULTADOS EN VENTANAS VENTANA DE COMANDOS - SILNUC - FORTRAN 77

Е

| KSTI Rate | EP TIME CAREA | CSIL SRR NUC.FLUX DEP | FLC .RATE | TEMP I ALPSI | PH PHN I L | FPH | RDEPF | NUC. |
|----------------------------|---|--|------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|-----------------------|--------------------|---------------|
| NEW E+00 | DELTH, TAUCS | = 1.1425E-02 | 4.68641 | E -01 AT | TCV(1),THN | = 2.3896 | 5E+00 2 | .3835 |
| KSTI RATE | EP TIME CAREA | CSIL SRR NUC.FLUX DEP | FLC .RATE | TEMP I ALPSI | PH PHN I L | FPH | RDEPF | NUC. |
| NEW E+00 | DELTH, TAUCS | = 1.0820E-02 | 4.6508) | E -01 AT | TCV(1),THN | = 2.4053 | 3E+00 2 | .3946 |
| KSTI Rate | EP TIME CAREA | CSIL SRR NUC.FLUX DEP | FLC .RATE | TEMP I ALPSI | PH PHN I L | FPH | RDEPF | NUC. |
| NEW E+00 | DELTH, TAUCS | = 1.0326E-02 | 4.6208) | E- 01 AT | TCV(1),THN | = 2.4209 | 7E+00 2 | .4052 |
| KSTI Rate | EP TIME CAREA | CSIL SRR NUC.FLUX DEP | FLC .RATE | TEMP I ALPSI | PH PHN I L | FPH | RDEPF | NUC. |
| NEW E+00 | DELTH, TAUCS | = 9.4856E-03 | 4.5737] | E- 01 AT | TCV(1),THN | = 2.4365 | 5E+00 2 | .4254 |
| KSTI Rate | EP TIME CAREA | CSIL SRR NUC.FLUX DEP | FLC .RATE | TEMP I ALPSI | PH PHN I L | FPH | RDEPF | NUC. |
| 16 5E+19 | 5 2.452E+00 7 1.418E+05 | 0.9787 2.2554 1 7.116E-02 5.5 | .6564 ± 61E-02 | 1.2693E | .93 7.40 1. -02 | .2886 3.9 | 922E-07 | 1.76 |
| NEW E+00 | DELTH, TAUCS | = 8.8963E-03 | 4.56061 | E -01 AT | TCU(1),THN | = 2.4521 | LE+00 2 | .4441 |
| KSTI RATE | EP TIME CAREA | CSIL SRR NUC.FLUX DEP | FLC .RATE | TEMP I ALPSI | PH PHN I L | FPH | RDEPF | NUC. |
| NEW E+00 | DELTH, TAUCS | = 8.7153E-03 | 4.5681] | E -01 AT | TCV(1),THN | = 2.4678 | 3E+00 2 | .4529 |
| KSTI Rate | EP TIME CAREA | CSIL SRR NUC.FLUX DEP | FLC .RATE | TEMP I ALPSI | PH PHN I L | FPH | RDEPF | NUC. |
| 18 2E+19 NEW E+00 | 8 2.483E+00 9 2.105E+05 DELTH,TAUCS | 0.9756 2.2879 1 1.089E-01 8.0 = 8.3135E-03 | .6604 1 27E-02 4.5687] | L13.33 6 1.2764E- E-01 AT | .94 7.41 1. -02 TCU<1>,THN | .3057 3.8 = 2.4834 | 314E-07 4E+00 2 | 2.81 .4701 |
| KSTI RATE | EP TIME CAREA | CSIL SRR NUC.FLUX DEP | FLC .RATE | TEMP I ALPSI | PH PHN I L | FPH | RDEPF | NUC. |
| 19 1E+19 NEW E+00 | 9 2.499E+00 9 2.674E+05 DELTH,TAUCS | 0.9726 2.3008 1 1.329E-01 9.9 = 8.0815E-03 | .6624 1 95E-02 4.6090] | L12.55 6 1.2820E- E-01 AT | .95 7.42 1. -02 TCV<1>,THN | .3155 3.5 = 2.4990 | 737E-07 0E+00 2 | 3.50 .4866 |
| KSTI RATE | EP TIME CAREA | CSIL SRR NUC.FLUX DEP | FLC .RATE | TEMP I ALPSI | PH PHN I L | FPH | RDEPF | NUC. |
| 20 7E+19 NEW E+00 | 0 2.515E+00 9 3.352E+05 DELTH,TAUCS | 0.9687 2.3119 1 1.558E-01 1.2 = 7.9418E-03 | .6644 24E-01 4.6675] | L11.77 6. 1.2886E- E-01 AT | .96 7.42 1. -02 TCU<1>,THN | .3258 3.6 = 2.5146 | 551E-07 5E+00 2 | 4.17 .5027 |
| KSTI Rate | EP TIME CAREA | CSIL SRR NUC.FLUX DEP | FLC .RATE | TEMP I ALPSI | PH PHN I L | FPH | RDEPF | NUC. |
| 21 9E+19 NEW E+00 | 1 2.530E+00 7 4.136E+05 DELTH,TAUCS | 0.9640 2.3212 1 1.764E-01 1.4 = 7.8871E-03 | .6664 71E-01 4.7472] | L10.99 6, 1.2964E- E-01 AT | .96 7.43 1. -02 TCV<1>,THN | .3369 3.9 = 2.5303 | 556E-07 3E+00 2 | 4.79 .5186 |

RESULTADOS EN VENTANAS VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – FORTRAN 77

E

| ex. C:\Us | ers\joack\Deskt | top\silnucprogram\Debug\nucsil.exe | | | |
|---------------|------------------------|--|-------------|-----------|------|
| KSTEP RATE | TIME CAREA | CSIL SRR FLC TEMP PH NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL | PHN FPH | RDEPF | NUG. |
| 22 4E+19 | 2.546E+00 5.022E+05 | 0.9586 2.3287 1.6684 110.21 6.97 1.935E-01 1.734E-01 1.3053E-02 | 7.44 1.3485 | 3.453E-07 | 5.32 |
| 23 1E+19 | 2.562E+00 6.013E+05 | 0.9524 2.3342 1.6704 109.42 6.98 2.096E-01 2.010E-01 1.3154E-02 | 7.45 1.3609 | 3.342E-07 | 5.82 |
| 24 4F+19 | 2.577E+00 7 095F+05 | 0.9455 2.3379 1.6724 108.64 6.99 2 211F-01 2 288F-01 1 3266F-02 | 7.46 1.3739 | 3.225E-07 | 6.18 |
| 25 3F+19 | 2.593E+00 8 251F+05 | 0.9379 2.3400 1.6744 107.86 6.99 2 282F-01 2 562F-01 1 3390F-02 | 7.47 1.3875 | 3.105E-07 | 6.41 |
| 26 3F+19 | 2.608E+00 9 462E+05 | 0.9298 2.3407 1.6764 107.08 7.00 2 312F-01 2 822F-01 1 3522F-02 | 7.47 1.4018 | 2.982E-07 | 6.51 |
| 27 1 E+19 | 2.624E+00 | 0.9213 2.3403 1.6784 106.30 7.01 2 305E-01 3 063E-01 1 365E-02 | 7.48 1.4164 | 2.859E-07 | 6.50 |
| 28 | 2.640E+00 | 0.9126 2.3390 1.6805 105.52 7.02 2.257E-01 2.200E-01 1.2011E-02 | 7.49 1.4314 | 2.737E-07 | 6.39 |
| 29 | 2.655E+00 | $0.9036\ 2.3370\ 1.6825\ 104.74\ 7.03$ | 7.51 1.4470 | 2.617E-07 | 6.22 |
| 30 | 2.671E+00 | 0.8944 2.3344 1.6845 103.96 7.04 | 7.52 1.4627 | 2.499E-07 | 6.00 |
| | 2.687E+00 | 2.137E-01 3.637E-01 1.4125E-02 0.8852 2.3316 1.6866 103.17 7.05 | 7.53 1.4787 | 2.385E-07 | 5.77 |
| 2E+19 32 | 1.583E+06 2.702E+00 | 2.058E-01 3.775E-01 1.4289E-02 0.8760 2.3284 1.6886 102.39 7.06 | 7.54 1.4950 | 2.274E-07 | 5.51 |
| 8E+19 33 | 1.709E+06 2.718E+00 | 1.972E-01 3.887E-01 1.4458E-02 0.8668 2.3252 1.6907 101.61 7.07 | 7.55 1.5115 | 2.168E-07 | 5.26 |
| 4E+19 34 | 1.834E+06 2.733E+00 | 1.887E-01 3.976E-01 1.4629E-02 0.8576 2.3219 1.6927 100.83 7.08 | 7.56 1.5283 | 2.066E-07 | 5.02 |
| 3E+19 35 | 1.956E+06 2.749E+00 | 1.805E-01 $4.042E-01$ $1.4803E-020.8485_2.3187 1.6948 100.05_7.09$ | 7.57 1.5451 | 1.968E-07 | 4.79 |
| 4E+19 36 | 2.077E+06 2.765E+00 | $\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | 7.58 1.5586 | 1.887E-07 | 4.58 |
| 5E+19 37 | 2.192E+06 2.780E+00 | 1.656E-01 4.138E-01 1.5161E-02 0.8290 2.2659 1.6949 100.00 7.10 | 7.58 1.5667 | 1.807E-07 | 3.61 |
| 0E+19 38 | 2.300E+06 2.796E+00 | 1.339E-01 4.156E-01 1.5334E-02 0.8202 2.2416 1.6949 100.00 7.11 | 7.59 1.5742 | 1.733E-07 | 2.55 |
| 1E+19 39 | 2.393E+06 2.812E+00 | 9.796E-02 4.146E-01 1.5498E-02 0.8121 2.2190 1.6949 100.00 7.11 | 7.59 1.5813 | 1.664E-07 | 1.82 |
| 6E+19 40 | 2.475E+06 2.827E+00 | 7.247E-02 4.118E-01 1.5653E-02 0.8045 2.1977 1.6949 100.00 7.12 | 7.60 1.5881 | 1.600E-07 | 1.31 |
| 7E+19 41 | 2.549E+06 2.843E+00 | 5.393E-02 4.077E-01 1.5802E-02 0.7972 2.1776 1.6949 100.00 7.12 | 7.60 1.5946 | 1.538E-07 | 9.53 |
| 3E+18 42 | 2.616E+06 2.858E+00 | 4.025E-02 4.025E-01 1.5946E-02 0.7903 2.1583 1.6949 100.00 7.12 | 7.60 1.6009 | 1.480E-07 | 6.91 |
| 3E+18 43 | 2.679E+06 2.874E+00 | 3.007E-02 3.965E-01 1.6086E-02 0.7836 2.1398 1.6949 100.00 7.13 | 7.61 1.6070 | 1.425E-07 | 5.01 |
| 3E+18 44 | 2.737E+06 2.890E+00 | 2.245E-02 3.899E-01 1.6222E-02 0.7772 2.1220 1.6949 100.00 7.13 | 7.61 1.6129 | 1.371E-07 | 3.63 |
| 2E+18 45 | 2.792E+06 2.905E+00 | 1.673E-02 3.828E-01 1.6356E-02 0.7710 2.1048 1.6949 100.00 7.13 | 7.62 1.6187 | 1.319E-07 | 2.62 |
| 6E+18 46 | 2.844E+06 2.921E+00 | 1.244E-02 3.753E-01 1.6488E-02 0.7650 2.0881 1.6949 100.00 7.14 | 7.62 1.6243 | 1.269E-07 | 1.89 |
| 4E+18 47 | 2.894E+06 2.937E+00 | 9.229E-03 3.674E-01 1.6618E-02 0.7591 2.0719 1.6949 100.00 7.14 | 7.62 1.6299 | 1.221E-07 | 1.36 |
| 2E+18 48 | 2.942E+06 2.952E+00 | 6.823E-03 3.593E-01 1.6745E-02 0.7535 2.0563 1.6949 100.00 7 14 | 7.63 1.6352 | 1.175E-07 | 1.15 |
| 8E+18 49 | 2.986E+06 2.968E+00 | 5.882E-03 3.509E-01 1.6870E-02 0.7480 2.0410 1.6949 100 00 7 15 | 7-63 1-6406 | 1.130E-07 | 8.31 |
| 1E+17 50 | 3.030E+06 2.983E+00 | 4.337E-03 3.424E-01 1.6994E-02 0.2426 2.0262 1.6949 100 00 7 15 | 7.63 1.6458 | 1_086F-07 | 5.92 |
| 6E+17 | 3.073E+06 | 3.177E-03 3.337E-01 1.7117E-02 0 7374 2 0117 1 6949 100 00 7 15 | 7 64 1 6509 | 1 044E-07 | 4 21 |
| 5E+17 | 3.113E+06 | 2.321E-03 3.250E-01 1.7238E-02 0 7324 1 9977 1 6949 100 00 7.15 | 7.64 1.6569 | 1 0045-07 | 2 90 |
| 92 0E+17 | 3.152E+06 | 1.691E-03 3.165E-01 1.7357E-02 0 7275 1 9941 + 6040 409 - 7.16 | 7.64 1.6559 | 0 ((FE 00 | 2.77 |
| 53 7E+17 | 3.190E+06 | 1.229E-03 3.083E-01 1.7474E-02 | 7.64 1.6608 | 7.000E-08 | 1 40 |
| 54 7E+17 | 3.227E+06 | 8.914E-04 3.004E-01 1.7589E-02 | 7.64 1.6656 | 7.310E-08 | 1.49 |
| 55 6E+17 | 3.062E+00 3.262E+06 | 6.454E-04 2.927E-01 1.7703E-02 | 7.65 1.6704 | 8.973E-08 | 1.05 |
| 56 0E+16 | 3.077E+00 3.296E+06 | 0.7135 1.9454 1.6949 100.00 7.17 4.663E-04 2.852E-01 1.7815E-02 | 7.65 1.6750 | 8.654E-08 | 7.44 |

ANEXO RESULTADOS EN VENTANAS VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – FORTRAN 77

| 📾 C:\Users\joack\Desktop\silnucprogram\Debug\nucsil.exe |
|--|
| ENDNUC |
| PRECEEDING NUCLEATION RATE < 6.1782E+16> LESS THAN < 1.0000E-03> OF RECORDED MAXIMUM RATE < 6.2835E+19>. NUCLEATION ENDED |
| |
| KSTEP = 56 TSPEC.TEMP.PH = 3.0771E+00 100.00 7.17 FLASH.GLASH = 0.4100 0.0000E+00 CSIL = 0.7135 FLC = 1.6949 |
| SALT MOLALITY,SOL.CORR.FACTOR = 3.0508E-01 1.0102 SOD. ACT. = 2.0879E-01 PHN,FPH,FINT = 7.6496 1.6750 0.1439 |
| GAMZ,GAMMA = 45.40 33.72 DQS = 6.840E+14 AKIN,DKIN = 2.000 1.000 |
| TOTF,ALPF = 1.017E-03 0.9997 RKF1,RKF2 = 1.262E-01 3.337E+00 RATEKF,RATEKT = 3.392E-03 4.006E-09 |
| PKW,PKSIL,PKF = 12.263 |
| CSILS,ALPSIL,CSI = 0.3639 0.0178 0.0127 SRA,SRR = 1.9258 1.9454 RATEK,RDEPF = 6.7234E-09 8.6543E-08 FKINL = 5.9133E-08 |
| RNUC,ANNUC = 8.886E-08 6.508E+01 ZLD,CN = 2.329E-02 1.771E+02 QLP,QT = 3.340E+25 1.318E+16 RANUC = 5.438E+16 TAUC = 2.602E+00 |
| NCLC = 94 TOTAL NO.,AREA = 1.8554E+19 3.2959E+06 AVER.RAD.,AREA,MASS = 1.1725E-07 1.7764E-13 1.6998E-20 |
| COLL.MASS.DIS.SIL. = 0.3154 0.7135 SUM = 1.0289 SHOULD BE = 1.0288 PERCENT DIF. = 0.0106 |

ANEXO RESULTADOS EN VENTANAS VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – FORTRAN 77

E

| C:\Users\joack\Desktop\silnucprogram\Debug\nucsil.exe | | |
|--|---------------|-------------|
| NUMBER OF PARTICLES IN EACH CLASS | | _ |
| 2.13613E+16 2.67016E+15 1.03898E+00 1.97502E+15 1 21446E+16 2 54222E+16 3 54392E+16 5 02625E+16 | 5.52995E+15 | 1.05451E+16 |
| 6.16211E+16 7.68094E+16 9.38862E+16 1.18345E+17 1 74805E+17 1 99270E+17 2 32103E+17 2 44954E+17 | 1.32281E+17 | 1.59677E+17 |
| 2.78228E+17 2.91117E+17 3.24590E+17 3.35011E+17 4 06495E+17 4 16655E+17 4 45566E+17 4 49174E+17 | 3.67856E+17 | 3.75762E+17 |
| 4.74433E+17 $4.71831E+17$ $4.92835E+17$ $4.84373E+17$ | 5.01336E+17 | 4.87881E+17 |
| 4.80569E+17 $4.60492E+17$ $4.6344E+17$ $4.43655E+174.2016E+17$ $4.60492E+17$ $4.6344E+17$ $4.43655E+17$ | 4.46294E+17 | 4.25646E+17 |
| 3.88677E+17 3.71486E+17 3.70929E+17 3.54958E+17 | 3.54809E+17 | 3.27346E+17 |
| 1.41716E+17 $1.19175E+17$ $1.02290E+17$ $8.64035E+16$ | 7.41142E+16 | 6.27744E+16 |
| 2.82942E+16 2.40113E+16 2.04697E+16 1.73611E+16 | 1.47722E+16 | 1.25171E+16 |
| 1.06277E+16 8.77703E+15 7.62620E+15 8.46177E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 3.88856E+15 3.28179E+15 | 2.76453E+15 | 2.32958E+15 |
| 9.80826E+14 8.24141E+14 6.91945E+14 5.80866E+14 | | |
| | | |
| ГИЛІІОЛЕ ЛИЛІІ А АСОЛАЕ-ОЛ. Л. ОСОЛАЕ-ОЛ. 1. 010ССЕ-ОЛ. 1. 041СОЕ-ОЛ. | 1 000375-07 | 4 933398-09 |
| 1.69439E-07 $1.65754E-07$ $1.62156E-07$ $1.61480E-071.69439E-07$ $1.65754E-07$ $1.62156E-07$ $1.61480E-07$ | 1 47506576-07 | 1.73232E-07 |
| 1.30015E-07 $1.30021E-07$ $1.31202E-07$ $1.30000E-071.44065E-07$ $1.40968E-07$ $1.40626E-07$ $1.37686E-071.27204E-07$ $1.24206E-07$ $1.24206E-07$ $1.2120E-07$ | 1 21220E-07 | 1.47101E-07 |
| 1.37374E-07 $1.3737E-07$ $1.37275E-07$ $1.31355E-071.28505E-07$ $1.25977E-07$ $1.25811E-07$ $1.23397E-071.23257E-07$ $1.260E-07$ $1.200E-07$ $1.21397E-07$ | 1.313326-07 | 1.20077E-07 |
| 1.23230E-07 $1.20734E-07$ $1.20030E-07$ $1.10040E-071.16388E-07$ $1.14406E-07$ $1.14345E-07$ $1.12460E-07$ | 1.10550E-07 | 1.104006-07 |
| 1.12411E-07 1.10617E-07 1.10580E-07 1.08877E-07 1.07199E-07 1.05658E-07 1.05636E-07 1.04168E-07 | 1.08844E-07 | 1.07225E-07 |
| 1.04148E-07 1.02750E-07 1.02732E-07 1.01400E-07 1.00693E-07 9.98814E-08 1.00274E-07 9.94822E-08 | 1.01380E-07 | 1.00287E-07 |
| 9.98666E-08 9.91011E-08 9.94810E-08 9.87461E-08 9.87968E-08 9.81283E-08 9.85035E-08 9.78693E-08 | 9.91233E-08 | 9.84210E-08 |
| 9.82445E-08 9.76449E-08 9.80205E-08 9.74552E-08 9.76767E-08 9.71786E-08 9.67086E-08 9.70848E-08 | 9.78313E-08 | 9.73000E-08 |
| 9.66528E-08 9.70304E-08 9.66278E-08 9.70054E-08 9.66640E-08 9.70408E-08 9.67219E-08 9.70982E-08 | 9.66321E-08 | 9.70094E-08 |
| 9.68043E-08 9.71803E-08 9.69102E-08 9.72856E-08 Total Mass in Fach class | | |
| 1 76388F-02 1 25024F-02 6 70573F-20 1 14141F-04 | 2 98603F-04 | 5 07245F-04 |
| 7.71704E-04 1.07126E-03 1.39821E-03 1.97802E-03 2 24961E-03 2 62727E-03 3 00780E-03 3 75522E-03 | 3 93476F-03 | 4 71067F-03 |
| 4.83628E-03 5.16526E-03 5.97255E-03 5.91617E-03 6.62715E-03 6.56141E-03 7.27440E-03 7.05275E-03 | 7 71042F-03 | 7 41155E-03 |
| 7.98186E-03 $7.70799E-03$ $8.21015E-03$ $7.80926E-039.2030E-03$ $7.70799E-03$ $8.21015E-03$ $7.80926E-03$ | 7 728975-02 | 7.411332 03 |
| 7.30964E-03 6.70895E-03 6.82356E-03 6.24066E-03 | C 225025-02 | A OFESOE-05 |
| 4.86515E-03 4.44304E-03 4.44208E-03 4.0668E-03 4.0668E-03 4.44304E-03 4.44208E-03 4.0668E-03 | 3.J2J02E 0J | 1.03337E-03 |
| 2.64120E-03 $2.12780E-03$ $1.84498E-03$ $1.50424E-031.6697E-03$ $1.6726E-03$ $1.64498E-03$ $1.50424E-03$ | 6 6790FE-04 | 5.05510E-05 |
| 4.79927E-04 $3.98890E-04$ $3.45194E-04$ $2.87374E-042.49261E-04$ $2.66927E-04$ $1.79201E-04$ $1.49600E-04$ | 1 220025-04 | 1 06691E-04 |
| 2.40201E-04 $2.00047E-04$ $1.70301E-04$ $1.40000E-049.16621E-05 7.64009E-05 6.38247E-05 5.47130E-054$ ECC4E-06 2.00724E-06 2.246-06 2.7104E-06 | 2 20010E-05 | 1.06071E-04 |
| 1.33634E 05 3.67724E 05 3.24624E 05 2.77194E 05 1.63845E 05 1.39548E 05 1.16200E 05 9.88735E 06 0.23207E 06 6 90976 E 03297E 06 4 04000E 06 | 2.30017E-05 | T.10110E-02 |
| 0.23507E-00 0.77070E-00 5.82727E-06 4.94889E-06 | | |
| | | ***** |
| ******** | | |

ANEXO RESULTADOS EN VENTANAS VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – FORTRAN 77

E

| KSTEP RATE | TIME Carea | CSIL SRR FLC TEMP PH NUC.FLUX DEP.RATE ALPSII | PHN | FPH | RDEPF | NUC. |
|--------------------------|--------------------------------------|--|---------------|----------|-----------|------|
| 57 7E+16 NEW DI | 3.093E+00 3.329E+06 ELTC = 3.1 | 0.7091 1.9332 1.6949 100.00 7.1 2.933E-04 2.780E-01 1.7926E-0 L250E-02 AT STEP = 57 | .7 7.6!)2 | 5 1.6795 | 8.352E-08 | 4.51 |
| KSTEP RATE | TIME Carea | CSIL SRR FLC TEMP PH NUC.FLUX DEP.RATE ALPSII | PHN ' | FPH | RDEPF | NUC. |
| 58 05+00 | 3.124E+00 | 0.7007 1.9096 1.6949 100.00 7.1 | 8 7.6 | 5 1.6884 | 7.794E-08 | 0.00 |
| 0E-00 59 | 3.155E+00 | 0.6926 1.8873 1.6949 100.00 7.1 | 8 7.6 | 6 1.6969 | 7.288E-08 | 0.00 |
| 0E+00 60 0E-00 | 3.187E+00 | 0.000E+00 2.515E-01 1.8354E-0 0.6849 1.8660 1.6949 100.00 7.1 | 9 7.6 | 7 1.7051 | 6.831E-08 | 0.00 |
| 0E+00 61 | 3.218E+00 | 0.000E+00 2.396E-01 1.8559E-0 0.6776 1.8457 1.6949 100.00 7.1 | 12 .9 7.6 | 7 1.7131 | 6.415E-08 | 0.00 |
| 0E+00 62 | 3.561E+06 3.249E+00 | 0.000E+00 2.284E-01 1.8759E-0 0.6707 1.8263 1.6949 100.00 7.2 | 12 10 7.6 | 8 1.7207 | 6.036E-08 | 0.00 |
| 0E+00 63 | 3.611E+06 3.280E+00 | 0.6640_1.8078_1.6949_100.00_7.2 | 12 10 7.6 | 8 1.7282 | 5.690E-08 | 0.00 |
| 0E+00 NEW DI | 3.658E+06 ELTC = 6.2 | 0.000E+00 2.082E-01 1.9145E-0 2500E-02 AT STEP = 63 | 12 | | | |
| KSTEP RATE | TIME Carea | CSIL SRR FLC TEMP PH NUC.FLUX DEP.RATE ALPSII | PHN | FPH | RDEPF | NUC. |
| 64 05+00 | 3.343E+00 | 0.6515 1.7733 1.6949 100.00 7.2 | 21 7.6 | 9 1.7423 | 5.083E-08 | 0.00 |
| 65 65 | 3.405E+00 | 0.6401 1.7416 1.6949 100.00 7.2 | 22 7.7 | 0 1.7555 | 4.570E-08 | 0.00 |
| 66 66 | 3.468E+00 | 0.6296 1.7125 1.6949 100.00 7.2 0.600E+00 1 (125 1.6949 100.00 7.2 | 22 7.7 | 1 1.7679 | 4.133E-08 | 0.00 |
| 67 67 | 3.530E+00 | 0.0002+00 1.0122-01 2.01072-0 0.6200 1.6856 1.6949 100.00 7.2 | 23 7.7 | 1 1.7795 | 3.758E-08 | 0.00 |
| 68 68 | 3.593E+00 | 0.6112 1.6612 1.6949 100.00 7.2 | 24 7.7 | 2 1.7903 | 3.440E-08 | 0.00 |
| 0E+00 69 | 3.655E+00 | 0.6034 1.6397 1.6949 100.00 7.2 | 24 7.7 | 2 1.8000 | 3.175E-08 | 0.00 |
| 0E+00 70 | 4.078E+06 3.718E+00 | 0.000E+00 1.150E-01 2.1067E- 0.5965 1.6203 1.6949 100.00 7.2 | 25 7.7 | 3 1.8088 | 2.951E-08 | 0.00 |
| 0E+00 71 | 4.124E+06 3.780E+00 | 0.000E+00 1.044E-01 2.1313E- 0.5902 1.6029 1.6949 100.00 7.2 | 25 7.7 | 3 1.8169 | 2.758E-08 | 0.00 |
| 0E+00 72 | 4.165E+06 3.843E+00 | 0.000E+00 9.475E-02 2.1540E-0 0.5845 1.5870 1.6949 100.00 7.2 | 92 26 7.7 | 4 1.8243 | 2.591E-08 | 0.00 |
| NEW DI | 4.202E+06 ELTC = 1.3 | 0.000E+00 8.595E-02 2.1751E-0 2500E-01 AT STEP = 72 | 92 | | | |
| KSTEP RATE | TIME Carea | CSIL SRR FLC TEMP P NUC.FLUX DEP.RATE ALPSI | PHN | FPH | RDEPF | NUC. |
| 73 ИЕ+ИИ | 3.968E+00 4.263E+06 | 0.5747 1.5600 1.6949 100.00 7.2 0.000E+00 7.039E-02 2.2119E-0 | 26 7.7 12 | 5 1.8371 | 2.324E-08 | 0.00 |
| 74 0F+00 | 4.093E+00 4.315E+06 | 0.5664 1.5366 1.6949 100.00 7.2 0.000F+00 6 065F-02 2 2449F-0 | 27 7.7 | 5 1.8484 | 2.109E-08 | 0.00 |
| 75 0F+00 | 4.218E+00 4.355E+06 | 0.5595 1.5179 1.6949 100.00 7.2 0.000F+00 5 257E-02 2 2718E-0 | 28 7.7 | 6 1.8576 | 1.948E-08 | 0.00 |
| 76 0F+00 | 4.343E+00 4.390E+06 | 0.5535 1.5015 1.6949 100.00 7.2 0.000F+00 4 531E-02 2 2961E-0 | 28 7.7 | 6 1.8658 | 1.814E-08 | 0.00 |
| 0E-00 77 | 4.468E+00 | 0.5485 1.4874 1.6949 100.00 7.2 | 29 7.7 | 7 1.8728 | 1.704E-08 | 0.00 |
| NEW DI | ELTC = 2.1 | 5000E-01 AT STEP = 77 | 92 | | | |
| KSTEP RATE | TIME CAREA | CSIL SRR FLC TEMP PH NUC.FLUX DEP.RATE ALPSII | PHN | FPH | RDEPF | NUC. |
| 78 0F+00 | 4.718E+00 | 0.5402 1.4642 1.6949 100.00 7.2 0.000F+00 2 256E-02 2 3522E-0 | 29 7.7 | 7 1.8847 | 1.534E-08 | 0.00 |
| 79 0E+00 | 4.968E+00 | 0.5338 1.4459 1.6949 100.00 7.3 0.000F+00 2 126-02 23932E-0 | 30 7.7 | 8 1.8942 | 1.408E-08 | 0.00 |
| 0E+00 0E+00 NEU DI | 5.218E+00 4.528E+06 | $0.5286 \ 1.4317 \ 1.6949 \ 100.00 \ 7.3 \ 0.000E+00 \ 1.70E-02 \ 2.4053E-0 \ 0.000E+00 \ 1.70E-02 \ 2.4053E-0 \ 0.000E-01 \ 0.5EE = 80$ | 30 7.7 32 | 8 1.9017 | 1.316E-08 | 0.00 |

RESULTADOS EN VENTANAS VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – FORTRAN 77

| C:\Us | ers\joack\Deskt | top\silnucprogram\Debug\nucsil.exe | | | |
|----------------|------------------------|---|-------------|------------|------|
| KSTEP RATE | TIME Carea | CSIL SRR FLC TEMP PH NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL | PHN FPH | RDEPF | NUC. |
| 81 | 5.718E+00 | 0.5208 1.4098 1.6949 100.00 7.31 | 7.79 1.9134 | 1.182E-08 | 0.00 |
| 0E+00 82 | 4.566E+06 6.218E+00 | 0.000E+00 1.220E-02 2.4418E-02 $0.5152_{-}1.3943$ 1.6949 100.00 7.31 | 7.79 1.9218 | 1.092E-08 | 0.00 |
| 0E+00 83 | 4.591E+06 6.718E+00 | 0.000E+00 8.509E-03 2.4683E-02 0.5111 1.3835 1.6949 100.00 7.32 | 7.80 1.9277 | 1.033E-08 | 0.00 |
| 0E+00 84 | 4.606E+06 7.218E+00 | 0.000E+00 7.879E-03 2.4871E-02 0.5075 1.3730 1.6949 100.00 7.32 | 7.80 1.9335 | 9.776E-09 | 0.00 |
| ØE+ÖØ | 4.619E+06 | 0.000E+00 5.031E-03 2.5056E-02 0.5051 1.3667 1.6949 100 00 7.32 | 7 80 1 9370 | 9 453E-09 | 0 00 |
| ØE+00 | 4.625E+06 | 0.000E+00 4.748E-03 2.5169E-02 | 7.00 1.7570 | 0 4000 00 | 0.00 |
| 86 0E+00 | 4.630E+06 | 0.5028 1.3603 1.6949 100.00 7.32 0.000E+00 4.448E-03 2.5284E-02 | 7.81 1.9406 | 9.133E-09 | 0.00 |
| 87 0E+00 | 8.718E+00 4.634E+06 | 0.5006 1.3543 1.6949 100.00 7.33 0.000E+00 4.169E-03 2.5393E-02 | 7.81 1.9439 | 8.840E-09 | 0.00 |
| 88 0F+00 | 9.218E+00 4 637E+06 | 0.4986 1.3487 1.6949 100.00 7.33 0.000F+00 3.909F-03 2.5495F-02 | 7.81 1.9471 | 8.571E-09 | 0.00 |
| 89 05±00 | 9.718E+00 | 0.4967 1.3435 1.6949 100.00 7.33 | 7.81 1.9501 | 8.324E-09 | 0.00 |
| 90 | 1.022E+01 | 0.4949 1.3385 1.6949 100.00 7.33 | 7.81 1.9529 | 8.096E-09 | 0.00 |
| 0E+00 91 | 4.640E+06 1.072E+01 | 0.000E+00 3.440E-03 2.5684E-02 0.4933_1.3339 1.6949_100.00_7.33 | 7.81 1.9556 | 7.886E-09 | 0.00 |
| 0E+00 92 | 4.641E+06 1.122E+01 | 0.000E+00 3.230E-03 2.5771E-02 0.4917 1.3296 1.6949 100.00 7.33 | 7.81 1.9581 | 7.693E-09 | 0.00 |
| 0E+00 93 | 4.640E+06 | 0.000E+00 3.035E-03 2.5853E-02 0.4902 1.3255 1.6949 100.00 7.34 | 7-82 1-9604 | 7-513E-09 | 0_00 |
| 0E+00 | 4.639E+06 | 0.000E+00 2.854E-03 2.5931E-02 | 7 02 1 0626 | 7 2475-09 | 0 00 |
| 0E+00 | 4.637E+06 | 0.000E+00 2.685E-03 2.6004E-02 | 7.02 1.7020 | 7.347E-07 | 0.00 |
| 95 0E+00 | 1.272E+01 4.634E+06 | 0.4875 1.3180 1.6949 100.00 7.34 0.000E+00 2.529E-03 2.6074E-02 | 7.82 1.9647 | 7.193E-09 | 0.00 |
| 96 0E+00 | 1.322E+01 4.634E+06 | 0.4858 1.3511 1.6949 97.66 7.35 0.000E+00 4.517E-03 2.6167E-02 | 7.84 1.9948 | 7.532E-09 | 0.00 |
| 97 ИЕ+ЙЙ | 1.372E+01 4.640E+06 | 0.4829 1.3854 1.6949 95.16 7.37 0.000F+00 7.875F-03 2.6313F-02 | 7.86 2.0294 | 7.760E-09 | 0.00 |
| 98 97 98 | 1.422E+01 | 0.4779 1.4135 1.6949 92.66 7.39 0.000 0.00 1.239 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0. | 7.88 2.0693 | 7.658E-09 | 0.00 |
| 99 | 1.472E+01 | 0.4714 1.4392 1.6949 90.16 7.42 | 7.90 2.1123 | 7.408E-09 | 0.00 |
| 0E+00 100 | 4.687E+06 1.522E+01 | 0.4635_1.4595 1.6949 87.66_7.44 | 7.93 2.1600 | 6.942E-09 | 0.00 |
| 0E+00 101 | 4.726E+06 1.572E+01 | 0.000E+00 1.594E-02 2.7435E-02 0.4549 1.4794 1.6949 85.16 7.47 | 7.96 2.2099 | 6.459E-09 | 0.00 |
| 0E+00 1 02 | 4.767E+06 1.622E+01 | 0.000E+00 1.839E-02 2.7947E-02 0.4458 1.4981 1.6949 82.66 7.50 | 7.99 2.2622 | 5-951E-09 | 0-00 |
| 0E+00 | 4.812E+06 | 0.000E+00 1.867E-02 2.8508E-02 | 0 00 0 0100 | E 496E-09 | 0 00 |
| 0E+00 | 4.861E+06 | 0.000E+00 1.851E-02 2.9122E-02 | 0.02 2.5172 | J.420E 87 | 0.00 |
| KSTEP | ELIC = Z.: TIME | CSIL SRR FLC TEMP PH | PHN FPH | RDEPF | NUC. |
| RATE | CAREA | NUC.FLUX DEP.RATE ALPSIL | | | |
| 104 0E+00 | 1.697E+01 4.885E+06 | 0.4319 1.5248 1.6949 78.91 7.54 0.000E+00 1.885E-02 2.9428E-02 | 8.03 2.3450 | 5.188E-09 | 0.00 |
| 0E+00 | 4.909E+06 | 0.000E+00 1.900E-02 2.9749E-02 | 9 06 2 4027 | 4 710E-00 | 0 00 |
| 0E+00 | 4.935E+06 | 0.000E+00 1.824E-02 3.0079E-02 | 0.00 2.4027 | 1. (10E-07 | 0.00 |
| 107 0E+00 | 1.772E+01 4.959E+06 | 0.4181 1.5524 1.6949 75.16 7.59 0.000E+00 1.826E-02 3.0401E-02 | 8.08 2.4319 | 4.497E-09 | 0.00 |
| 108 0E+00 | 1.797E+01 4.983E+06 | 0.4137 1.5504 1.6949 74.46 7.60 0.000E+00 1.734E-02 3.0730E-02 | 8.09 2.4526 | 4.243E-09 | 0.00 |
| 109 ИГ+ИИ | 1.822E+01 5.006F+06 | 0.4094 1.5475 1.6949 73.83 7.61 0.000F+00 1.648F-02 3.1047F-02 | 8.10 2.4717 | 4.011E-09 | 0.00 |
| 110 0F+00 | 1.847E+01 | 0.4054 1.5453 1.6949 73.21 7.62 | 8.11 2.4906 | 3.802E-09 | 0.00 |
| NEW DI | ELTC = 5.0 | 0.000E-01 AT STEP = 110 | | | |

ANEXO

RESULTADOS EN VENTANAS VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – FORTRAN 77

| c:\Us | ers\joack\Deskt | top\silnucprogram\Debug\nucsil | exe | | | |
|---------------|------------------------|---|---------------------------|-------------|-----------|------|
| KSTEP RATE | T I ME CAREA | CSIL SRR FLC NUC.FLUX DEP.RATE | TEMP PH ALPSIL | PHN FPH | RDEPF | NUC. |
| 111 0F+00 | 1.897E+01 5 069F+06 | 0.3979 1.5427 1.6949 0 000F+00 1 435F-02 | 71.96 7.64 | 8.13 2.5278 | 3.439E-09 | 0.00 |
| 112 | 1.947E+01 | 0.3910 1.5422 1.6949 | 70.71 7.65 | 8.15 2.5643 | 3.137E-09 | 0.00 |
| 0E+00 113 | 1.997E+01 | 0.3846 1.5436 1.6949 | 69.46 7.67 | 8.17 2.6005 | 2.882E-09 | 0.00 |
| 0E+00 114 | 5.140E+06 2.047E+01 | 0.000E+00 1.266E-02 0.3785 1.5457 1.6949 | 3.3046E-02 68.21 7.69 | 8.18 2.6367 | 2.654E-09 | 0.00 |
| 0E+00 115 | 5.173E+06 2.097E+01 | 0.000E+00 1.175E-02 0.3728 1.5496 1.6949 | 3.3581E-02 66.96 7.71 | 8.20 2.6727 | 2.460E-09 | 0.00 |
| 0E+00 | 5.204E+06 | 0.000E+00 1.130E-02 0 3674 1 5541 1 6949 | 3.4092E-02 | 8 22 2 2088 | 2 2845-09 | 0 00 |
| ØE+00 | 5.234E+06 | 0.000E+00 1.057E-02 | 3.4602E-02 | 0.22 2.7800 | 2.2042 87 | 0.00 |
| 0E+00 | 5.263E+06 | 0.000E+00 1.016E-02 | 64.46 7.75 3.5103E-02 | 8.24 2.7449 | 2.128E-09 | 0.00 |
| 118 0E+00 | 2.247E+01 5.290E+06 | 0.3572 1.5664 1.6949 0.000E+00 9.785E-03 | 63.21 7.76 3.5585E-02 | 8.26 2.7810 | 1.991E-09 | 0.00 |
| 119 ИЕ+ИИ | 2.297E+01 5.316E+06 | 0.3525 1.5738 1.6949 0.000E+00 9.224E-03 | 61.96 7.78 3.6067E-02 | 8.28 2.8173 | 1.867E-09 | 0.00 |
| 120 05+00 | 2.347E+01 | 0.3479 1.5821 1.6949 0 000E+00 8 953E-03 | 60.71 7.80 3 6541 E-02 | 8.30 2.8536 | 1.754E-09 | 0.00 |
| 121 | 2.397E+01 | 0.3435 1.5912 1.6949 | 59.46 7.82 | 8.31 2.8902 | 1.651E-09 | 0.00 |
| 122 | 2.447E+01 | 0.3392 1.6009 1.6949 | 58.21 7.84 | 8.33 2.9270 | 1.557E-09 | 0.00 |
| 0E+00 123 | 5.391E+06 2.497E+01 | 0.000E+00 8.302E-03 0.3352 1.6117 1.6949 | 3.7474E-02 56.96 7.85 | 8.35 2.9640 | 1.473E-09 | 0.00 |
| 0E+00 124 | 5.414E+06 2.547E+01 | 0.000E+00 7.960E-03 0.3313 1.6234 1.6949 | 3.7929E-02 55.71 7.87 | 8.37 3.0009 | 1.396E-09 | 0.00 |
| 0E+00 | 5.437E+06 | 0.000E+00 7.589E-03 | 3.8373E-02 | 8 30 3 0380 | 1 3275-09 | 0 00 |
| 0E+00 | 5.458E+06 | 0.000E+00 7.242E-03 | 3.8808E-02 | | 1 9645 80 | 0.00 |
| 0E+00 | 5.478E+06 | 0.000E+00 6.925E-03 | 3.9232E-02 | 8.41 3.0753 | 1.264E-07 | 0.00 |
| 127 0E+00 | 2.697E+01 5.497E+06 | 0.3206 1.6647 1.6949 0.000E+00 6.634E-03 | 51.96 7.93 3.9646E-02 | 8.43 3.1127 | 1.207E-09 | 0.00 |
| 128 ØE+ØØ | 2.747E+01 5.516E+06 | 0.3174 1.6804 1.6949 0.000E+00 6.366E-03 | 50.71 7.95 4.0052E-02 | 8.44 3.1503 | 1.154E-09 | 0.00 |
| 129 0F+00 | 2.797E+01 5.534E+06 | 0.3143 1.6845 1.6949 0 000F+00 6 072F-03 | 49.91 7.96 4 0450F-02 | 8.46 3.1776 | 1.097E-09 | 0.00 |
| 130 | 2.847E+01 | 0.3113 1.6734 1.6949 0.000E+00 E 750E-02 | 49.71 7.97 | 8.46 3.1908 | 1.036E-09 | 0.00 |
| | 2.897E+01 | 0.3085 1.6631 1.6949 | 49.51 7.97 | 8.47 3.2038 | 9.804E-10 | 0.00 |
| 0E+00 132 | 5.566E+06 2.947E+01 | 0.000E+00 5.457E-03 0.3059 1.6535 1.6949 | 4.1204E-02 49.31 7.98 | 8.48 3.2164 | 9.299E-10 | 0.00 |
| 0E+00 133 | 5.581E+06 2.997E+01 | 0.000E+00 5.190E-03 0.3033 1.6445 1.6949 | 4.1562E-02 49.11 7.98 | 8.48 3.2287 | 8.838E-10 | 0.00 |
| 0E+00 134 | 5.596E+06 3.047F+01 | 0.000E+00 4.945E-03 0.3009 1.6361 1.6949 | 4.1909E-02 48-91 7-99 | 8 49 3 2408 | 8_417F-10 | 0_00 |
| 0E+00 | 5.609E+06 | 0.000E+00 4.721E-03 | 4.2246E-02 | 8 49 3 2526 | 8 031E-10 | 0 00 |
| 0E+00 | 5.622E+06 | 0.000E+00 4.515E-03 | 4.2572E-02 | 0.17 3.2520 | | 0.00 |
| 136 0E+00 | 3.147E+01 5.635E+06 | 0.2964 1.6210 1.6949 0.000E+00 4.325E-03 | 48.51 8.00 4.2890E-02 | 8.50 3.2642 | 7.675E-10 | 0.00 |
| 137 0E+00 | 3.197E+01 5.647E+06 | 0.2943 1.6141 1.6949 0.000E+00 4.148E-03 | 48.31 8.01 4.3198E-02 | 8.51 3.2756 | 7.347E-10 | 0.00 |
| 138 0E+00 | 3.247E+01 5.658E+06 | 0.2922 1.6077 1.6949 0.000E+00 3.985E-03 | 48.11 8.01 4.3499E-02 | 8.51 3.2867 | 7.043E-10 | 0.00 |

ANEXO

RESULTADOS EN VENTANAS VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – FORTRAN 77

| ov. C: | \Users\joack\Deskt | op\silnucprogram\Debug\nucsil.exe | | | |
|------------|----------------------------|---|-------------|-----------|--------|
| 13 05+0 | 9 3.297E+01 | 0.2903 1.6017 1.6949 47.91 8.02 | 8.52 3.2977 | 6.761E-10 | 0.00 🔺 |
| 14 | 0 3.347E+01 | $0.2884_{1.5960}$ $3.6332_{0.5}$ $4.37722_{0.2}$ | 8.52 3.3084 | 6.500E-10 | 0.00 |
| 0E+0 14 | 0 5.680E+06 1 3.397E+01 | 0.000E+00 3.692E-03 4.4077E-02 0.2866 1.5907 1.6949 47.51 8.03 | 8.53 3.3190 | 6.256E-10 | 0.00 |
| 0E+0 14 | 0 5.690E+06 2 3.447E+01 | 0.000E+00 3.559E-03 4.4356E-02 0.2848 1.5858 1.6949 47.31 8.03 | 8.53 3.3295 | 6.028E-10 | 0.00 |
| 0E+0 | 0 5.699E+06 | 0.000E+00 3.436E-03 4.4628E-02 0.2221 E011 1.6949 4.1628E-02 | 0 E4 2 2200 | E 01EE_10 | 0 00 |
| 0E+0 | 0 5.709E+06 | 0.000E+00_3.320E-03_4.4894E-02 | 0.54 3.3370 | 5.015E-10 | 0.00 |
| 14 0E+0 | 4 3.547E+01 0 5.718E+06 | 0.2815 1.5767 1.6949 46.91 8.04 0.000E+00 3.211E-03 4.5155E-02 | 8.54 3.3500 | 5.616E-10 | 0.00 |
| 14 0F+0 | 5 3.597E+01 | 0.2799 1.5726 1.6949 46.71 8.05 | 8.55 3.3600 | 5.429E-10 | 0.00 |
| 14 | 6 3.647E+01 | 0.2784 1.5688 1.6949 46.51 8.05 | 8.55 3.3700 | 5.253E-10 | 0.00 |
| ие+и 14 | 0 5.735E+06 7 3.697E+01 | 0.000E+00 3.013E-03 4.5659E-02 0.2769 1.5652 1.6949 46.31 8.06 | 8.56 3.3798 | 5.087E-10 | 0.00 |
| 0E+0 | 0 5.744E+06 | 0.000E+00 2.922E-03 4.5904E-02 | 0 66 0 0004 | 4 9215-10 | 0 00 |
| 0E+0 | 0 5.752E+06 | 0.000E+00 2.836E-03 4.6144E-02 | 0.50 5.5074 | 4.7512 10 | 0.00 |
| 14 0E+0 | 9 3.797E+01 0 5.760E+06 | 0.2741 1.5586 1.6949 45.91 8.07 0.000E+00 2.755E-03 4.6379E-02 | 8.57 3.3990 | 4.784E-10 | 0.00 |
| 15 05+0 | 0 3.847E+01 | 0.2727 1.5557 1.6949 45.71 8.07 | 8.57 3.4086 | 4.644E-10 | 0.00 |
| 15 | 1 3.897E+01 | 0.27141.55291.694945.518.08 | 8.58 3.4179 | 4.512E-10 | 0.00 |
| 0E+0 15 | 0 5.774E+06 2 3.947E+01 | 0.000E+00 2.606E-03 4.6837E-02 0.2701 1.5503 1.6949 45.31 8.08 | 8.58 3.4273 | 4.387E-10 | 0.00 |
| 0E+0 | 0 5.782E+06 | 0.000E+00 2.537E-03 4.7060E-02 | 0 50 2 4265 | 4 2695-10 | 0 00 |
| 0E+0 | 0 5.789E+06 | 0.000E+00 2.471E-03 4.7279E-02 | 0.37 3.4303 | 4.2072-10 | 0.00 |
| 15 0E+0 | 4 4.047E+01 0 5.795E+06 | 0.2677 1.5457 1.6949 44.91 8.09 0.000E+00 2.409E-03 4.7494E-02 | 8.59 3.4458 | 4.156E-10 | 0.00 |
| 15 | 5 4.097E+01 | 0.2665 1.5436 1.6949 44.71 8.09 0.000E+00 2.240E-02 4.770 8.09 | 8.59 3.4549 | 4.049E-10 | 0.00 |
| 15 | 6 4.147E+01 | 0.26531.54171.694944.518.10 | 8.60 3.4639 | 3.947E-10 | 0.00 |
| 0E+0 15 | 0 5.808E+06 7 4.197E+01 | 0.000E+00 2.292E-03 4.7915E-02 0.2642 1.5399 1.6949 44.31 8.10 | 8.60 3.4729 | 3.850E-10 | 0.00 |
| 0E+0 | 0 5.815E+06 | 0.000E+00 2.238E-03 4.8120E-02 | 0 61 0 4017 | 2 7575-10 | 0 00 |
| 0E+0 | 0 5.821E+06 | 0.000E+00 2.187E-03 4.8322E-02 | 0.01 3.4017 | 2./2/E-10 | 0.00 |
| 15 0E+0 | 9 4.297E+01 0 5.827E+06 | 0.2620 1.5367 1.6949 43.91 8.11 0.000E+00 2.137E-03 4.8522E-02 | 8.61 3.4906 | 3.668E-10 | 0.00 |
| 16 | 0 4.347E+01 | 0.2609 1.5354 1.6949 43.71 8.12 | 8.62 3.4994 | 3.584E-10 | 0.00 |
| 16 | 1 4.397E+01 | 0.2599 1.5341 1.6949 43.51 8.12 | 8.62 3.5081 | 3.503E-10 | 0.00 |
| 0E+0 16 | 0 5.838E+06 2 4.447E+01 | 0.000E+00 2.045E-03 4.8912E-02 0.2589 1.5330 1.6949 43.31 8.12 | 8.62 3.5168 | 3.425E-10 | 0.00 |
| 0E+0 | 0 5.844E+06 | 0.000E+00 2.002E-03 4.9103E-02 | 0 (3 3 5330 | 2 200E_10 | 0 00 |
| 0E+0 | 0 5.855E+06 | 0.000E+00 1.920E-03 4.9478E-02 | 0.03 3.5337 | 3.2006-10 | 0.00 |
| 16 ИЕ+И | 6 4.647E+01 И 5.865E+06 | 0.2550 1.5295 1.6949 42.51 8.14 0.000E+00 1.845E-03 4.9843E-02 | 8.64 3.5510 | 3.146E-10 | 0.00 |
| 16 05-0 | 8 4.747E+01 | 0.2532 1.5284 1.6949 42.11 8.15 0.000F+00 1 776F-02 F 0200F 02 | 8.65 3.5678 | 3.023E-10 | 0.00 |
| 17 | 0 4.847E+01 | 0.2515 1.5276 1.6949 41.71 8.16 | 8.66 3.5846 | 2.908E-10 | 0.00 |
| 0E+0 17 | U 5.885E+06 2 4.947E+01 | 0.000E+00 1.712E-03 5.0547E-02 0.2498 1.5272 1.6949 41.31 8.17 | 8.67 3.6012 | 2.802E-10 | 0.00 |
| ØE+Ø | 0 5.894E+06 | 0.000E+00 1.652E-03 5.0888E-02 | | | |
| SIL | OUT SILOUT | SILOUT SILOUT SILOUT SILOUT SI | LOUT SILOUT | SILOUT SI | LOUT |
| 011 | | | 0500 | | |
| SIL | TCH CONCENTR | HITON HHS DROPPED BELOW SILOUT = 0 | .2500 | | |
| | | | | | |
| ### | | | ********** | | **** |
| | ****** | ****** | | | |
E

ANEXO RESULTADOS EN VENTANAS VENTANA DE COMANDOS – SILNUC – FORTRAN 77

| <pre>KSTEP = 172 TSPEC.TEMP.PH = 4.9468E+01 41.31 8.17 FLASH.GLASH = 0.4100 0.0000E+00 CSTL = 0.2498 FLC = 1.6949 SALT MOLALITY.SOL.CORR.FACTOR = 3.0508E-01 1.0102 SOD. ACT. = 2.1861E-01 PHN.FRI.FINT = 8.6659 3.6012 0.4585 GAMZ.GAMMA = 48.28 16.93 DQS = 6.840E+14 AKIN.DKIN = 2.182 1.0000 TOTF.ALPF = 1.017E-03 1.0000 RKF1.RKF2 = 1.322E+01 1.303E+01 RATEKF.RATEKT = 1.325E-02 2.843E-11 PKW.PKSIL_PKT = 13.501 9.603 3.311 GSIL.GF.GNA = 0.6798 0.7475 0.7166 EPSD.DENS = 72.72 0.9917 ADH.BDH = 0.5256 0.3312 CSILS.ALPSIL_CSI = 0.1568 0.0509 0.0127 SRA.SRR = 1.5119 1.5272 RATEK.RDEPF = 1.0276E-10 2.8022E-10 FKINL = 3.5225E-08 RNUC.ANNUC = 8.318E-08 5.338E+01 ZLD.CN = 2.051E-02 7.075E-01 QLP.QT = 3.340E+25 4.121E+20 RANUC = 5.981E+18 TAUC = 8.397E+02 NCLC = 94 TOTAL NO.AREA = 1.8554E+19 5.0941E+06 AUER.RAD.AREA.MASS = 1.5393E+07 3.1768E+13 4.1993E-20 COLL.MASS.DIS.SIL = 0.7791 0.2498 SUM = 1.0289 SHOULD BE = 1.0288 PERCENT DIF. = 0.0112 NUMBER OF PARTICLES IN EACH CLASS 2.13613E+16 2.67016E+15 1.03898E+00 1.97502E+15 5.52995E+15 1.05451E+16 6.16211E+16 7.68094E+16 9.34892E+17 3.35601E+17 3.67856E+17 3.75762E+17 1.74405E+17 1.99270E+17 3.24590E+17 4.45454E+17 2.78228E+17 2.91117E+17 3.24590E+17 4.45454E+17 1.74403E+17 4.71831E+17 4.9283E+17 4.93561E+17 3.67856E+17 3.75762E+17 4.06495E+17 4.0420E+17 4.9283E+17 4.45454E+17 2.78228E+17 2.91117E+17 3.24590E+17 3.35601E+17 3.67856E+17 3.75762E+17 4.80569E+17 4.71831E+17 4.9283E+17 4.45454E+17 2.78228E+17 2.91117E+17 4.9283E+17 4.45454E+17 2.78228E+17 2.91117E+17 4.9283E+17 4.34372E+17 5.01336E+17 4.87881E+17 5.01659E+17 4.60492E+17 4.9265E+17 4.94372E+17 5.01336E+17 4.87881E+17 4.80569E+17 4.60492E+17 4.9264E+17 4.3655E+17 4.44294E+17 4.25646E+17 4.26816E+17 4.6093E+17 4.9208E+17 3.88821E+17 5.40538E+17 4.60492E+17 4.63242E+16 3.31277E+16 5.47388E+17 4.61058E+17 4.9208E+17 3.54892E+17 3.54809E+17 3.27346E+17 2.79588E+17 4.61058E+17 4.60492E+17 4.6324E+17 3.84872E+17 5.48388E+15 4.61058E+17 4.6049E+17 4.25465E+17 4.45548E+17 3.88672E+17 4.26408E+17 4.63242E+16 3.31277E+16 5.473</pre> | C:\Users\joack\Desktop\silnucprogram\Debug\nucsil.exe | |
|---|--|-------------|
| SALT MOLALITY,SOL.CORR.FACTOR = 3.0508E-01 1.0102 SOD. ACT. = 2.1861E-01 PHN.PPH.FINT = 8.6659 3.6012 0.4585 GAMZ.GAMMA = 48.28 16.93 DQS = 6.840E+14 AKIN.DKIN = 2.182 1.000 TOTF.ALPF = 1.017E-03 1.0000 RKF1.RKF2 = 1.322E+01 1.303E+01 RATEKF.RATEKT = 1.32SE-02 2.843E-11 PKW.PKSIL.PKF = 13.501 9.603 3.311 GSIL.GF.GNA = 0.6798 0.7475 0.7166 EPSD.DENS = 72.72 0.9917 ADH.BDH = 0.5256 0.3312 CSILS.ALPSIL.CSI = 0.1568 0.0509 0.0127 SRA.SRR = 1.5119 1.5272 RATEK.RDEPF = 1.0276E-10 2.8022E-10 FKINL = 3.5225E-008 RNUC.ANNUC = 8.318E-08 5.338E+01 ZLD.CN = 2.051E-02 7.075E-01 QLP.QT = 3.340E+25 4.121E+20 RANUC = 5.991E+18 TAUC = 8.397E+02 NCLC = 94 TOTAL NO.AREA = 1.8554E+19 5.8941E+06 AUER.RAD.AREA,MASS = 1.5393E-07 3.1768E-13 4.1993E-20 COLL.MASS.DIS.SIL. = 0.7791 0.2498 SUM = 1.0289 SHOULD BE = 1.0238 PERCENT DIF. = 0.0112 NUMBER OF PARTICLES IN EACH CLASS 2.13613E+16 2.67016E+15 1.03998E+00 1.97502E+15 5.52995E+15 1.05451E+16 1.71446E+16 2.54227E+16 3.54397E+16 5.07675E+16 6.16211E+16 7.68094E+16 9.38862E+16 1.18345E+17 1.32281E+17 1.59677E+17 1.74805E+17 1.04655E+17 4.4536E+17 4.4345E+17 2.78228E+17 2.91117E+17 3.24590E+17 3.3601E+17 3.67856E+17 3.75762E+17 4.06495E+17 4.0655E+17 4.4536E+17 4.4345E+17 4.06495E+17 4.7081E+17 4.9283E+17 4.4345E+17 4.06495E+17 4.7081E+17 4.9283E+17 4.4345E+17 3.67856E+17 4.25646E+17 4.74433E+17 4.71831E+17 4.9283E+17 4.4345E+17 3.58672E+17 4.6655E+17 4.9283E+17 4.4345E+17 3.58821E+17 4.80569E+17 4.60892E+17 4.6344E+17 4.4365E+17 3.54809E+17 4.25646E+17 3.78762E+17 3.7446E+17 3.78929E+17 3.54809E+17 4.6085E+17 1.92290E+17 3.5493E+17 3.54809E+17 4.60892E+17 4.6354E+17 3.54809E+17 3.7446E+17 3.72946E+17 3.54809E+17 4.6085E+17 4.7183E+17 3.54809E+17 4.6085E+17 4.72183E+17 3.54809E+17 4.6085E+17 4.72183E+17 3.54809E+17 4.61940E+17 3.78929E+17 3.54809E+17 4.61940E+17 3.78929E+17 3.5483E+16 4.61950E+17 3.78929E+17 3.5483E+16 4.61950E+17 3.78935E+17 3.5483E+16 4.61950E+17 3.78935E+17 3.5483E+16 4.61950E+15 3.88821E+17 3.5483E+16 4.61950E+15 3.88821E+17 | KSTEP = 172 TSPEC,TEMP,PH = 4.9468E+01 41.31 8.17 FLASH,GLASH = 0.4100 0.0000E+00 CSIL = 0.2498 FLC = 1.6949 | _ |
| GAMZ,GAMMA = 48.28 16.93 DQS = 6.840E+14 AKIN,DKIN = 2.182 1.000 TOTF,ALPF = 1.017E-03 1.0000 RKF1,RKF2 = 1.322E+01 1.303E+01 RATEKF,RATEKT = 1.325E-02 2.843E-11 PKW,PKSIL,PKF = 13.501 9.603 3.311 GSIL,GF,GNA = 0.6798 0.7475 0.7166 EPSD,DENS = 72.72 0.9917 ADH,BDH = 0.5256 0.3312 CSILS,ALPSIL,CSI = 0.1568 0.0509 0.0127 SRA,SRR = 1.5119 1.5272 RATEK,RDEPF = 1.0276E-10 2.8022E-10 FKINL = 3.5225E-08 RNUC,ANNUC = 8.318E-08 5.338E+01 ZLD,CN = 2.051E-02 7.075E-01 QLP,QT = 3.340E+25 4.121E+20 RANUC = 5.981E+18 TAUC = 8.397E+02 NCLC = 94 TOTAL NO.AREA = 1.8554E+19 5.8941E+06 AUER.RAD.AREA,MASS = 1.5393E-07 3.1768E-13 4.1993E-20 COLL.MASS,DIS.SIL. = 0.7791 0.2498 SUM = 1.0289 SHOULD BE = 1.0288 FERCENT DIF. = 0.0112 NUMBER OF PARTICLES IN EACH CLASS 2.13613E+16 2.67016E+15 1.03898E+00 1.97502E+15 5.52995E+15 1.05451E+16 6.16211E+16 7.68094E+16 9.3862E+16 1.18345E+17 1.32281E+17 1.59677E+17 1.74005E+17 1.99270E+17 2.32103E+17 2.44954E+17 2.78228E+17 2.91117E+17 3.24590E+17 2.3501E+17 3.67856E+17 3.75762E+17 4.06495E+17 4.16655E+17 4.4556E+17 4.49174E+17 4.06495E+17 4.16655E+17 4.4556E+17 4.49174E+17 4.80569E+17 4.64092E+17 4.9235E+17 4.84373E+17 5.01336E+17 4.87881E+17 5.01336E+17 4.71831E+17 4.9235E+17 4.3655E+17 4.46294E+17 4.25646E+17 4.26616E+17 4.07091E+17 4.29235E+17 4.84373E+17 5.01336E+17 4.25646E+17 4.80569E+17 4.60492E+17 4.9235E+17 8.64035E+17 3.54809E+17 3.27346E+17 4.80569E+17 4.60492E+17 4.92235E+17 4.5455E+17 4.80569E+17 4.60492E+17 4.92235E+17 4.5455E+17 4.80569E+17 4.60492E+17 4.92235E+17 3.54958E+17 3.7956E+17 4.60492E+17 4.92235E+17 4.5455E+17 4.80569E+17 4.60492E+17 4.92235E+17 4.5455E+17 4.80569E+17 4.60492E+17 4.92235E+16 7.31272E+16 3.7956E+17 4.60492E+17 4.9229E+17 3.54958E+17 3.27346E+17 4.2646E+17 4.07091E+17 4.9225E+14 5.312872F+16 3.72564E+17 4.61955E+17 4.9239E+17 5.27361E+16 3.72556E+16 4.56232E+16 5.28459E+17 3.54895E+16 7.41142E+16 6.27744E+16 3.72556E+16 4.56232E+16 3.9835E+15 3.28179E+15 2.76453E+15 2.32958E+15 3.76538E+15 3.28179E+15 3.8856E+15 3.2817 | SALT MOLALITY,SOL.CORR.FACTOR = 3.0508E-01 1.0102 SOD. ACT. = PHN,FPH,FINT = 8.6659 3.6012 0.4585 | 2.1861E-01 |
| TOTF,ALPF = 1.017E-03 1.0000 RKF1,RKF2 = 1.322E+01 1.303E+01 RATEKF,RATEKT = 1.325E-02 2.843E-11 PKW,PKSIL,PKF = 13.501 9.603 3.311 GSIL,GF,GNA = 0.6798 0.7475 0.7166 EPSD,DENS = 72.72 0.9917 ADH,BDH = 0.5256 0.3312 CSILS,ALPSIL,CSI = 0.1568 0.0509 0.0127 SRASRR = 1.5119 1.5272 RATEK,RDEPF = 1.0276E-10 2.8022E-10 FKINL = 3.5225E-08 RNUC,ANNUC = 8.318E-08 5.338E+01 ZLD,CN = 2.051E-02 7.075E-01 QLP,QT = 3.340E+25 4.121E+20 RANUC = 5.981E+18 TAUC = 8.397E+02 NCLC = 94 TOTAL NO.,AREA = 1.8554E+19 5.8941E+06 AUER.RAD.,AREA,MASS = 1.5393E-07 3.1768E-13 4.1993E-20 COLL.MASS,DIS.SIL. = 0.7791 0.2498 SUM = 1.0289 SHOULD BE = 1.0288 PERCENT DIF. = 0.0112 NUMBER OF PARTICLES IN EACH CLASS 2.13613E+16 2.67016E+15 1.03898E+00 1.97502E+15 5.52995E+15 1.05451E+16 6.16211E+16 7.68094E+16 9.38662E+16 1.18345E+17 1.32281E+17 1.59677E+17 1.74005E+17 1.99270E+17 2.32103E+17 2.34954E+17 2.7822E+17 2.91117E+17 3.24590E+17 3.35011E+17 3.67856E+17 3.75762E+17 4.06495E+17 4.16555E+17 4.45566E+17 4.49174E+17 4.06495E+17 4.71831E+17 4.92835E+17 4.8473E+17 4.80569E+17 4.60492E+17 4.92835E+17 4.84378E+17 4.80569E+17 4.60492E+17 4.92835E+17 4.84378E+17 4.80569E+17 4.60492E+17 4.92835E+17 4.35455E+17 4.26416E+17 4.07091E+17 3.70929E+17 3.54958E+17 3.88677E+17 3.71466E+17 4.92835E+17 4.3655E+17 4.26435E+17 4.60492E+17 4.92835E+17 4.80569E+17 4.60492E+17 4.52666E+17 4.74133E+17 4.80569E+17 4.60492E+17 4.6434E+17 4.80569E+17 4.60492E+17 4.5264E+17 3.88677E+17 3.71466E+17 3.70929E+17 3.80677E+17 3.7246E+17 3.7950E+17 1.9775FE+17 1.511E+16 3.7250E+17 3.7246E+17 3.7950E+17 3.7446E+17 3.70929E+17 3.54958E+17 3.54809E+17 3.27346E+17 3.79538E+17 2.309785E+17 4.5232E+16 3.90725E+17 1.65118E+16 3.7250E+16 4.5232E+16 3.90725E+17 3.54958E+17 3.74465E+17 3.72454E+16 3.7250E+16 4.5232E+16 3.90725E+15 5.45388E+15 3.28179E+15 3.725388E+15 4.61050E+15 3.28179E+15 3.725388E+15 4.61050E+15 3.28179E+15 3.72538E+15 4.61050E+15 3.28179E+15 3.72538E+15 4.61050E+15 3.28179E+15 3.725388E+15 4.61050E+15 3.28179E+15 3.7253 | GAMZ,GAMMA = 48.28 16.93 DQS = 6.840E+14 AKIN,DKIN = 2.182 1.00 | 0 |
| PKW, PKSIL, PKF = 13.501 9.603 3.311 GSIL, GF, GNA = 0.6798 0.7475 0.7166 EPSD, DENS = 72.72 0.9917 ADH, BDH = 0.5256 0.3312 CSILS, ALPSIL, CSI = 0.1568 0.0509 0.0127 SRA, SRR = 1.5119 1.5272 RATEK, RDEPF = 1.0276E-10 2.8022E-10 FKINL = 3.5225E-08 RNUC, ANNUC = 8.318E-08 5.338E+01 ZLD, CN = 2.051E-02 7.075E-01 QLP,QT = 3.340E+25 4.121E+20 RANUC = 5.981E+18 TAUC = 8.397E+02 NCLC = 94 TOTAL NO., AREA = 1.8554E+19 5.8941E+06 AUER. RAD., AREA, MASS = 1.5393E-07 3.1768E-13 4.1993E-20 COLL.MASS, DIS, SIL = 0.7791 0.2498 SUM = 1.0289 SHOULD BE = 1.0288 PERCENT DIF. = 0.0112 NUMBER OF PARTICLES IN EACH CLASS 2.13613E+16 2.67016E+15 1.03898E+00 1.97502E+15 5.52995E+15 1.05451E+16 6.16211E+16 7.68094E+16 9.38662E+16 1.18345E+17 1.32281E+17 1.59677E+17 1.74805E+17 1.99270E+17 2.32183E+17 2.44954E+17 3.67856E+17 3.75762E+17 4.06495E+17 4.16655E+17 4.49174E+17 4.74433E+17 4.71831E+17 4.92835E+17 4.49174E+17 4.74433E+17 4.71831E+17 4.92835E+17 4.484373E+17 5.01336E+17 4.87881E+17 5.01559E+17 4.60492E+17 4.92254E+17 3.58821E+17 3.54809E+17 3.27346E+17 3.88657E+17 3.7480E+17 3.7480E+17 3.7592E+17 3.54809E+17 3.54809E+17 3.27346E+17 2.79588E+17 4.07091E+17 4.07254E+17 3.67856E+17 3.5742E+17 4.46294E+17 4.07091E+17 4.07254E+17 3.54802E+17 4.48137E+17 4.46294E+17 4.07091E+17 4.07254E+17 3.54805E+17 4.49124E+17 4.88659E+17 4.16452E+16 3.90322E+16 3.31277E+16 5.79588E+17 2.30785E+17 1.97759E+17 1.65118E+17 3.54809E+17 3.24590E+17 3.54805E+16 7.41142E+16 6.27744E+16 5.79588E+15 4.61050E+15 3.88856E+15 3.28177E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 3.88856E+15 3.28177E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 3.88856E+15 3.28177E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 1.38786E+15 3.28179E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 1.38786E+15 3.28179E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 3.88856E+15 3.28179E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 1.38786E+15 3.28179E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 3.88856E+15 3.28179E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 3.88856E+15 3.28179E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 3.88856E+15 3.28179E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 3.88856E+15 3.28179E+15 5.45388E+15 4 | TOTF,ALPF = 1.017E-03 1.0000 RKF1,RKF2 = 1.322E+01 1.303E+01 RATEKF,RATEKT = 1.325E-02 2.843E-11 | |
| CSILS.ALPSIL.CSI = 0.1568 0.0509 0.0127 SRA.SRR = 1.5119 1.5272 RATEK.RDEPF = 1.0276E-10 2.8022E-10 FKINL = 3.5225E-08 RNUC.ANNUC = 8.318E-08 5.338E+01 ZLD.CN = 2.051E-02 7.075E-01 QLP.QT = 3.340E+25 4.121E+20 RANUC = 5.981E+18 TAUC = 8.397E+02 NCLC = 94 TOTAL NO.AREA = 1.8554E+19 5.8941E+06 AUER.RAD.AREA.MASS = 1.5393E-07 3.1768E-13 4.1993E-20 COLL.MASS.DIS.SIL. = 0.7791 0.2498 SUM = 1.0289 SHOULD BE = 1.0288 PERCENT DIF. = 0.0112 NUMBER OF PARTICLES IN EACH CLASS 2.13613E+16 2.67016E+15 1.03898E+00 1.97502E+15 5.52995E+15 1.05451E+16 6.16211E+16 7.68094E+16 9.38862E+16 1.18345E+17 1.32281E+17 1.59677E+17 1.74805E+17 1.99270E+17 2.32103E+17 2.44954E+17 3.67856E+17 3.75762E+17 4.06495E+17 4.16655E+17 4.45566E+17 4.49174E+17 4.74433E+17 4.71811E+17 4.92835E+17 4.49174E+17 4.74433E+17 4.71811E+17 4.92845E+17 4.46378E+17 5.01336E+17 4.87881E+17 5.01036E+17 4.60492E+17 4.63444E+17 4.43655E+17 4.46294E+17 3.27346E+17 4.26816E+17 4.07091E+17 3.70929E+17 3.54590E+17 3.54809E+17 3.27346E+17 2.792588E+17 2.30785E+17 1.97759E+17 1.65118E+17 4.26816E+17 4.07091E+17 4.07254E+17 3.68821E+17 2.79486E+17 1.9175E+17 1.092290E+17 3.54809E+17 3.54809E+17 3.27346E+17 2.79588E+17 2.30785E+17 1.97759E+17 1.59578E+16 5.37850E+16 4.56232E+16 3.90322E+16 3.31277E+16 2.82942E+16 2.40113E+16 2.04697E+16 1.73611E+16 1.47722E+16 1.25171E+16 1.06249E+15 1.65034E+15 3.88856E+15 3.28179E+15 5.7643E+15 1.65034E+15 1.38786E+15 1.16724E+15 5.76453E+15 2.32958E+15 1.96044E+15 1.65034E+15 1.38786E+15 1.16724E+15 5.76453E+15 2.32958E+15 5.76054E+15 1.65034E+15 1.38786E+15 1.16724E+15 5.76453E+15 2.32958E+15 5.76054E+15 1.65034E+15 1.38786E+15 1.16724E+15 5.76453E+15 2.32958E+15 | PKW,PKSIL,PKF = 13.501 9.603 3.311 GSIL,GF,GNA = 0.6798 0.7475 0 EPSD,DENS = 72.72 0.9917 ADH,BDH = 0.5256 0.3312 | .7166 |
| RNUC, ANNUC = 8.318E-08 5.338E+01 ZLD, CN = 2.051E-02 7.075E-01 QLP,QT = 3.340E+25 4.121E+20 RANUC = 5.981E+18 TAUC = 8.397E+02 NCLC = 94 TOTAL NO., AREA = 1.8554E+19 5.8941E+06 AVER.RAD., AREA, MASS = 1.5393E-07 3.1768E-13 4.1993E-20 COLL.MASS, DIS.SIL. = 0.7791 0.2498 SUM = 1.0289 SHOULD BE = 1.0288 PERCENT DIF. = 0.0112 NUMBER OF PARTICLES IN EACH CLASS 2.13613E+16 2.67016E+15 1.03898E+00 1.97502E+15 5.52995E+15 1.05451E+16 1.71446E+16 2.54227E+16 3.54397E+16 5.07675E+16 6.16211E+16 7.68094E+16 9.38862E+16 1.18345E+17 1.32281E+17 1.59677E+17 1.74805E+17 1.99270E+17 2.32103E+17 2.44954E+17 2.78228E+17 2.91117E+17 3.24590E+17 3.35011E+17 3.67856E+17 3.75762E+17 4.06495E+17 4.16655E+17 4.45566E+17 4.49174E+17 4.06495E+17 4.16655E+17 4.07254E+17 4.84373E+17 5.01336E+17 4.87881E+17 5.01059E+17 4.07091E+17 4.07254E+17 3.548821E+17 3.88677E+17 3.71486E+17 3.70929E+17 3.54958E+17 3.54809E+17 3.27346E+17 2.79588E+17 2.30785E+17 1.97759E+17 1.65118E+17 3.54809E+17 4.10659E+17 1.02290E+17 8.64035E+16 7.41142E+16 6.27744E+16 5.37850E+16 4.56232E+16 3.90322E+16 3.31277E+16 1.47722E+16 1.25171E+16 1.06299E+16 8.99705E+15 3.80856E+15 3.28179E+15 2.76453E+15 2.32958E+15 1.96044E+15 1.65034E+15 1.38786E+15 3.28179E+15 2.76453E+15 2.32958E+15 2.32958E+15 3.28179E+15 3.276453E+15 2.32958E+15 2.32958E+15 3.28179E+16 | CSILS,ALPSIL,CSI = 0.1568 0.0509 0.0127 SRA,SRR = 1.5119 1.5272 RATEK,RDEPF = 1.0276E-10 2.8022E-10 FKINL = 3.5225E-08 | |
| NCLC = 94 TOTAL NO., AREA = 1.8554E+19 5.8941E+06 AVER.RAD., AREA, MASS = 1.5393E-07 3.1768E-13 4.1993E-20 COLL.MASS.DIS.SIL. = 0.7791 0.2498 SUM = 1.0289 SHOULD BE = 1.0288 PERCENT DIF. = 0.0112 NUMBER OF PARTICLES IN EACH CLASS 2.13613E+16 2.67016E+15 1.03898E+00 1.97502E+15 5.52995E+15 1.05451E+16 6.16211E+16 7.68094E+16 9.38862E+16 1.18345E+17 1.32281E+17 1.59677E+17 1.74805E+17 1.99270E+17 2.32103E+17 2.44954E+17 2.78228E+17 2.91117E+17 3.24590E+17 3.35011E+17 3.67856E+17 3.75762E+17 4.06495E+17 4.16655E+17 4.49283E+17 4.84373E+17 5.01336E+17 4.87881E+17 5.01059E+17 4.60492E+17 4.09284E+17 4.74183E+17 4.26816E+17 4.07091E+17 4.09254E+17 3.88821E+17 5.01059E+17 4.60492E+17 4.63344E+17 4.43655E+17 4.46294E+17 4.25646E+17 4.26816E+17 4.07091E+17 4.09254E+17 3.88821E+17 3.88677E+17 3.71486E+17 1.97759E+17 1.65118E+17 1.41716E+17 1.19175E+17 1.02290E+17 8.64035E+16 7.41142E+16 6.27744E+16 5.37850E+16 2.50232E+16 3.90322E+16 3.31277E+16 2.82942E+16 2.40113E+16 2.04697E+16 1.73611E+16 1.47722E+16 1.25171E+16 1.06299E+16 8.99705E+15 7.62620E+15 6.46177E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 3.88856E+15 3.28179E+15 2.76453E+15 2.32958E+15 1.96044E+15 1.65034E+15 1.38786E+15 1.16724E+15 9.80826E+14 8.24141E+14 6.91945E+14 5.808866E+14 | RNUC,ANNUC = 8.318E-08 5.338E+01 ZLD,CN = 2.051E-02 7.075E-01 QLP,QT = 3.340E+25 4.121E+20 RANUC = 5.981E+18 TAUC = 8.397E+02 | |
| COLL.MASS,DIS.SIL. = 0.7791 0.2498 SUM = 1.0289 SHOULD BE = 1.0288 PERCENT DIF. = 0.0112 NUMBER OF PARTICLES IN EACH CLASS 2.13613E+16 2.67016E+15 1.03898E+00 1.97502E+15 5.52995E+15 1.05451E+16 6.16211E+16 7.68094E+16 9.38862E+16 1.18345E+17 1.32281E+17 1.59677E+17 1.74805E+17 1.99270E+17 2.32103E+17 2.44954E+17 2.78228E+17 2.91117E+17 3.24590E+17 3.35011E+17 3.67856E+17 3.75762E+17 4.06495E+17 4.16655E+17 4.4556E+17 4.84373E+17 5.01336E+17 4.87881E+17 5.01059E+17 4.84200E+17 4.92835E+17 4.84373E+17 5.01336E+17 4.87881E+17 4.80569E+17 4.60492E+17 4.64344E+17 4.43655E+17 4.46294E+17 4.25646E+17 4.80569E+17 3.71486E+17 3.70929E+17 3.84958E+17 3.54809E+17 3.27346E+17 2.79588E+17 2.30785E+17 1.97759E+17 1.65118E+17 1.41716E+17 1.19175E+17 1.02290E+17 8.64035E+16 7.41142E+16 6.27744E+16 5.37850E+16 4.56232E+16 3.90322E+16 3.31277E+16 2.82942E+16 2.40113E+16 2.04697E+15 6.46177E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 3.88856E+15 1.16724E+15 9.80826E+14 8.24141E+14 6.91945E+14 5.80866E+14 | NCLC = 94 TOTAL NO.,AREA = 1.8554E+19 5.8941E+06 AVER.RAD.,AREA,MASS = 1.5393E-07 3.1768E-13 4.1993E-20 | |
| NUMBER OF PARTICLES IN EACH CLASS2.13613E+162.67016E+151.03898E+001.97502E+155.52995E+151.05451E+161.71446E+162.54227E+163.54397E+165.07675E+161.32281E+171.59677E+171.74805E+171.99270E+172.32103E+172.44954E+171.32281E+171.59677E+172.78228E+172.91117E+173.24590E+173.35011E+173.67856E+173.75762E+174.06495E+174.16655E+174.45566E+174.49174E+173.67856E+174.87881E+175.01059E+174.6655E+174.92835E+174.84373E+175.01336E+174.87881E+175.01059E+174.60492E+174.07254E+173.88821E+174.46294E+174.25646E+174.80569E+174.07091E+173.70929E+173.54855E+173.27346E+173.88677E+173.71486E+173.70929E+178.64035E+167.41142E+166.27744E+165.37850E+164.56322E+163.90322E+163.31277E+167.41142E+166.27744E+165.37850E+164.56328E+157.62620E+156.46177E+152.76453E+152.32958E+155.45388E+154.61050E+153.8865E+153.28179E+152.76453E+152.32958E+151.96044E+151.65034E+151.38786E+151.6724E+152.76453E+152.32958E+151.96044E+151.65034E+151.38786E+153.28179E+152.76453E+152.32958E+151.96044E+151.65034E+151.38786E+153.28179E+152.76453E+152.32958E+151.96044E+151.65034E+151.88786E+153.28179 | COLL.MASS,DIS.SIL. = 0.7791 0.2498 SUM = 1.0289 SHOULD BE = 1.0288 PERCENT DIF. = 0.0112 | |
| $\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | NUMBER OF PARTICLES IN EACH CLASS | |
| $\begin{array}{c} 1.71740E110 & 2.31221E10 & 3.3137161E10 & 3.3137161E10 & 3.313717161E10 & 3.313717161E10 & 3.3127121717161E110 & 3.313717161E10 & 3.313717161E10 & 3.31281E117 & 1.59677E+17 \\ 1.74805E+17 & 1.99270E+17 & 2.32103E+17 & 2.44954E+17 & 3.67856E+17 & 3.75762E+17 \\ 2.78228E+17 & 2.91117E+17 & 3.24590E+17 & 3.35011E+17 & 3.67856E+17 & 3.75762E+17 \\ 4.06495E+17 & 4.16655E+17 & 4.45566E+17 & 4.49174E+17 & 3.67856E+17 & 3.75762E+17 \\ 4.74433E+17 & 4.71831E+17 & 4.92835E+17 & 4.84373E+17 & 5.01336E+17 & 4.87881E+17 \\ 5.01059E+17 & 4.84200E+17 & 4.92835E+17 & 4.84373E+17 & 5.01336E+17 & 4.87881E+17 \\ 4.80569E+17 & 4.60492E+17 & 4.64344E+17 & 4.43655E+17 & 4.46294E+17 & 4.25646E+17 \\ 4.26816E+17 & 4.07091E+17 & 4.07254E+17 & 3.88821E+17 \\ 3.88677E+17 & 3.71486E+17 & 3.70929E+17 & 3.54958E+17 & 3.54809E+17 & 3.27346E+17 \\ 2.79588E+17 & 2.30785E+17 & 1.97759E+17 & 1.65118E+17 \\ 1.41716E+17 & 1.19175E+17 & 1.02290E+17 & 8.64035E+16 & 7.41142E+16 & 6.27744E+16 \\ 5.37850E+16 & 4.56232E+16 & 3.90322E+16 & 3.31277E+16 \\ 2.82942E+16 & 2.40113E+16 & 2.04697E+16 & 1.73611E+16 & 1.47722E+16 & 1.25171E+16 \\ 1.06299E+16 & 8.99705E+15 & 7.62620E+15 & 6.46177E+15 \\ 5.45388E+15 & 4.61050E+15 & 3.88856E+15 & 3.28179E+15 & 2.76453E+15 & 2.32958E+15 \\ 1.96044E+15 & 1.65034E+15 & 1.38786E+15 & 1.6724E+15 & 2.76453E+15 & 2.32958E+15 \\ 1.96044E+14 & 8.24141E+14 & 6.91945E+14 & 5.80866E+14 \end{array}$ | 2.13613E+16 2.67016E+15 1.03898E+00 1.97502E+15 5.52995E+15 1 71446E+16 2 54227E+16 3 54297E+16 5 07675E+16 | 1.05451E+16 |
| 1.746035+17 1.77270E+17 2.32103E+17 2.34733E+17 3.67856E+17 3.75762E+17 2.78228E+17 2.91117E+17 3.24590E+17 3.35011E+17 3.67856E+17 3.75762E+17 4.06495E+17 4.16655E+17 4.49566E+17 4.49174E+17 3.67856E+17 4.87881E+17 5.01059E+17 4.84200E+17 4.92835E+17 4.84373E+17 5.01336E+17 4.87881E+17 5.01059E+17 4.864920E+17 4.92835E+17 4.84373E+17 5.01336E+17 4.87881E+17 4.80569E+17 4.804920E+17 4.92835E+17 4.43655E+17 4.46294E+17 4.25646E+17 4.26816E+17 4.07091E+17 4.07254E+17 3.88821E+17 3.54809E+17 3.27346E+17 3.88677E+17 3.71486E+17 3.70929E+17 3.54958E+17 3.54809E+17 3.27346E+17 2.79588E+17 2.307850E+16 1.97759E+17 1.65118E+17 3.54809E+17 3.27346E+17 1.41716E+17 1.19175E+17 1.02290E+17 8.64035E+16 7.41142E+16 6.27744E+16 5.37850E+16 4.56232E+16 3.90322E+16 3.31277E+16 1.47722E+16 1.25171E+16 1.66293E+16 | 6.16211E+16 7.68094E+16 9.38862E+16 1.18345E+17 1.32281E+17 | 1.59677E+17 |
| 4.746375E+17 4.16053E+17 4.93560E+17 4.947174E+17 4.74433E+17 4.71831E+17 4.92835E+17 4.84373E+17 5.01336E+17 4.87881E+17 5.01059E+17 4.84200E+17 4.92835E+17 4.84373E+17 5.01336E+17 4.87881E+17 4.80569E+17 4.60492E+17 4.64344E+17 4.43655E+17 4.46294E+17 4.25646E+17 4.26816E+17 4.07091E+17 4.07254E+17 3.88821E+17 3.54809E+17 3.27346E+17 3.88677E+17 3.71486E+17 3.70929E+17 3.54958E+17 3.54809E+17 3.27346E+17 2.79588E+17 2.30785E+17 1.02290E+17 8.64035E+16 7.41142E+16 6.27744E+16 5.37850E+16 4.56232E+16 3.90322E+16 3.31277E+16 7.41142E+16 6.27744E+16 2.82942E+16 2.40113E+16 2.04697E+16 1.73611E+16 1.47722E+16 1.25171E+16 1.06299E+16 8.99705E+15 7.62620E+15 3.28179E+15 2.76453E+15 2.32958E+15 1.96044E+15 1.65034E+15 1.38786E+15 3.28179E+15 2.76453E+15 2.32958E+15 1.96044E+15 1.65034E+15 1.38786E+15 | 2.78228E+17 2.91117E+17 3.24590E+17 3.35911E+17 3.67856E+17 | 3.75762E+17 |
| 5.01059E+17 4.84200E+17 4.93264E+17 4.74183E+17 4.80569E+17 4.60492E+17 4.64344E+17 4.74183E+17 4.26816E+17 4.07091E+17 4.07254E+17 3.88821E+17 3.88677E+17 3.71486E+17 3.70929E+17 3.54958E+17 3.54809E+17 3.27346E+17 2.79588E+17 2.30785E+17 1.97759E+17 1.65118E+17 1.41716E+17 1.19175E+17 1.02290E+17 8.64035E+16 7.41142E+16 6.27744E+16 5.37850E+16 4.56232E+16 3.90322E+16 3.31277E+16 2.82942E+16 2.40113E+16 2.04697E+16 1.73611E+16 1.47722E+16 1.25171E+16 1.06299E+16 8.99705E+15 7.62620E+15 6.46177E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 3.88856E+15 3.28179E+15 2.76453E+15 2.32958E+15 1.96044E+15 1.65034E+15 1.38786E+15 1.16724E+15 9.80826E+14 8.24141E+14 6.91945E+14 5.808866E+14 | 4.74433E+17 4.71831E+17 4.92835E+17 4.84373E+17 5.01336E+17 | 4.87881E+17 |
| 4.26816E+17 4.07091E+17 4.07254E+17 3.88821E+17 3.88677E+17 3.71486E+17 3.70929E+17 3.54958E+17 3.54809E+17 3.27346E+17 2.79588E+17 2.30785E+17 1.97759E+17 1.65118E+17 1.41716E+17 1.19175E+17 1.02290E+17 8.64035E+16 7.41142E+16 6.27744E+16 5.37850E+16 4.56232E+16 3.90322E+16 3.31277E+16 2.82942E+16 2.40113E+16 2.04697E+16 1.73611E+16 1.47722E+16 1.25171E+16 1.06299E+16 8.99705E+15 7.62620E+15 6.46177E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 3.88856E+15 3.28179E+15 2.76453E+15 2.32958E+15 1.96044E+15 1.65034E+15 1.38786E+15 1.16724E+15 9.80826E+14 8.24141E+14 6.91945E+14 5.80866E+14 | 5.01059E+17 4.84200E+17 4.93264E+17 4.74183E+17 4.80569E+17 4.60492E+17 4.64344E+17 4.43655E+17 4.46294E+17 | 4.25646E+17 |
| 2.79588E+17 2.30785E+17 1.97759E+17 1.65118E+17 1.41716E+17 1.19175E+17 1.02290E+17 8.64035E+16 7.41142E+16 6.27744E+16 5.37850E+16 4.56232E+16 3.90322E+16 3.31277E+16 2.82942E+16 2.40113E+16 2.04697E+16 1.73611E+16 1.47722E+16 1.25171E+16 1.06299E+16 8.99705E+15 7.62620E+15 6.46177E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 3.88856E+15 3.28179E+15 2.76453E+15 2.32958E+15 1.96044E+15 1.65034E+15 1.38786E+15 1.16724E+15 9.80826E+14 8.24141E+14 6.91945E+14 5.80866E+14 | 4.26816E+17 4.07091E+17 4.07254E+17 3.88821E+17 3.88677E+17 3.71486E+17 3.70929E+17 3.54958E+17 3.54809E+17 | 3.27346E+17 |
| 5.37850E+16 4.56232E+16 3.90322E+16 3.31277E+16 2.82942E+16 2.40113E+16 2.04697E+16 1.73611E+16 1.47722E+16 1.25171E+16 1.06299E+16 8.99705E+15 7.62620E+15 6.46177E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 3.88856E+15 3.28179E+15 2.76453E+15 2.32958E+15 1.96044E+15 1.65034E+15 1.38786E+15 1.16724E+15 9.80826E+14 8.24141E+14 6.91945E+14 5.80866E+14 | 2.79588E+17 2.30785E+17 1.97759E+17 1.65118E+17 1.41716E+17 1.19175E+17 1.02290E+17 8.64035E+16 7.41142E+16 | 6.27744E+16 |
| 1.06299E+16 8.99705E+15 7.62620E+15 6.46177E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 3.88856E+15 3.28179E+15 2.76453E+15 2.32958E+15 1.96044E+15 1.65034E+15 1.38786E+15 1.16724E+15 9.80826E+14 8.24141E+14 6.91945E+14 5.80866E+14 | 5.37850E+16 4.56232E+16 3.90322E+16 3.31277E+16 2.82942E+16 2.40113E+16 2.04697E+16 1.73611E+16 1.47722E+16 | 1.25171E+16 |
| 1.96044E+15 1.65034E+15 1.38786E+15 1.16724E+15 9.80826E+14 8.24141E+14 6.91945E+14 5.80866E+14 | 1.06299E+16 8.99705E+15 7.62620E+15 6.46177E+15 5.45388E+15 4.61050E+15 3.88856E+15 3.28179E+ <u>15 2.76453E+15</u> | 2.32958E+15 |
| | 1.96044E+15 1.65034E+15 1.38786E+15 1.16724E+15 9.80826E+14 8.24141E+14 6.91945E+14 5.80866E+14 | |

| PARTICLE RADII | | |
|--|-------------|-------------|
| 5.34622E-07 8.84621E-07 2.78814E-07 2.71907E-07 | 2.67785E-07 | 2.60980E-07 |
| 2.45762E-07 2.42369E-07 2.39030E-07 2.38547E-07 2.45762E-07 2.42369E-07 2.39030E-07 2.38547E-07 | 2.35334E-07 | 2.34929E-07 |
| 2.25142E-07 2.20716E-07 2.20373E-07 2.23434E-07 2.25142E-07 1.97497E-07 1.97227E-07 1.88664E-07 | 1.88424E-07 | 1.81555E-07 |
| 1.81344E-07 1.73737E-07 1.73754E-07 1.68745E-07 1.68587E-07 1.62447E-07 1.62314E-07 1.57377E-07 | 1.57266E-07 | 1.52074E-07 |
| 1.51982E-07 1.47944E-07 1.47013E-07 1.42682E-07 1.42682E-07 1.39376E-07 1.39328E-07 1.34574E-07 | 1.34533E-07 | 1.27704E-07 |
| 1.20316E-07 1.24000E-07 1.23972E-07 1.20342E-07 1.20316E-07 1.16568E-07 1.16543E-07 1.12967E-07 | 1.12940E-07 | 1.10164E-07 |
| 1.09320E-07 1.09341E-07 1.10146E-07 1.08200E-07 1.09320E-07 1.07661E-07 1.08198E-07 1.05831E-07 | 1.07693E-07 | 1.05365E-07 |
| 1.05904E-07 1.04943E-07 1.05483E-07 1.03826E-07 1.05111E-07 1.03500E-07 1.04046E-07 1.03112E-07 | 1.03771E-07 | 1.02885E-07 |
| 1.03546E-07 1.02707E-07 1.00699E-07 1.01258E-07 1.00511E-07 1.01177E-07 1.00473E-07 1.01140E-07 | 1.00480E-07 | 1.01146E-07 |
| 1.00527E-07 1.01193E-07 1.00719E-07 1.01278E-07 1.00841E-07 1.02710E-07 1.00999E-07 1.02864E-07 | | |
| | | |
| TOTAL MASS IN EACH CLASS | | |
| 3.02032E-02 1.71039E-02 2.08371E-19 3.67384E-04 | 9.82576E-04 | 1.73442E-03 |
| 8.46372E-03 1.01188E-02 1.18643E-02 1.48648E-02 9.4489E-02 2.2666E-02 2.55802E-02 2.59674E-02 | 1.59528E-02 | 1.91574E-02 |
| 2.93803E-02 2.07508E-02 2.30421E-02 2.08167E-02 2.93803E-02 2.07508E-02 2.30421E-02 2.08167E-02 | 2.27704E-02 | 2.08076E-02 |
| 2.10346E-02 1.87159E-02 1.95011E-02 1.774697E-02 4.62751E-02 1.87159E-02 1.95011E-02 1.74697E-02 | 1.80433E-02 | 1.58768E-02 |
| 1.2701E-02 1.45077E-02 1.45022E-02 1.27447E-02 1.29003E-02 1.15364E-02 1.16210E-02 1.00048E-02 0.21061E-02 7.10104E-02 7.1902E-02 (.2022E-02) | 1.00552E-02 | 8.20254E-03 |
| 6.26390E-03 5.44455E-03 5.43301E-03 4.73499E-03 6.26390E-03 5.44455E-03 5.43301E-03 4.73499E-03 2.60764E-03 2.7901E1E-03 2.44231E-03 4.73499E-03 | 4.72957E-03 | 4.04958E-03 |
| 1.71319E-03 1.37610E-03 1.19889E-03 9.47677E-04 | 8.56541E-04 | 6.79446E-04 |
| 3.04036E-04 2.46332E-04 2.13341E-04 1.76112E-04 | 1.52743E-04 | 1.26139E-04 |

3.04036E-04 2.46332E-04 2.13341E-04 1.76112E-04 1.52743E-04 1.26139E-04 1.09199E-04 9.01968E-05 7.20555E-05 6.20758E-05 5.12421E-05 4.41857E-05 3.64943E-05 3.14171E-05 2.59502E-05 2.23053E-05 1.84285E-05 1.58236E-05 1.31208E-05 1.12199E-05 9.30667E-06 8.26270E-06 6.59637E-06 5.84996E-06

Ε

ANEXO

HISTOGRAMAS DE DISTRIBUCION DE LOS RESULTADOS - FORTRAN 77 Y MATLAB 7



F





Figura G.1-Numero de partículas – FORTRAN 77 VS MATLAB 7



Figura G.2-Radio de partículas – FORTRAN 77 VS MATLAB 7

ANEXO GRAFICAS DE DISPERSION DE LOS RESULTADOS – FORTRAN 77 VS MATLAB 7 G



Figura G.3-Masa total de partículas – FORTRAN 77 VS MATLAB 7

VALORES CRITICOS – PRUEBA DE NALIMOV

Н

| | | | Tab | la-H.1 | | | |
|----|-----------------------------|-----------------------------|------------------------------|--------|-----------------------------|-----------------------------|------------------------------|
| f | q _{crit} α=0.05 | q _{crit} α=0.01 | q _{crit} α=0.001 | f | q _{crit} α=0.05 | q _{crit} α=0.01 | q _{crit} α=0.001 |
| 1 | 1.409 | 1.414 | 1.414 | 19 | 1.936 | 2.454 | 2.975 |
| 2 | 1.645 | 1.715 | 1.730 | 20 | 1.937 | 2.460 | 2.990 |
| 3 | 1.757 | 1.918 | 1.982 | 25 | 1.942 | 2.483 | 3.047 |
| 4 | 1.814 | 2.051 | 2.178 | 30 | 1.945 | 2.498 | 3.085 |
| 5 | 1.848 | 2.142 | 2.329 | 35 | 1.948 | 2.509 | 3.113 |
| 6 | 1.870 | 2.208 | 2.447 | 40 | 1.949 | 2.518 | 3.134 |
| 7 | 1.885 | 2.256 | 2.540 | 45 | 1.950 | 2.524 | 3.152 |
| 8 | 1.895 | 2.294 | 2.616 | 50 | 1.951 | 2.529 | 3.166 |
| 9 | 1.903 | 2.324 | 2.678 | 100 | 1.956 | 2.553 | 3.227 |
| 10 | 1.910 | 2.348 | 2.730 | 200 | 1.958 | 2.564 | 3.265 |
| 11 | 1.916 | 2.368 | 2.774 | 300 | 1.958 | 2.566 | 3.271 |
| 12 | 1.920 | 2.385 | 2.812 | 400 | 1.959 | 2.568 | 3.275 |
| 13 | 1.923 | 2.399 | 2.845 | 500 | 1.959 | 2.570 | 3.279 |
| 14 | 1.926 | 2.412 | 2.874 | 600 | 1.959 | 2.571 | 3.281 |
| 15 | 1.928 | 2.423 | 2.899 | 700 | 1.959 | 2.572 | 3.283 |
| 16 | 1.931 | 2.432 | 2.921 | 800 | 1.959 | 2.573 | 3. <mark>2</mark> 85 |
| 17 | 1.933 | 2.440 | 2.941 | 1000 | 1.960 | 2.576 | 3.291 |
| 18 | 1.935 | 2.447 | 2.959 | | | | |

ANEXO VALORES CRITICOS – PRUEBA DE PEARSON AND HARTLEY

| | | | 112 | | |
|----|-----------------------------|-----------------------------|------|-----------------------------|-----------------------------|
| n | q _{crit} α=0.05 | q _{crit} α=0.01 | n | q _{crit} α=0.05 | q _{crit} α=0.01 |
| 1 | 1.645 | 2.326 | 55 | 3.111 | 3.564 |
| 2 | 1.955 | 2.575 | 60 | 3.137 | 3.587 |
| 3 | 2.121 | 2.712 | 65 | 3.160 | 3.607 |
| 4 | 2.234 | 2.806 | 70 | 3.182 | 3.627 |
| 5 | 2.319 | 2.877 | 80 | 3.220 | 3.661 |
| 6 | 2.386 | 2.934 | 90 | 3.254 | 3.691 |
| 8 | 2.490 | 3.022 | 100 | 3.283 | 3.718 |
| 10 | 2.568 | 3.089 | 200 | 3.474 | 3.889 |
| 15 | 2.705 | 3.207 | 300 | 3.581 | 3.987 |
| 20 | 2.799 | 3.289 | 400 | 3.656 | 4.054 |
| 25 | 2.870 | 3.351 | 500 | 3.713 | 4.106 |
| 30 | 2.928 | 3.402 | 600 | <mark>3.758</mark> | 4.148 |
| 35 | 2.975 | 3.444 | 700 | 3.797 | 4.183 |
| 40 | 3.016 | 3.479 | 800 | 3.830 | 4.214 |
| 45 | 3.051 | 3.511 | 900 | 3.859 | 4.240 |
| 50 | 3.083 | 3.539 | 1000 | 3.884 | 4.264 |

Tabla-I.1

I

RESULTADOS DE LA PRUEBA DE VALORES DISCORDANTES (OUTLIERS) DE IGLEWICZ AND HOAGLIN

| | Numero o | le Particulas | Radio de | Particula | Masa | Total |
|----|---------------------|--------------------|--------------------|--------------------|---------------------|---------------------|
| N | MATLAB | FORTRAN | MATLAB | FORTRAN | MATLAB | FORTRAN |
| 1 | 1.03898E+00 NORMAL | 1.03898E+00 NORMAL | 1.01555E-07 NORMAL | 1.00473E-07 NORMAL | 2.09782E-19 NORMAL | 2.08371E-19 NORMAL |
| 2 | 5.36954E+14 NORMAL | 5.80866E+14 NORMAL | 1.01565E-07 NORMAL | 1.00480E-07 NORMAL | 5.31268E-06 NORMAL | 5.84996E-06 NORMAL |
| 3 | 6.4.1362E+14 NORMAL | 6.91945E+14 NORMAL | 1.01591E-07 NORMAL | 1.00511E-07 NORMAL | 6.68499E-06 NORMAL | 6.59637E-06 NORMAL |
| 4 | 7.65511E+14 NORMAL | 8.24141E+14 NORMAL | 1.01616E-07 NORMAL | 1.00527E-07 NORMAL | 7.48018E-06 NORMAL | 8.26270E-06 NORMAL |
| 5 | 9.13611E+14 NORMAL | 9.80826E+14 NORMAL | 1.01672E-07 NORMAL | 1.00699E-07 NORMAL | 9.48854E-06 NORMAL | 9.30667E-06 NORMAL |
| 6 | 1.08947E+15 NORMAL | 1.16724E+15 NORMAL | 1.01706E-07 NORMAL | 1.00719E-07 NORMAL | 1.06058E-05 NORMAL | 1.12199E-05 NORMAL |
| 7 | 1.29922E+15 NORMAL | 1.38786E+15 NORMAL | 1.01803E-07 NORMAL | 1.00841E-07 NORMAL | 1.34591E-05 NORMAL | 1.31208E-05 NORMAL |
| 8 | 1.54790E+15 NORMAL | 1.65034E+15 NORMAL | 1.01834E-07 NORMAL | 1.00999E-07 NORMAL | 1.50285E-05 NORMAL | 1.58236E-05 NORMAL |
| 9 | 1.84454E+15 NORMAL | 1.96044E+15 NORMAL | 1.02245E-07 NORMAL | 1.01140E-07 NORMAL | 1.90810E-05 NORMAL | 1.84285E-05 NORMAL |
| 10 | 1.99013E+15 NORMAL | 1.97502E+15 NORMAL | 1.02258E-07 NORMAL | 1.01146E-07 NORMAL | 2.12855E-05 NORMAL | 2.23053E-05 NORMAL |
| 11 | 2.19569E+15 NORMAL | 2.32958E+15 NORMAL | 1.03778E-07 NORMAL | 1.01177E-07 NORMAL | 2.70393E-05 NORMAL | 2.59502E-05 NORMAL |
| 12 | 2.61450E+15 NORMAL | 2.67016E+15 NORMAL | 1.03787E-07 NORMAL | 1.01193E-07 NORMAL | 3.01253E-05 NORMAL | 3.14171E-05 NORMAL |
| 13 | 2.67017E+15 NORMAL | 2.76453E+15 NORMAL | 1.03813E-07 NORMAL | 1.01258E-07 NORMAL | 3.82685E-05 NORMAL | 3.64943E-05 NORMAL |
| 14 | 3.10839E+15 NORMAL | 3.28179E+15 NORMAL | 1.03836E-07 NORMAL | 1.01278E-07 NORMAL | 4.25666E-05 NORMAL | 4.41857E-05 NORMAL |
| 15 | 3.69657E+15 NORMAL | 3.88856E+15 NORMAL | 1.08873E-07 NORMAL | 1.02707E-07 NORMAL | 5.40671E-05 NORMAL | 5.12421E-05 NORMAL |
| 16 | 4.38756E+15 NORMAL | 4.61050E+15 NORMAL | 1.08893E-07 NORMAL | 1.02710E-07 NORMAL | 6.00370E-05 NORMAL | 6.20758E-05 NORMAL |
| 17 | 5.21058E+15 NORMAL | 5.45388E+15 NORMAL | 1.08924E-07 NORMAL | 1.02864E-07 NORMAL | 7.62471E-05 NORMAL | 7.20555E-05 NORMAL |
| 18 | 5.58714E+15 NORMAL | 5.52995E+15 NORMAL | 1.04021E-07 NORMAL | 1.02885E-07 NORMAL | 8.45174E-05 NORMAL | 9.01968E-05 NORMAL |
| 19 | 6.17340E+15 NORMAL | 6.46177E+15 NORMAL | 1.04049E-07 NORMAL | 1.03112E-07 NORMAL | 1.07325E-04 NORMAL | 1.09199E-04 NORMAL |
| 20 | 7.32116E+15 NORMAL | 7.62620E+15 NORMAL | 1.04152E-07 NORMAL | 1.03500E-07 NORMAL | 1.19672E-04 NORMAL | 1.26139E-04 NORMAL |
| 21 | 8.65732E+15 NORMAL | 8.99705E+15 NORMAL | 1.04197E-07 NORMAL | 1.03546E-07 NORMAL | 1.53151E-04 NORMAL | 1.52743E-04 NORMAL |
| 22 | 1.02530E+16 NORMAL | 1.05451E+16 NORMAL | 1.04964E-07 NORMAL | 1.03771E-07 NORMAL | 1.74802E-04 NORMAL | 1.76112E-04 NORMAL |
| 23 | 1.06534E+16 NORMAL | 1.06299E+16 NORMAL | 1.05084E-07 NORMAL | 1.03826E-07 NORMAL | 2.15190E-04 NORMAL | 2.13341E-04 NORMAL |
| 24 | 1.21000E+16 NORMAL | 1.25171E+16 NORMAL | 1.05301E-07 NORMAL | 1.04046E-07 NORMAL | 2.44732E-04 NORMAL | 2.46332E-04 NORMAL |
| 25 | 1.43125E+16 NORMAL | 1.47722E+16 NORMAL | 1.05465E-07 NORMAL | 1.04943E-07 NORMAL | 3.01448E-04 NORMAL | 3.04360E-04 NORMAL |
| 26 | 1.68561E+16 NORMAL | 1.71446E+16 NORMAL | 1.05628E-07 NORMAL | 1.05111E-07 NORMAL | 3.48153E-04 NORMAL | 3.43085E-04 NORMAL |
| 27 | 1.73328E+16 NORMAL | 1.73611E+16 NORMAL | 1.05894E-07 NORMAL | 1.05365E-07 NORMAL | 3.72786E-04 NORMAL | 3.67384E-04 NORMAL |
| 28 | 1.99179E+16 NORMAL | 2.04697E+16 NORMAL | 1.06007E-07 NORMAL | 1.05483E-07 NORMAL | 4.21950E-04 NORMAL | 4.23895E-04 NORMAL |
| 29 | 2.13613E+16 NORMAL | 2.13613E+16 NORMAL | 1.06371E-07 NORMAL | 1.05831E-07 NORMAL | 4.86475E-04 NORMAL | 4.87904E-04 NORMAL |
| 30 | 2.34098E+16 NORMAL | 2.40113E+16 NORMAL | 1.06436E-07 NORMAL | 1.05904E-07 NORMAL | 5.90601E-04 NORMAL | 5.91131E-04 NORMAL |
| 31 | 2.56948E+16 NORMAL | 2.54227E+16 NORMAL | 1.06890E-07 NORMAL | 1.07661E-07 NORMAL | 6.79871E-04 NORMAL | 6.79446E-04 NORMAL |
| 32 | 2.76429E+16 NORMAL | 2.82942E+16 NORMAL | 1.06912E-07 NORMAL | 1.07693E-07 NORMAL | 8.27513E-04 NORMAL | 8.56541E-04 NORMAL |
| 33 | 3.24247E+16 NORMAL | 3.31277E+16 NORMAL | 1.08963E-07 NORMAL | 1.08198E-07 NORMAL | 9.51423E-04 NORMAL | 9.47677E-04 NORMAL |
| 34 | 3.58033E+16 NORMAL | 3.54397E+16 NORMAL | 1.08976E-07 NORMAL | 1.08200E-07 NORMAL | 9.99797E-04 NORMAL | 9.82576E-04 NORMAL |
| 35 | 3.82798E+16 NORMAL | 3.90322E+16 NORMAL | 1.09817E-07 NORMAL | 1.09320E-07 NORMAL | 1.21276E-03 NORMAL | 1.19889E-03 NORMAL |
| 30 | 4.48184E+16 NUKMAL | 4.56232E+16 NURMAL | 1.ID103E-07 NORMAL | 1.09431E-07 NORMAL | 1.33537E-03 NORMAL | 1.3761UE-U3 NORMAL |
| 37 | 5.13184E+16 NORMAL | 5.0/6/5E+16 NORMAL | 1.10/10E-0/ NORMAL | 1.10146E-07 NORMAL | 1.724/3E-03 NORMAL | 1.71319E-03 NORMAL |
| 38 | 529330E+16 NURMAL | 5.5/850E+16 NUKMAL | 1.10745E-07 NURMAL | 1.10104E-07 NORMAL | 1.70518E-US NURMAL | 1.73442E-US NURMAL |
| 39 | 6 22560EL16 NUKMAL | 6 77744E+16 NUKMAL | 1.11303E-07 NUKMAL | 1.11722E-U7 NUKMAL | 1.30300E-US NUKMAL | 1.95355E-US NUKMAL |
| 40 | 72192EELLC NORMAL | 7.41142E+16 NORMAL | 1.13972E-07 NORMAL | 1.1294UE-U7 NURMAL | 2 747242E-U3 NURMAL | 2.44331E-US NURMAL |
| 41 | 7 3103ETIO NORMAL | 7.411422+10 NORWAL | 1.13336E-07 NORMAL | 1.12507E-07 NORWAL | 2.74000E-03 NORWAL | 2.0567 IE-03 NORMAL |
| 42 | 9 54224E:16 NORMAL | 7.00054E+10 NORMAL | 1.17209E 07 NORMAL | 1.10543E-07 NORMAL | 2 553335 03 NORMAL | 2.60764E 02 NORMAL |
| 40 | 0.17507F±16 NORMAL | 9 398675+16 NORMAL | 1.17258E-07 NORMAL | 1.10:00:07 NORWAL | 3 00203E-03 NORMAL | 3 83220E-03 NORMAL |
| 45 | 1012115-17 NORMAL | 1 (7290E+17 NOPMAL | 1.20136E-07 NORMAL | 1.20310E-07 NORMAL | A 10554E 03 NORMAL | A 04959E-03 NORMAL |
| 46 | 1.18170F+17 NORMAI | 1.18345E+17 NORMAL | 1.23848F-07 NORMAI | 1.23972F-07 NORMAL | 4.79861F-03 NORMAL | 4.72957E-03 NORMAL |
| 47 | 1 19305E+17 NORMAL | 1 19175E+17 NORMAL | 1 73877F-07 NORMAL | 1 24000F-07 NORMAL | 4.80585E-03 NORMAL | 4.73499E-03 NORMAL |
| 48 | 1.33276E+17 NORMAL | 1.32281E+17 NORMAL | 1.28628E-07 NORMAL | 1.27670E-07 NORMAI | 5.21100E-03 NORMAI | 5.11790E-03 NORMAI |
| 49 | 1.40744E+17 NORMAI | 1.41716E+17 NORMAI | 1.28661E-07 NORMAI | 1.27704E-07 NORMAI | 5.47394E-03 NORMAI | 5.43301E-03 NORMAI |
| 50 | 1.60775E+17 NORMAL | 1.59677E+17 NORMAL | 1.35875E-07 NORMAL | 1.34533E-07 NORMAL | 5.48206E-03 NORMAL | 5.44455E-03 NORMAL |
| 51 | 1.64146E+17 NORMAL | 1.65118E+17 NORMAL | 1.35915E-07 NORMAL | 1.34574E-07 NORMAL | 6.17311E-03 NORMAL | 6.26390E-03 NORMAL |
| 52 | 1.75991E+17 NORMAL | 1.74805E+17 NORMAL | 1.39943E-07 NORMAL | 1.39328E-07 NORMAL | 6.17913E-03 NORMAL | 6.27032E-03 NORMAL |
| 53 | 1.96913E+17 NORMAL | 1.97759E+17 NORMAL | 1.39991E-07 NORMAL | 1.39376E-07 NORMAL | 7.09227E-03 NORMAL | 7.17993E-03 NORMAL |
| 54 | 2.00240E+17 NORMAL | 1.99270E+17 NORMAL | 1.43401E-07 NORMAL | 1.42622E-07 NORMAL | 7.09302E-03 NORMAL | 7.18194E-03 NORMAL |

Tabla-J.1-Parte 1

J

RESULTADOS DE LA PRUEBA DE VALORES DISCORDANTES (OUTLIERS) DE IGLEWICZ AND HOAGLIN

J

| | | Tabla-J.1- | Parte 2 | | |
|-----------------------|--------------------|---------------------|---------------------|--------------------|--------------------|
| 55 2.29949E+17 NORMAL | 2.30785E+17 NORMAL | 1.43553E-07 NORMAL | 1.42682E-07 NORMAL | 7.40880E-03 NORMAL | 7.27215E-03 NORMAL |
| 56 2.33101E+17 NORMAL | 2.32103E+17 NORMAL | 1.47802E-07 NORMAL | 1.47013E-07 NORMAL | 8.31484E-03 NORMAL | 8.20254E-03 NORMAL |
| 57 2.45721E+17 NORMAL | 2.44954E+17 NORMAL | 1.47875E-07 NORMAL | 1.47944E-07 NORMAL | 8.33020E-03 NORMAL | 8.21861E-03 NORMAL |
| 58 2.78831E+17 NORMAL | 2.78228E+17 NORMAL | 1.53063E-07 NORMAL | 1.51982E-07 NORMAL | 8.61955E-03 NORMAL | 8.46372E-03 NORMAL |
| 59 2.79194E+17 NORMAL | 2.79588E+17 NORMAL | 1.53153E-07 NORMAL | 1.52074E-07 NORMAL | 1.02258E-02 NORMAL | 1.00048E-02 NORMAL |
| 60 2.91373E+17 NORMAL | 2.91117E+17 NORMAL | 1.58654E-07 NORMAL | 1.57266E-07 NORMAL | 1.02704E-02 NORMAL | 1.00552E-02 NORMAL |
| 61 3.24525E+17 NORMAL | 3.24590E+17 NORMAL | 1.58879E-07 NORMAL | 1.57377E-07 NORMAL | 1.03036E-02 NORMAL | 1.01188E-02 NORMAL |
| 62 3.26680E+17 NORMAL | 3.27346E+17 NORMAL | 1.63497E-07 NORMAL | 1.62314E-07 NORMAL | 1.15999E-02 NORMAL | 1.15364E-02 NORMAL |
| 63 3.34755E+17 NORMAL | 3.35011E+17 NORMAL | 1.63628E-07 NORMAL | 1.62447E-07 NORMAL | 1.16896E-02 NORMAL | 1.16210E-02 NORMAL |
| 64 3.50295E+17 NORMAL | 3.54809E+17 NORMAL | 1.67943E-07 NORMAL | 1.68587E-07 NORMAL | 1.20746E-02 NORMAL | 1.18643E-02 NORMAL |
| 65 3.50582E+17 NORMAL | 3.54958E+17 NORMAL | 1.68099E-07 NORMAL | 1.68745E-07 NORMAL | 1.28940E-02 NORMAL | 1.27449E-02 NORMAL |
| 66 3.66791E+17 NORMAL | 3.67856E+17 NORMAL | 1.74123E-07 NORMAL | 1.73754E-07 NORMAL | 1.30243E-02 NORMAL | 1.29003E-02 NORMAL |
| 67 3.66972E+17 NORMAL | 3.70929E+17 NORMAL | 1.74305E-07 NORMAL | 1.73939E-07 NORMAL | 1.43905E-02 NORMAL | 1.45022E-02 NORMAL |
| 68 3.67097E+17 NORMAL | 3.71486E+17 NORMAL | 1.82529E-07 NORMAL | 1.81344E-07 NORMAL | 1.46426E-02 NORMAL | 1.45077E-02 NORMAL |
| 69 3.74421E+17 NORMAL | 3.75762E+17 NORMAL | 1.82737E-07 NORMAL | 1.81555E-07 NORMAL | 1.51109E-02 NORMAL | 1.48648E-02 NORMAL |
| 70 3.84633E+17 NORMAL | 3.88677E+17 NORMAL | 1.86823E-07 NORMAL | 1.88424E-07 NORMAL | 1.61219E-02 NORMAL | 1.58768E-02 NORMAL |
| 71 3.84757E+17 NORMAL | 3.88821E+17 NORMAL | 1.87062E-07 NORMAL | 1.88664E-07 NORMAL | 1.62100E-02 NORMAL | 1.59528E-02 NORMAL |
| 72 4.03205E+17 NORMAL | 4.06495E+17 NORMAL | 1.95912E-07 NORMAL | 1.97227E-07 NORMAL | 1.65119E-02 NORMAL | 1.62761E-02 NORMAL |
| 73 4.03528E+17 NORMAL | 4.07091E+17 NORMAL | 1.96181E-07 NORMAL | 1.97497E-07 NORMAL | 1.71404E-02 NORMAL | 1.71039E-02 NORMAL |
| 74 4.04921E+17 NORMAL | 4.07254E+17 NORMAL | 2.14944E-07 NORMAL | 2.25142E-07 NORMAL | 1.78702E-02 NORMAL | 1.74697E-02 NORMAL |
| 75 4.15030E+17 NORMAL | 4.16655E+17 NORMAL | 2.26111E-07 NORMAL | 2.25434E-07 NORMAL | 1.84052E-02 NORMAL | 1.80433E-02 NORMAL |
| 76 4.21919E+17 NORMAL | 4.25646E+17 NORMAL | 2.29049E-07 NORMAL | 2.28373E-07 NORMAL | 1.90184E-02 NORMAL | 1.87159E-02 NORMAL |
| 77 4.23024E+17 NORMAL | 4.26816E+17 NORMAL | 2.29390E-07 NORMAL | 2.28916E-07 NORMAL | 1.94543E-02 NORMAL | 1.91574E-02 NORMAL |
| 78 4.40161E+17 NORMAL | 4.43655E+17 NORMAL | 2.32483E-07 NORMAL | 2.31813E-07 NORMAL | 1.96450E-02 NORMAL | 1.95011E-02 NORMAL |
| 79 4.42467E+17 NORMAL | 4.45566E+17 NORMAL | 2.35598E-07 NORMAL | 2.34929E-07 NORMAL | 1.98089E-02 NORMAL | 1.99708E-02 NORMAL |
| 80 4.43146E+17 NORMAL | 4.46294E+17 NORMAL | 2.36002E-07 NORMAL | 2.35334E-07 NORMAL | 2.02753E-02 NORMAL | 2.01488E-02 NORMAL |
| 81 4.46961E+17 NORMAL | 4.49174E+17 NORMAL | 2.39212E-07 NORMAL | 2.38547E-07 NORMAL | 2.03375E-02 NORMAL | 2.02887E-02 NORMAL |
| 82 4.56952E+17 NORMAL | 4.60492E+17 NORMAL | 2.39693E-07 NORMAL | 2.39030E-07 NORMAL | 2.03566E-02 NORMAL | 2.07508E-02 NORMAL |
| 83 4_60959E+17 NORMAL | 4.64344E+17 NORMAL | 2.43027E-07 NORMAL | 2.42369E-07 NORMAL | 2.04620E-02 NORMAL | 2.08076E-02 NORMAL |
| 84 4.69151E+17 NORMAL | 4.71831E+17 NORMAL | 2.46417E-07 NORMAL | 2.45762E-07 NORMAL | 2.06725E-02 NORMAL | 2.08167E-02 NORMAL |
| 85 4.71047E+17 NORMAL | 4.74183E+17 NORMAL | 2.49879E-07 OUTLIER | 2.49228E-07 NORMAL | 2.11411E-02 NORMAL | 2.10346E-02 NORMAL |
| 86 4.71652E+17 NORMAL | 4.74433E+17 NORMAL | 2.50555E-07 OUTLIER | 2.49903E-07 NORMAL | 2.16471E-02 NORMAL | 2.16272E-02 NORMAL |
| 87 4.77323E+17 NORMAL | 4.80569E+17 NORMAL | 2.54149E-07 OUTLIER | 2.53501E-07 NORMAL | 2.21418E-02 NORMAL | 2.20606E-02 NORMAL |
| 88 4.80953E+17 NORMAL | 4.84200E+17 NORMAL | 2.57831E-07 OUTLIER | 2.57187E-07 OUTUER | 2.23647E-02 NORMAL | 2.24313E-02 NORMAL |
| 89 4.81551E+17 NORMAL | 4.84373E+17 NORMAL | 2.61621E-07 OUTLIER | 2.60980E-07 OUTLIER | 2.25/97E-02 NORMAL | 2.27704E-02 NORMAL |
| 90 4.85010E+17 NORMAL | 4.8/881E+17 NORMAL | 2.68418E-07 OUTLIER | 2.6//85E-07 OUTUER | 2.27851E-02 NORMAL | 2.30421E-02 NORMAL |
| 91 4.89830E+17 NORMAL | 4.92835E+17 NORMAL | 2.72540E-07 OUTLIER | 2./190/E-0/ OUTUER | 2.56214E-02 NORMAL | 2.55802E-02 NORMAL |
| 92 4.90106E+17 NORMAL | 4.93264E+17 NORMAL | 2.79442E-07 OUTLIER | 2.76814E-07 OUTUER | 2.59189E-UZ NORMAL | 2.59674E-02 NORMAL |
| 93 4.9/620E+1/ NORMAL | 5.01059E+17 NORMAL | 5.35250E-07 OUTLIER | 5.54622E-07 OUTUER | 2.62840E-02 NORMAL | 2.93803E-02 NORMAL |
| 94 4.98062E+17 NURMAL | 5.01336E+17 NURMAL | 8.85250E-07 OUTLIER | 8.84021E-07 0010ER | 3113098E-02 NORMAL | 3.02032E-02 NOKMAL |

ANEXO

RESULTADOS DE LA PRUEBA DE VALORES DISCORDANTES (OUTLIERS) DE NALIMOV

К

Tabla-K.1-Parte 1

| ľ | I | | | NUMERO D | E PARTICULAS | | | - | | | | RADIO DE P | ARTICULAS | | | | | | | MASA | TOTAL | | | |
|----|-------------|----------|--------|----------|----------------------------|--------|--------|--------|-------------|--------|----------|------------|-------------|--------|----------|--------|-------------|----------|--------|----------|-------------|----------|--------|----------|
| | | MA | TLAB | | I | FOR | TRAN | | | MAT | LAB | | I | FOR | TRAN | | | MA | TLAB | | | FORT | RAN | |
| N | VALOR/PROB | 99.9 | 99 | 95 | VALOR/PROB | 99.9 | 99 | 95 | VALOR/PROB | 99.9 | 99 | 95 | VALOR/PROB | 99.9 | 99 | 95 | VALOR/PROB | 99.9 | 99 | 95 | VALOR/PROB | 99.9 | 99 | 95 |
| 1 | 1.03898E+00 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.03898E+00 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.01555E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.00473E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.09782E-19 | ORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.08371E-19 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 2 | 5.36954E+14 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 5.80866E+14 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.01565E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.00480E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 5.31268E-06 | 5 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 5.84996E-06 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 3 | 6.41362E+14 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 6.91945E+14 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.01591E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.00511E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 6.68499E-06 | 5 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 6.59637E-06 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 4 | 7.65511E+14 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 8.24141E+14 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.01616E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.00527E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 7.48018E-06 | 5 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 8.26270E-06 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| - | 9.13611E+14 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 9.80826E+14 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.01672E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.00699E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 9.48854E-06 | 5 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 9.30667E-06 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 6 | 1.08947E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.16724E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.01706E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.00719E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.06058E-05 | 5 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.12199E-05 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 1 | 1.29922E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.38786E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.01803E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.00841E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.34591E-05 | 5 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.31208E-05 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 8 | 1.54790E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.65034E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.01834E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.00999E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.50285E-05 | 5 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.58236E-05 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 9 | 1.84454E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.96044E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.02245E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.01140E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.90810E-05 | 5 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.84285E-05 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 10 | 1.99013E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.97502E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.02258E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.01146E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.12855E-05 | 5 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.23053E-05 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 11 | 2.19569E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.32958E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.03778E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.01177E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.70393E-05 | 5 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.59502E-05 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 12 | 2.61450E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.67016E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.03787E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.01193E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.01253E-05 | 5 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.14171E-05 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 13 | 2.67017E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.76453E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.03813E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.01258E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.82685E-05 | 5 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.64943E-05 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 14 | 3.10839E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.28179E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.03836E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.01278E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.25666E-05 | 5 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.41857E-05 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 15 | 3.69657E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.88856E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.03873E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.02707E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 5.40671E-05 | 5 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 5.12421E-05 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 16 | 4.38756E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.61050E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.03893E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.02710E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 6.00370E-05 | 5 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 6.20758E-05 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 17 | 5.21058E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 5.45388E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.03924E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.02864E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 7.62471E-05 | 5 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 7.20555E-05 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 18 | 5.58714E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 5.52995E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.04021E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.02885E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 8.45174E-05 | 5 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 9.01968E-05 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 19 | 6.17340E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 6.46177E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.04049E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.03112E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.07325E-04 | I NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.09199E-04 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 20 | 7.32116E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 7.62620E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.04152E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.03500E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.19672E-04 | 1 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.26139E-04 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 21 | 8.65732E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 8.99705E+15 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.04197E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.03546E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.53151E-04 | I NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.52743E-04 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 22 | 1.02530E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.05451E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.04964E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.03771E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.74802E-04 | I NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.76112E-04 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 23 | 1.06534E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.06299E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.05084E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.03826E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.15190E-04 | 1 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.13341E-04 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 24 | 1.21000E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.25171E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.05301E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.04046E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.44732E-04 | 1 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.46332E-04 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 25 | 1.43125E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.47722E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.05465E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.04943E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.01448E-04 | 1 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.04360E-04 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 26 | 1.68561E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.71446E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.05628E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.05111E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.48153E-04 | 1 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.43085E-04 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 2 | 1.73328E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.73611E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.05894E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.05365E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.72786E-04 | I NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.67384E-04 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 20 | 1.991/9E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.04697E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.06007E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.05483E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.21950E-04 | I NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.23895E-04 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 25 | 2.13613E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.13613E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.06371E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.05831E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.86475E-04 | I NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.87904E-04 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 30 | 2.34098E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.40113E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.06436E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.05904E-07 | | NORMAL | NORMAL | 5.90601E-04 | | NORMAL | NORMAL | 5.91131E-04 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 3 | 2.50948E+10 | NORIVIAL | NORMAL | NORMAL | 2.54227E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.06890E-07 | NORMAL | NORIVIAL | NORMAL | 1.07661E-07 | | NORIVIAL | NORMAL | 6.79871E-04 | | NORMAL | NORMAL | 0.79446E-04 | NORIVIAL | NORMAL | NORIVIAL |
| 34 | 2.76429E+16 | NORIVIAL | NORMAL | NORMAL | 2.82942E+10 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.06912E-07 | NORMAL | NORIVIAL | NORMAL | 1.07693E-07 | | NORMAL | NORMAL | 8.27513E-04 | | NORMAL | NORIVIAL | 8.50541E-04 | NORIVIAL | NORMAL | NORIVIAL |
| 33 | 3.24247E+10 | NORIVIAL | NORMAL | NORMAL | 3.312//E+10 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.08903E-07 | NORMAL | NORIVIAL | NORMAL | 1.08198E-07 | | NORIVIAL | NORMAL | 9.51423E-04 | | NORMAL | NORMAL | 9.476776-04 | NORIVIAL | NORMAL | NORIVIAL |
| 34 | 3.58033E+10 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.54397E+10 2.00222E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.08976E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.08200E-07 | | NORMAL | NORMAL | 9.99797E-04 | | NORMAL | NORMAL | 9.82576E-04 | NORIVIAL | NORMAL | NORMAL |
| 3. | 3.82758E+10 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.50322E+10 4.56232E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.09817E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.09320E-07 | | NORMAL | NORMAL | 1.21270E-03 | | NORMAL | NORMAL | 1.15665E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 2 | E 12104E:16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.50252E+10 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.107105.07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.101465.07 | | NORMAL | NORMAL | 1.333371-03 | | NORMAL | NORMAL | 1 712105 02 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 20 | 5 20256E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 5.37850E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.10745E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.10140E-07 | | NORMAL | NORMAL | 1.72473E-03 | | NORMAL | NORMAL | 1.71515E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 30 | 6 18762F+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 6 16211E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.10745E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.10104E-07 | | NORMAL | NORMAL | 1.96566E-03 | | NORMAL | NORMAL | 1.73442E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 40 | 6.22569E+16 | NORMAI | NORMAL | NORMAL | 6.27744E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.13972F-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.12940F-07 | NORMAI | NORMAL | NORMAL | 2.47242E-03 | NORMAI | NORMAL | NORMAL | 2.44531E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 41 | 7.31835E+16 | NORMAI | NORMAL | NORMAL | 7.41142E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.13998E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.12967E-07 | NORMAI | NORMAL | NORMAL | 2.74890E-03 | NORMAI | NORMAL | NORMAL | 2.69871E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 43 | 7 75780E+16 | NORMAI | NORMAL | NORMAL | 7 68094E+16 | NORMAI | NORMAL | NORMAL | 1 17273E-07 | NORMAL | NORMAI | NORMAL | 1 16543E-07 | NORMAI | NORMAL | NORMAL | 2 83999F-03 | | NORMAL | NORMAL | 2 79151E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 4 | 8.54324F+16 | NORMAI | NORMAL | NORMAL | 8.64035E+16 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.17298E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.16560E-07 | NORMAI | NORMAL | NORMAL | 3.56233E-03 | NORMAI | NORMAL | NORMAL | 3.60764E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 44 | 9.47597F+16 | NORMAI | NORMAI | NORMAI | 9.38862E+16 | NORMAI | NORMAL | NORMAI | 1.20150E-07 | NORMAL | NORMAI | NORMAL | 1.20316E-07 | NORMAI | NORMAL | NORMAL | 3.90298E-03 | NORMAI | NORMAL | NORMAI | 3.83220E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAI |
| 4 | 1.01311E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.02290E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.20176E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.20342E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.10564E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.04958E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 46 | 1.18170F+17 | NORMAI | NORMAI | NORMAL | 1.18345E+17 | NORMAI | NORMAI | NORMAI | 1.23848F-07 | NORMAL | NORMAI | NORMAL | 1.23972F-07 | NORMAI | NORMAI | NORMAL | 4.79861E-03 | 8 NORMAI | NORMAI | NORMAI | 4.72957E-03 | NORMAI | NORMAL | NORMAI |
| 47 | 1.19305E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.19175E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.23877E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.24000E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.80585E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.73499E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 48 | 1.33276E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.32281E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.28628E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.27670E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 5.21100E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 5.11790E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 49 | 1.40744E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.41716E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.28661E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.27704E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 5.47394E-03 | 8 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 5.43301E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 50 | 1.60775E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.59677E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.35875E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.34533E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 5.48206E-03 | 8 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 5.44455E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 51 | 1.64146E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.65118E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.35915E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.34574E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 6.17311E-03 | 8 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 6.26390E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 52 | 1.75991E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.74805E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.39943E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.39328E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 6.17913E-03 | 8 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 6.27032E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 53 | 1.96913E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.97759E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.39991E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.39376E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 7.09227E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 7.17993E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 54 | 2.00240E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.99270E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.43401E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.42622E-07 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 7.09302E-03 | 8 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 7.18194E-03 | NORMAL | NORMAL | NORMAL |

RESULTADOS DE LA PRUEBA DE VALORES DISCORDANTES (OUTLIERS) DE NALIMOV

К

Tabla-K.1-Parte 2

| 5 | 5 2 | .29949E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.30785E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.43553E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.42682E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 7.40880E-03 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 7.27215E-03 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
|---|-----|------------|--------|--------|--------|--------------------|--------|--------|---------------------|---------|---------|---------------------|---------|---------|--------------------|--------|--------|--------------------|--------|---------|
| 5 | 6 2 | .33101E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.32103E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.47802E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.47013E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 8.31484E-03 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 8.20254E-03 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 5 | 7 2 | .45721E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.44954E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.47875E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.47944E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 8.33020E-03 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 8.21861E-03 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 5 | 8 2 | .78831E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.78228E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.53063E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.51982E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 8.61955E-03 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 8.46372E-03 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 5 | 9 2 | .79194E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.79588E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.53153E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.52074E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.02258E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.00048E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 6 | 0 2 | .91373E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.91117E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.58654E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.57266E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.02704E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.00552E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 6 | 1 3 | .24525E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.24590E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.58879E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.57377E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.03036E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.01188E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 6 | 2 3 | .26680E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.27346E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.63497E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.62314E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.15999E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.15364E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 6 | 3 3 | .34755E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.35011E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.63628E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.62447E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.16896E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.16210E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 6 | 4 3 | .50295E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.54809E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.67943E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.68587E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.20746E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.18643E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 6 | 5 3 | .50582E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.54958E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.68099E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.68745E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.28940E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.27449E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 6 | 6 3 | .66791E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.67856E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.74123E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.73754E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.30243E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.29003E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 6 | 7 3 | .66972E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.70929E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.74305E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.73939E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.43905E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.45022E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 6 | 8 3 | .67097E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.71486E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.82529E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.81344E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.46426E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.45077E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 6 | 9 3 | .74421E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.75762E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.82737E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.81555E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.51109E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.48648E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 7 | 0 3 | .84633E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.88677E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.86823E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.88424E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.61219E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.58768E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 7 | 1 3 | .84757E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.88821E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.87062E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.88664E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.62100E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.59528E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 7 | 2 4 | .03205E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.06495E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.95912E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.97227E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.65119E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.62761E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 7 | 3 4 | .03528E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.07091E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.96181E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.97497E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.71404E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.71039E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 7 | 4 4 | .04921E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.07254E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.14944E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.25142E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.78702E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.74697E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 7 | 5 4 | .15030E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.16655E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.26111E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.25434E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.84052E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.80433E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 7 | 6 4 | .21919E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.25646E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.29049E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.28373E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.90184E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.87159E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 7 | 7 4 | .23024E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.26816E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.29390E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.28916E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.94543E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.91574E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 7 | 8 4 | .40161E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.43655E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.32483E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.31813E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.96450E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.95011E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 7 | 9 4 | .42467E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.45566E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.35598E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.34929E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.98089E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 1.99708E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 8 | 0 4 | .43146E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.46294E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.36002E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.35334E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.02753E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.01488E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 8 | 1 4 | .46961E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.49174E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.39212E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.38547E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.03375E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.02887E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 8 | 2 4 | .56952E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.60492E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.39693E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.39030E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.03566E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.07508E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 8 | 3 4 | .60959E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.64344E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.43027E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.42369E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.04620E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.08076E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 8 | 4 4 | .69151E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.71831E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.46417E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.45762E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.06725E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.08167E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 8 | 5 4 | .71047E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.74183E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.49879E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.49228E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.11411E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.10346E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 8 | 6 4 | .71652E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.74433E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.50555E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.49903E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.16471E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.16272E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 8 | 7 4 | .77323E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.80569E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.54149E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.53501E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.21418E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.20606E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 8 | 8 4 | .80953E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.84200E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.57831E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.57187E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.23647E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.24313E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 8 | 9 4 | .81551E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.84373E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.61621E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.60980E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.25797E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.27704E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 9 | 0 4 | .85010E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.87881E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.68418E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.67785E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.27851E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.30421E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL |
| 9 | 1 4 | .89830E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.92835E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.72540E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.71907E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.56214E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.55802E-02 NORMAL | NORMAL | OUTLIER |
| 9 | 2 4 | .90106E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 4.93264E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.79442E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.78814E-07 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.59189E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.59674E-02 NORMAL | NORMAL | OUTLIER |
| 9 | 3 4 | .97620E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 5.01059E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 5.35250E-07 OUTLIER | OUTLIER | OUTLIER | 5.34622E-07 OUTLIER | OUTLIER | OUTLIER | 2.62840E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 2.93803E-02 NORMAL | NORMAL | OUTLIER |
| 9 | 4 4 | .98082E+17 | NORMAL | NORMAL | NORMAL | 5.01336E+17 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 8.85250E-07 OUTLIER | OUTLIER | OUTLIER | 8.84621E-07 OUTLIER | OUTLIER | OUTLIER | 3.03098E-02 NORMAL | NORMAL | NORMAL | 3.02032E-02 NORMAL | NORMAL | OUTLIER |

ANEXO

RESULTADOS DE LA PRUEBA DE VALORES DISCORDANTES (OUTLIERS) DE PEARSON AND HARTLEY

L

| 1 | | NUMERO D | F PARTICULAS | | | | | RADIO DE PA | ARTICULAS | | | | MASA | ΤΟΤΑΙ | |
|----|--------------------|----------|--------------|---------|--------|---------------|--------|-------------|-------------|---------|--------|--------------------|---------|------------------|-----------|
| | MATLAB | NOMENO D | ETARREDAS | FORTRAN | | | MATLAB | INDIO DE IV | | FORTRAN | | MATLAB | IVIA SA | FORT | RAN |
| | VALOR/PROB 95 | 99 | VALOR/PROB | 95 | 99 | VALOR/PROB | 95 | 99 | VALOR/PROB | 95 | 99 | VALOR/PROB 95 | 99 | VALOR/PROB 9 | 5 99 |
| 1 | 1.03898E+00 NORMAL | NORMAL | 1.03898E+00 | NORMAL | NORMAL | 1.01555E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.00473E-07 | NORMAL | NORMAL | 2.09782E-19 NORMAL | NORMAL | 2.08371E-19 NORM | AL NORMAL |
| 2 | 5.36954E+14 NORMAL | NORMAL | 5.80866E+14 | NORMAL | NORMAL | 1.01565E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.00480E-07 | NORMAL | NORMAL | 5.31268E-06 NORMAL | NORMAL | 5.84996E-06 NORM | AL NORMAL |
| 3 | 6 41362F+14 NORMAI | NORMAI | 6 91945F+14 | NORMAI | NORMAI | 1 01591F-07 M | ORMAI | NORMAI | 1 00511E-07 | NORMAI | NORMAI | 6 68499F-06 NORMAI | NORMAL | 6 59637E-06 NORM | AI NORMAI |
| 4 | 7.65511E+14 NORMAL | NORMAL | 8.24141F+14 | NORMAL | NORMAL | 1.01616E-07 | ORMAL | NORMAL | 1.00527E-07 | NORMAL | NORMAL | 7.48018F-06 NORMAL | NORMAL | 8.26270E-06 NORM | AL NORMAL |
| 5 | 9.13611E+14 NORMAL | NORMAL | 9.80826F+14 | NORMAL | NORMAL | 1.01672F-07 N | ORMAL | NORMAL | 1.00699E-07 | NORMAL | NORMAL | 9.48854F-06 NORMAL | NORMAL | 9.30667E-06 NORM | AL NORMAL |
| 6 | 1.08947E+15 NORMAL | NORMAL | 1.16724F+15 | NORMAL | NORMAL | 1.01706F-07 N | ORMAL | NORMAL | 1.00719E-07 | NORMAL | NORMAL | 1.06058E-05 NORMAL | NORMAL | 1.12199E-05 NORM | AL NORMAL |
| 7 | 1.29922E+15 NORMAL | NORMAL | 1.38786F+15 | NORMAL | NORMAL | 1.01803E-07 M | ORMAL | NORMAL | 1.00841E-07 | NORMAL | NORMAL | 1.34591E-05 NORMAL | NORMAL | 1.31208E-05 NORM | AL NORMAL |
| 8 | 1.54790E+15 NORMAL | NORMAL | 1.65034E+15 | NORMAL | NORMAL | 1.01834E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.00999E-07 | NORMAL | NORMAL | 1.50285E-05 NORMAL | NORMAL | 1.58236E-05 NORM | AL NORMAL |
| 9 | 1.84454E+15 NORMAL | NORMAL | 1.96044E+15 | NORMAL | NORMAL | 1.02245E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.01140E-07 | NORMAL | NORMAL | 1.90810E-05 NORMAL | NORMAL | 1.84285E-05 NORM | AL NORMAL |
| 10 | 1.99013E+15 NORMAL | NORMAL | 1.97502E+15 | NORMAL | NORMAL | 1.02258E-07 M | NORMAL | NORMAL | 1.01146E-07 | NORMAL | NORMAL | 2.12855E-05 NORMAL | NORMAL | 2.23053E-05 NORM | AL NORMAL |
| 11 | 2.19569E+15 NORMAL | NORMAL | 2.32958E+15 | NORMAL | NORMAL | 1.03778E-07 M | NORMAL | NORMAL | 1.01177E-07 | NORMAL | NORMAL | 2.70393E-05 NORMAL | NORMAL | 2.59502E-05 NORM | AL NORMAL |
| 12 | 2.61450E+15 NORMAL | NORMAL | 2.67016E+15 | NORMAL | NORMAL | 1.03787E-07 M | NORMAL | NORMAL | 1.01193E-07 | NORMAL | NORMAL | 3.01253E-05 NORMAL | NORMAL | 3.14171E-05 NORM | AL NORMAL |
| 13 | 2.67017E+15 NORMAL | NORMAL | 2.76453E+15 | NORMAL | NORMAL | 1.03813E-07 M | NORMAL | NORMAL | 1.01258E-07 | NORMAL | NORMAL | 3.82685E-05 NORMAL | NORMAL | 3.64943E-05 NORM | AL NORMAL |
| 14 | 3.10839E+15 NORMAL | NORMAL | 3.28179E+15 | NORMAL | NORMAL | 1.03836E-07 M | NORMAL | NORMAL | 1.01278E-07 | NORMAL | NORMAL | 4.25666E-05 NORMAL | NORMAL | 4.41857E-05 NORM | AL NORMAL |
| 15 | 3.69657E+15 NORMAL | NORMAL | 3.88856E+15 | NORMAL | NORMAL | 1.03873E-07 M | NORMAL | NORMAL | 1.02707E-07 | NORMAL | NORMAL | 5.40671E-05 NORMAL | NORMAL | 5.12421E-05 NORM | AL NORMAL |
| 16 | 4.38756E+15 NORMAL | NORMAL | 4.61050E+15 | NORMAL | NORMAL | 1.03893E-07 M | NORMAL | NORMAL | 1.02710E-07 | NORMAL | NORMAL | 6.00370E-05 NORMAL | NORMAL | 6.20758E-05 NORM | AL NORMAL |
| 17 | 5.21058E+15 NORMAL | NORMAL | 5.45388E+15 | NORMAL | NORMAL | 1.03924E-07 M | NORMAL | NORMAL | 1.02864E-07 | NORMAL | NORMAL | 7.62471E-05 NORMAL | NORMAL | 7.20555E-05 NORM | AL NORMAL |
| 18 | 5.58714E+15 NORMAL | NORMAL | 5.52995E+15 | NORMAL | NORMAL | 1.04021E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.02885E-07 | NORMAL | NORMAL | 8.45174E-05 NORMAL | NORMAL | 9.01968E-05 NORM | AL NORMAL |
| 19 | 6.17340E+15 NORMAL | NORMAL | 6.46177E+15 | NORMAL | NORMAL | 1.04049E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.03112E-07 | NORMAL | NORMAL | 1.07325E-04 NORMAL | NORMAL | 1.09199E-04 NORM | AL NORMAL |
| 20 | 7.32116E+15 NORMAL | NORMAL | 7.62620E+15 | NORMAL | NORMAL | 1.04152E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.03500E-07 | NORMAL | NORMAL | 1.19672E-04 NORMAL | NORMAL | 1.26139E-04 NORM | AL NORMAL |
| 21 | 8.65732E+15 NORMAL | NORMAL | 8.99705E+15 | NORMAL | NORMAL | 1.04197E-07 M | NORMAL | NORMAL | 1.03546E-07 | NORMAL | NORMAL | 1.53151E-04 NORMAL | NORMAL | 1.52743E-04 NORM | AL NORMAL |
| 22 | 1.02530E+16 NORMAL | NORMAL | 1.05451E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.04964E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.03771E-07 | NORMAL | NORMAL | 1.74802E-04 NORMAL | NORMAL | 1.76112E-04 NORM | AL NORMAL |
| 23 | 1.06534E+16 NORMAL | NORMAL | 1.06299E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.05084E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.03826E-07 | NORMAL | NORMAL | 2.15190E-04 NORMAL | NORMAL | 2.13341E-04 NORM | AL NORMAL |
| 24 | 1.21000E+16 NORMAL | NORMAL | 1.25171E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.05301E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.04046E-07 | NORMAL | NORMAL | 2.44732E-04 NORMAL | NORMAL | 2.46332E-04 NORM | AL NORMAL |
| 25 | 1.43125E+16 NORMAL | NORMAL | 1.47722E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.05465E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.04943E-07 | NORMAL | NORMAL | 3.01448E-04 NORMAL | NORMAL | 3.04360E-04 NORM | AL NORMAL |
| 26 | 1.68561E+16 NORMAL | NORMAL | 1.71446E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.05628E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.05111E-07 | NORMAL | NORMAL | 3.48153E-04 NORMAL | NORMAL | 3.43085E-04 NORM | AL NORMAL |
| 27 | 1.73328E+16 NORMAL | NORMAL | 1.73611E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.05894E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.05365E-07 | NORMAL | NORMAL | 3.72786E-04 NORMAL | NORMAL | 3.67384E-04 NORM | AL NORMAL |
| 28 | 1.99179E+16 NORMAL | NORMAL | 2.04697E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.06007E-07 M | NORMAL | NORMAL | 1.05483E-07 | NORMAL | NORMAL | 4.21950E-04 NORMAL | NORMAL | 4.23895E-04 NORM | AL NORMAL |
| 29 | 2.13613E+16 NORMAL | NORMAL | 2.13613E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.06371E-07 M | NORMAL | NORMAL | 1.05831E-07 | NORMAL | NORMAL | 4.86475E-04 NORMAL | NORMAL | 4.87904E-04 NORM | AL NORMAL |
| 30 | 2.34098E+16 NORMAL | NORMAL | 2.40113E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.06436E-07 M | NORMAL | NORMAL | 1.05904E-07 | NORMAL | NORMAL | 5.90601E-04 NORMAL | NORMAL | 5.91131E-04 NORM | AL NORMAL |
| 31 | 2.56948E+16 NORMAL | NORMAL | 2.54227E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.06890E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.07661E-07 | NORMAL | NORMAL | 6.79871E-04 NORMAL | NORMAL | 6.79446E-04 NORM | AL NORMAL |
| 32 | 2.76429E+16 NORMAL | NORMAL | 2.82942E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.06912E-07 M | NORMAL | NORMAL | 1.07693E-07 | NORMAL | NORMAL | 8.27513E-04 NORMAL | NORMAL | 8.56541E-04 NORM | AL NORMAL |
| 33 | 3.24247E+16 NORMAL | NORMAL | 3.31277E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.08963E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.08198E-07 | NORMAL | NORMAL | 9.51423E-04 NORMAL | NORMAL | 9.47677E-04 NORM | AL NORMAL |
| 34 | 3.58033E+16 NORMAL | NORMAL | 3.54397E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.08976E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.08200E-07 | NORMAL | NORMAL | 9.99797E-04 NORMAL | NORMAL | 9.82576E-04 NORM | AL NORMAL |
| 35 | 3.82798E+16 NORMAL | NORMAL | 3.90322E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.09817E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.09320E-07 | NORMAL | NORMAL | 1.21276E-03 NORMAL | NORMAL | 1.19889E-03 NORM | AL NORMAL |
| 36 | 4.48184E+16 NORMAL | NORMAL | 4.56232E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.10103E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.09431E-07 | NORMAL | NORMAL | 1.33537E-03 NORMAL | NORMAL | 1.37610E-03 NORM | AL NORMAL |
| 37 | 5.13184E+16 NORMAL | NORMAL | 5.07675E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.10710E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.10146E-07 | NORMAL | NORMAL | 1.72473E-03 NORMAL | NORMAL | 1.71319E-03 NORM | AL NORMAL |
| 38 | 5.29356E+16 NORMAL | NORMAL | 5.37850E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.10745E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.10164E-07 | NORMAL | NORMAL | 1.76518E-03 NORMAL | NORMAL | 1.73442E-03 NORM | AL NORMAL |
| 39 | 6.18762E+16 NORMAL | NORMAL | 6.16211E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.11305E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.11722E-07 | NORMAL | NORMAL | 1.96566E-03 NORMAL | NORMAL | 1.93535E-03 NORM | AL NORMAL |
| 40 | 6.22569E+16 NORMAL | NORMAL | 6.27744E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.13972E-07 M | NORMAL | NORMAL | 1.12940E-07 | NORMAL | NORMAL | 2.47242E-03 NORMAL | NORMAL | 2.44531E-03 NORM | AL NORMAL |
| 41 | 7.31835E+16 NORMAL | NORMAL | 7.41142E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.13998E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.12967E-07 | NORMAL | NORMAL | 2.74890E-03 NORMAL | NORMAL | 2.69871E-03 NORM | AL NORMAL |
| 42 | 7.75780E+16 NORMAL | NORMAL | 7.68094E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.17273E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.16543E-07 | NORMAL | NORMAL | 2.83999E-03 NORMAL | NORMAL | 2.79151E-03 NORM | AL NORMAL |
| 43 | 8.54324E+16 NORMAL | NORMAL | 8.64035E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.17298E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.16560E-07 | NORMAL | NORMAL | 3.56233E-03 NORMAL | NORMAL | 3.60764E-03 NORM | AL NORMAL |
| 44 | 9.47597E+16 NORMAL | NORMAL | 9.38862E+16 | NORMAL | NORMAL | 1.20150E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.20316E-07 | NORMAL | NORMAL | 3.90298E-03 NORMAL | NORMAL | 3.83220E-03 NORM | AL NORMAL |
| 45 | 1.01311E+17 NORMAL | NORMAL | 1.02290E+17 | NORMAL | NORMAL | 1.20176E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.20342E-07 | NORMAL | NORMAL | 4.10564E-03 NORMAL | NORMAL | 4.04958E-03 NORM | AL NORMAL |
| 46 | 1.18170E+17 NORMAL | NORMAL | 1.18345E+17 | NORMAL | NORMAL | 1.23848E-07 M | NORMAL | NORMAL | 1.23972E-07 | NORMAL | NORMAL | 4.79861E-03 NORMAL | NORMAL | 4.72957E-03 NORM | AL NORMAL |
| 47 | 1.19305E+17 NORMAL | NORMAL | 1.19175E+17 | NORMAL | NORMAL | 1.23877E-07 M | NORMAL | NORMAL | 1.24000E-07 | NORMAL | NORMAL | 4.80585E-03 NORMAL | NORMAL | 4.73499E-03 NORM | AL NORMAL |
| 48 | 1.33276E+17 NORMAL | NORMAL | 1.32281E+17 | NORMAL | NORMAL | 1.28628E-07 M | NORMAL | NORMAL | 1.27670E-07 | NORMAL | NORMAL | 5.21100E-03 NORMAL | NORMAL | 5.11790E-03 NORM | AL NORMAL |
| 49 | 1.40744E+17 NORMAL | NORMAL | 1.41716E+17 | NORMAL | NORMAL | 1.28661E-07 N | NORMAL | NORMAL | 1.27704E-07 | NORMAL | NORMAL | 5.47394E-03 NORMAL | NORMAL | 5.43301E-03 NORM | AL NORMAL |
| 50 | 1.60775E+17 NORMAL | NORMAL | 1.59677E+17 | NORMAL | NORMAL | 1.35875E-07 M | NORMAL | NORMAL | 1.34533E-07 | NORMAL | NORMAL | 5.48206E-03 NORMAL | NORMAL | 5.44455E-03 NORM | AL NORMAL |

Tabla-L.1-Parte 1

RESULTADOS DE LA PRUEBA DE VALORES DISCORDANTES (OUTLIERS) DE PEARSON AND HARTLEY

L

| | | | | | Tab | Id-L.1-Pdi | lez | | | | | |
|----|--------------------|--------|--------------------|--------|---------------------|------------|---------------------|--------|--------------------|--------|--------------------|--------|
| 51 | 1.64146E+17 NORMAL | NORMAL | 1.65118E+17 NORMAL | NORMAL | 1.35915E-07 NORMAL | NORMAL | 1.34574E-07 NORMAL | NORMAL | 6.17311E-03 NORMAL | NORMAL | 6.26390E-03 NORMAL | NORMAL |
| 52 | 1.75991E+17 NORMAL | NORMAL | 1.74805E+17 NORMAL | NORMAL | 1.39943E-07 NORMAL | NORMAL | 1.39328E-07 NORMAL | NORMAL | 6.17913E-03 NORMAL | NORMAL | 6.27032E-03 NORMAL | NORMAL |
| 53 | 1.96913E+17 NORMAL | NORMAL | 1.97759E+17 NORMAL | NORMAL | 1.39991E-07 NORMAL | NORMAL | 1.39376E-07 NORMAL | NORMAL | 7.09227E-03 NORMAL | NORMAL | 7.17993E-03 NORMAL | NORMAL |
| 54 | 2.00240E+17 NORMAL | NORMAL | 1.99270E+17 NORMAL | NORMAL | 1.43401E-07 NORMAL | NORMAL | 1.42622E-07 NORMAL | NORMAL | 7.09302E-03 NORMAL | NORMAL | 7.18194E-03 NORMAL | NORMAL |
| 55 | 2.29949E+17 NORMAL | NORMAL | 2.30785E+17 NORMAL | NORMAL | 1.43553E-07 NORMAL | NORMAL | 1.42682E-07 NORMAL | NORMAL | 7.40880E-03 NORMAL | NORMAL | 7.27215E-03 NORMAL | NORMAL |
| 56 | 2.33101E+17 NORMAL | NORMAL | 2.32103E+17 NORMAL | NORMAL | 1.47802E-07 NORMAL | NORMAL | 1.47013E-07 NORMAL | NORMAL | 8.31484E-03 NORMAL | NORMAL | 8.20254E-03 NORMAL | NORMAL |
| 57 | 2.45721E+17 NORMAL | NORMAL | 2.44954E+17 NORMAL | NORMAL | 1.47875E-07 NORMAL | NORMAL | 1.47944E-07 NORMAL | NORMAL | 8.33020E-03 NORMAL | NORMAL | 8.21861E-03 NORMAL | NORMAL |
| 58 | 2.78831E+17 NORMAL | NORMAL | 2.78228E+17 NORMAL | NORMAL | 1.53063E-07 NORMAL | NORMAL | 1.51982E-07 NORMAL | NORMAL | 8.61955E-03 NORMAL | NORMAL | 8.46372E-03 NORMAL | NORMAL |
| 59 | 2.79194E+17 NORMAL | NORMAL | 2.79588E+17 NORMAL | NORMAL | 1.53153E-07 NORMAL | NORMAL | 1.52074E-07 NORMAL | NORMAL | 1.02258E-02 NORMAL | NORMAL | 1.00048E-02 NORMAL | NORMAL |
| 60 | 2.91373E+17 NORMAL | NORMAL | 2.91117E+17 NORMAL | NORMAL | 1.58654E-07 NORMAL | NORMAL | 1.57266E-07 NORMAL | NORMAL | 1.02704E-02 NORMAL | NORMAL | 1.00552E-02 NORMAL | NORMAL |
| 61 | 3.24525E+17 NORMAL | NORMAL | 3.24590E+17 NORMAL | NORMAL | 1.58879E-07 NORMAL | NORMAL | 1.57377E-07 NORMAL | NORMAL | 1.03036E-02 NORMAL | NORMAL | 1.01188E-02 NORMAL | NORMAL |
| 62 | 3.26680E+17 NORMAL | NORMAL | 3.27346E+17 NORMAL | NORMAL | 1.63497E-07 NORMAL | NORMAL | 1.62314E-07 NORMAL | NORMAL | 1.15999E-02 NORMAL | NORMAL | 1.15364E-02 NORMAL | NORMAL |
| 63 | 3.34755E+17 NORMAL | NORMAL | 3.35011E+17 NORMAL | NORMAL | 1.63628E-07 NORMAL | NORMAL | 1.62447E-07 NORMAL | NORMAL | 1.16896E-02 NORMAL | NORMAL | 1.16210E-02 NORMAL | NORMAL |
| 64 | 3.50295E+17 NORMAL | NORMAL | 3.54809E+17 NORMAL | NORMAL | 1.67943E-07 NORMAL | NORMAL | 1.68587E-07 NORMAL | NORMAL | 1.20746E-02 NORMAL | NORMAL | 1.18643E-02 NORMAL | NORMAL |
| 65 | 3.50582E+17 NORMAL | NORMAL | 3.54958E+17 NORMAL | NORMAL | 1.68099E-07 NORMAL | NORMAL | 1.68745E-07 NORMAL | NORMAL | 1.28940E-02 NORMAL | NORMAL | 1.27449E-02 NORMAL | NORMAL |
| 66 | 3.66791E+17 NORMAL | NORMAL | 3.67856E+17 NORMAL | NORMAL | 1.74123E-07 NORMAL | NORMAL | 1.73754E-07 NORMAL | NORMAL | 1.30243E-02 NORMAL | NORMAL | 1.29003E-02 NORMAL | NORMAL |
| 67 | 3.66972E+17 NORMAL | NORMAL | 3.70929E+17 NORMAL | NORMAL | 1.74305E-07 NORMAL | NORMAL | 1.73939E-07 NORMAL | NORMAL | 1.43905E-02 NORMAL | NORMAL | 1.45022E-02 NORMAL | NORMAL |
| 68 | 3.67097E+17 NORMAL | NORMAL | 3.71486E+17 NORMAL | NORMAL | 1.82529E-07 NORMAL | NORMAL | 1.81344E-07 NORMAL | NORMAL | 1.46426E-02 NORMAL | NORMAL | 1.45077E-02 NORMAL | NORMAL |
| 69 | 3.74421E+17 NORMAL | NORMAL | 3.75762E+17 NORMAL | NORMAL | 1.82737E-07 NORMAL | NORMAL | 1.81555E-07 NORMAL | NORMAL | 1.51109E-02 NORMAL | NORMAL | 1.48648E-02 NORMAL | NORMAL |
| 70 | 3.84633E+17 NORMAL | NORMAL | 3.88677E+17 NORMAL | NORMAL | 1.86823E-07 NORMAL | NORMAL | 1.88424E-07 NORMAL | NORMAL | 1.61219E-02 NORMAL | NORMAL | 1.58768E-02 NORMAL | NORMAL |
| 71 | 3.84757E+17 NORMAL | NORMAL | 3.88821E+17 NORMAL | NORMAL | 1.87062E-07 NORMAL | NORMAL | 1.88664E-07 NORMAL | NORMAL | 1.62100E-02 NORMAL | NORMAL | 1.59528E-02 NORMAL | NORMAL |
| 72 | 4.03205E+17 NORMAL | NORMAL | 4.06495E+17 NORMAL | NORMAL | 1.95912E-07 NORMAL | NORMAL | 1.97227E-07 NORMAL | NORMAL | 1.65119E-02 NORMAL | NORMAL | 1.62761E-02 NORMAL | NORMAL |
| 73 | 4.03528E+17 NORMAL | NORMAL | 4.07091E+17 NORMAL | NORMAL | 1.96181E-07 NORMAL | NORMAL | 1.97497E-07 NORMAL | NORMAL | 1.71404E-02 NORMAL | NORMAL | 1.71039E-02 NORMAL | NORMAL |
| 74 | 4.04921E+17 NORMAL | NORMAL | 4.07254E+17 NORMAL | NORMAL | 2.14944E-07 NORMAL | NORMAL | 2.25142E-07 NORMAL | NORMAL | 1.78702E-02 NORMAL | NORMAL | 1.74697E-02 NORMAL | NORMAL |
| 75 | 4.15030E+17 NORMAL | NORMAL | 4.16655E+17 NORMAL | NORMAL | 2.26111E-07 NORMAL | NORMAL | 2.25434E-07 NORMAL | NORMAL | 1.84052E-02 NORMAL | NORMAL | 1.80433E-02 NORMAL | NORMAL |
| 76 | 4.21919E+17 NORMAL | NORMAL | 4.25646E+17 NORMAL | NORMAL | 2.29049E-07 NORMAL | NORMAL | 2.28373E-07 NORMAL | NORMAL | 1.90184E-02 NORMAL | NORMAL | 1.87159E-02 NORMAL | NORMAL |
| 77 | 4.23024E+17 NORMAL | NORMAL | 4.26816E+17 NORMAL | NORMAL | 2.29390E-07 NORMAL | NORMAL | 2.28916E-07 NORMAL | NORMAL | 1.94543E-02 NORMAL | NORMAL | 1.91574E-02 NORMAL | NORMAL |
| 78 | 4.40161E+17 NORMAL | NORMAL | 4.43655E+17 NORMAL | NORMAL | 2.32483E-07 NORMAL | NORMAL | 2.31813E-07 NORMAL | NORMAL | 1.96450E-02 NORMAL | NORMAL | 1.95011E-02 NORMAL | NORMAL |
| 79 | 4.42467E+17 NORMAL | NORMAL | 4.45566E+17 NORMAL | NORMAL | 2.35598E-07 NORMAL | NORMAL | 2.34929E-07 NORMAL | NORMAL | 1.98089E-02 NORMAL | NORMAL | 1.99708E-02 NORMAL | NORMAL |
| 80 | 4.43146E+17 NORMAL | NORMAL | 4.46294E+17 NORMAL | NORMAL | 2.36002E-07 NORMAL | NORMAL | 2.35334E-07 NORMAL | NORMAL | 2.02753E-02 NORMAL | NORMAL | 2.01488E-02 NORMAL | NORMAL |
| 81 | 4.46961E+17 NORMAL | NORMAL | 4.49174E+17 NORMAL | NORMAL | 2.39212E-07 NORMAL | NORMAL | 2.38547E-07 NORMAL | NORMAL | 2.03375E-02 NORMAL | NORMAL | 2.02887E-02 NORMAL | NORMAL |
| 82 | 4.56952E+17 NORMAL | NORMAL | 4.60492E+17 NORMAL | NORMAL | 2.39693E-07 NORMAL | NORMAL | 2.39030E-07 NORMAL | NORMAL | 2.03566E-02 NORMAL | NORMAL | 2.07508E-02 NORMAL | NORMAL |
| 83 | 4.60959E+17 NORMAL | NORMAL | 4.64344E+17 NORMAL | NORMAL | 2.43027E-07 NORMAL | NORMAL | 2.42369E-07 NORMAL | NORMAL | 2.04620E-02 NORMAL | NORMAL | 2.08076E-02 NORMAL | NORMAL |
| 84 | 4.69151E+17 NORMAL | NORMAL | 4.71831E+17 NORMAL | NORMAL | 2.46417E-07 NORMAL | NORMAL | 2.45762E-07 NORMAL | NORMAL | 2.06725E-02 NORMAL | NORMAL | 2.08167E-02 NORMAL | NORMAL |
| 85 | 4.71047E+17 NORMAL | NORMAL | 4.74183E+17 NORMAL | NORMAL | 2.49879E-07 NORMAL | NORMAL | 2.49228E-07 NORMAL | NORMAL | 2.11411E-02 NORMAL | NORMAL | 2.10346E-02 NORMAL | NORMAL |
| 86 | 4.71652E+17 NORMAL | NORMAL | 4.74433E+17 NORMAL | NORMAL | 2.50555E-07 NORMAL | NORMAL | 2.49903E-07 NORMAL | NORMAL | 2.16471E-02 NORMAL | NORMAL | 2.16272E-02 NORMAL | NORMAL |
| 87 | 4.77323E+17 NORMAL | NORMAL | 4.80569E+17 NORMAL | NORMAL | 2.54149E-07 NORMAL | NORMAL | 2.53501E-07 NORMAL | NORMAL | 2.21418E-02 NORMAL | NORMAL | 2.20606E-02 NORMAL | NORMAL |
| 88 | 4.80953E+17 NORMAL | NORMAL | 4.84200E+17 NORMAL | NORMAL | 2.57831E-07 NORMAL | NORMAL | 2.57187E-07 NORMAL | NORMAL | 2.23647E-02 NORMAL | NORMAL | 2.24313E-02 NORMAL | NORMAL |
| 89 | 4.81551E+17 NORMAL | NORMAL | 4.84373E+17 NORMAL | NORMAL | 2.61621E-07 NORMAL | NORMAL | 2.60980E-07 NORMAL | NORMAL | 2.25797E-02 NORMAL | NORMAL | 2.27704E-02 NORMAL | NORMAL |
| 90 | 4.85010E+17 NORMAL | NORMAL | 4.87881E+17 NORMAL | NORMAL | 2.68418E-07 NORMAL | NORMAL | 2.67785E-07 NORMAL | NORMAL | 2.27851E-02 NORMAL | NORMAL | 2.30421E-02 NORMAL | NORMAL |
| 91 | 4.89830E+17 NORMAL | NORMAL | 4.92835E+17 NORMAL | NORMAL | 2.72540E-07 NORMAL | NORMAL | 2.71907E-07 NORMAL | NORMAL | 2.56214E-02 NORMAL | NORMAL | 2.55802E-02 NORMAL | NORMAL |
| 92 | 4.90106E+17 NORMAL | NORMAL | 4.93264E+17 NORMAL | NORMAL | 2.79442E-07 NORMAL | NORMAL | 2.78814E-07 NORMAL | NORMAL | 2.59189E-02 NORMAL | NORMAL | 2.59674E-02 NORMAL | NORMAL |
| 93 | 4.97620E+17 NORMAL | NORMAL | 5.01059E+17 NORMAL | NORMAL | 5.35250E-07 OUTLIER | NORMAL | 5.34622E-07 OUTLIER | NORMAL | 2.62840E-02 NORMAL | NORMAL | 2.93803E-02 NORMAL | NORMAL |
| 94 | 4 98082F+17 NORMAL | NORMAI | 5 01336E+17 NORMAL | NORMAI | 8 85250E-07 OUTLIER | OUTLIER | 8 84621F-07 OUTLIER | OUTHER | 3 03098F-02 NORMAI | NORMAI | 3 02032E-02 NORMAL | NORMAI |

Tabla-L.1-Parte 2

ANEXO

RESULTADOS DE LA PRUEBA DE VALORES DISCORDANTES (OUTLIERS) DE GRUBB

М

| Ca ysis Resource Cente), to determine whether | er Company | Search Sign In Support How to Buy GraphPad Prism | 6 |
|--|---|--|--------------|
| lysis Resource Cente | er Company | Support How to Buy GraphPad Prism | (|
| lysis Resource Cente | er Company | Support How to Buy | (|
| s), to determine whether | | GraphPad Prism | |
| s), to determine whether | | GraphPad Prism | |
| a), to determine whether | | Organize, analyze and | |
| e), to determine whether | | organize, analyze and | |
| e), to determine whether | | scientific data. | |
| ouuler tests, Grubbs' te | r the est only | mORE > | |
| the test again. Learn m | nore | InStat With InStat [®] vou can | |
| | P= | analyze data in a few minutes. | |
| | | MORE > | |
| | | StatMate | |
| | n= | StatMate [*] calculates sample size and power. | |
| | 12 | MORE > | |
| | ROF | Questions about curve | |
| | Ū | fitting or statistics? More > | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | (((((((((((((((((((| ele × 🛿 na × W Gr | |
| | at 📜 🔍 search | ele × W Gri Search | × – – |
| <u>Ca</u> | art 📜 Q SEARCH | ele × 8 na × W Gr Search Sign In | × • • • |
| ysis Resource Cente | er Company | de × W Gr Search Sign In Support How to Buy | × • • • |
| Car ysis Resource Cente | er Company | ile × W Gn Search Sign In Support How to Buy | |
| Car | er Company | de x 👿 na x V W Gr Search Sign In Support How to Buy | × • • • |
| <u>Ca</u> | t ∰ w × V 🛛 e ut Ț Q search ar Company | de × 💽 na × W Gri Search Support How to Buy GraphPad Prism Organize, analyze and | × • • • |
| <u>Ca</u> | ar Company | de x 💽 na x W Gri Search Support How to Buy GraphPad Prism Organize, analyze and graph and present your scientific data. | × • • • |
| ysis Resource Cente), to determine whether | the est only | de x 💽 na x W Gri Search Sign.ln Support How to Buy GraphPad Prism Organize, analyze and graph and present your scientific data. MORE_2 | |
| ysis Resource Cente), to determine whether outlier tests, Grubbs' te the test again. Learn m | er Company | de x 💽 na x W Gri Search Sign.ln Support How to Buy GraphPad Prism Organize, analyze and graph and present your scientific data. MORE 2 | |
| ysis Resource Cente), to determine whether outlier tests, Grubbs' te the test again. Learn m | r the est only nore | de x tree na x W Gri Search Sign.In Support How to Buy GraphPad Prism Organize, analyze and graph and present your scientific data. MORE ≥ InStat With InStat* you can analyze data in a few minutes | |
| ysis Resource Cente), to determine whether outlier tests, Grubbs' te the test again. Learn m | r the est only pre- | de x 💽 na x W Gri Search Sign.In Support How to Buy Organize, analyze and organize, analyze and graph and present your scientific data. MORE.2 | |
| ysis Resource Cente ysis Resource Cente), to determine whether outlier tests, Grubb's te the test again. Learn m | r the est only prore | de x 💽 na x W Gri Search Sign.In Support How to Buy Organize, analyze and graph and present your scientific data. MORE 2 InStat With InStat [*] you can analyze data in a few mainuze a | |
| ysis Resource Cente), to determine whether outlier tests, Grubb's te the test again. Learn m | r the est only nore | de x 💽 na x W Gri Search Support How to Buy GraphPad Prism Organize, analyze and graph and present your scientific data. MORE> InStat With InStat [®] you can analyze data in a few mainutes. StatMate [®] calculates StatMate [®] calculates | |
| ysis Resource Cente 2), to determine whether outlier tests, Grubbs' te the test again. Learn m | r the est only nore P= | de x 💽 na x W Gri Search Sign.In Support How to Buy Organize, analyze and graph and present your scientific data. MORE: StatMate | |
| ysis Resource Cente ysis Resource Cente t), to determine whether outlier tests, Grubbs' te the test again. Learn m | r the est only nore | te x 💽 na x W Gri Search Sign In Support How to Buy Organize, analyze and graph and present your scientific data. <u>MORE 2</u> INStat With InStat [®] you can analyze data in a few mainutes. <u>MORE 2</u> StatMate [®] calculates StatMate [®] calculates StatMate [®] 2 | |
| ysis Resource Cente), to determine whether outlier tests, Grubbs' te the test again. Learn m | r the est only present provide the set only provide the set only prov | te x 💽 na x W Gri Search Sign In Support How to Buy Organize, analyze and graph and present your scientific data. <u>MORE 2</u> InStat With InStat [®] you can analyze data in a few minutes. <u>MORE 2</u> StatMate [®] Calculates StatMate [®] calculates StatMate [®] calculates StatMate [®] calculates StatMate [®] calculates | |
| e), to determine whether the test again. Learn m | r the est only pore P= The trees to ne trees to ne trees tre | te x 💽 na x W Gri Search Sign In Support How to Buy Organize, analyze and graph and present your scientific data. MORE 2 InStat With InStat [®] you can analyze data in a few minutes. MORE 2 StatMate [®] calculates sample size and power. MORE 2 | |
| e), to determine whether outlier tests, Grubbs' te the test again. Learn m | r the est only pore P= | de x R na x W Gri Search Sign.ln Support How to Buy GraphPad Prism Organize, analyze and organ and present your scientific data: MORE 2 InStat With InStat [®] you can analyze data in a few minutes. MORE 2 StatMate [®] calculates sample size and power. MORE 2 Ouestions about curve filting or statistics? More 2 | |
| e), to determine whether outlier tests, Grubbs' te the test again. Learn m | r the est only r the est only P= N= to for to f | de x R na x W Gri Search Sign.ln Support How to Buy GraphPad Prism Organize, analyze and Organize, analyze and organize and present your scientific data. MORE 2 InStat With InStat [®] you can analyze data in a few minutes. MORE 2 StatMate [®] calculates sample size and power. MORE 2 Ouestions about curve titing or statistics? More > | |
| ysis Resource Cente), to determine whether outlier tests, Grubbs' te the test again. Learn m | r the est only nore | de × ♥ na × ₩ Gri Search Sign.ln Support How to Buy GraphPad Prism Organize, analyze and Organize, analyze and organize, analyze and organize, analyze and organize, analyze and scientific data. MORE > InStat With InStat* you can analyze data in a few minutes. MORE > StatMate StatMate StatMate StatMate StatMate StatMate StatMate StatMate Cuestions about curve fitting or addidics? More > | |
| | 8.20101.pdf | ₽= | S.20101.pdf |

ANEXO

RESULTADOS DE LA PRUEBA DE VALORES DISCORDANTES (OUTLIERS) DE GRUBB

| S of the surger of de | | | | 0-4 | () CEADOU | | Saaron |
|---|--|--|--|---|--|---|---|
| | | | | Cart | SEARCH | | Search > |
| 💏 Graph | Pad | _ | | | | | <u>Sign in i</u> |
| So | ftware | Scientific S | Software | Data Analysis Resource Center | Company | Support | How to Buy |
| Quick | Calcs | | | | | | |
| Select category | 2. Choose calculator | 3. Enter data | 4. View | results | | GraphP Organize | ad Prism analyze and |
| Dutlier Resul | ts | | | | | graph and scientific | d present your data. |
| This calculator perform most extreme value in asks whether that one about the principles of | ned Grubbs' test, also called t the list you entered is a sign value is an outlier. It is not a outlier detection and exactly | the ESD method (ext ficant outlier from the ppropriate to then ren how this test is calc | reme stude rest. Unlik nove that or ulated. | ntized deviate), to determine whether t e some other outlier tests, Grubbs' tes utlier, and run the test again. Learn mo | he t only re | MORE > | |
| Descriptive Statis | tics | | | | P= | analyze minutes. | data in a few |
| | Mean: 0.00000016212 | | | | | MORE > | |
| | SD: 0.00000010139 | | | | | StatMa | te |
| Out | ier detected? Yes | | | | n= | sample s | ize and power. |
| Signi Critic | ticance level: 0.01 (two-sided) al value of Z: 3.73203374963 |) | | | 12 | MORE > | |
| our data | | | | | ROF | Ques | tions about curve |
| Daw Volue | 7 01-141- | Dutling | | | Ċ | fitting More | or statistics? |
| 93 0.0000005353 | .67411504478 | Jutiler? | | | | | |
| 94 0.000008857 | .12625349064 Significant outl | lier. P < 0.01 | | | | | |
| Mer 1.3 x Mer 1.3 x | test.pdf Mm Imagen Mm Sig x ickcalcs/grubbs2/ | art%3A10.1007%2FB. 3 A T @ 4 M M.3 Radio | pdf • • • • • • • • • • • • • • • • • • • | 71644758.20101.pdf ************************************ | ac1951_23_636; | 13353.pdf tosjo ele × 8 | ES C V Gr. 3 |
| MET 13 x MET 13 x ugraphpad.com/qr | test.pdf The second s | art%3A10.1007%2FB. 3 A ↓ @ 4 M M.3 Radio | → 0 2 F O de I | 71644758.20101.pdf ************************************ | () sc1951_23.636 () STATL- () WW × () () WW × () () SEARCH | 13353.pdf tosjo | Español Español Rei X W Gr. 3 Search > Sign In E |
| err 13 x ver 13 x v.graphpad.com/q | test.pdf The second s | arti3A10100752FB. | o de l Gr x 2 F Gr x Software | T1644758.20101.pdf | A STATL. | 13353.pdf tosjo | ES & Works Español ES & Wign : Search > Sign In & How to Buy |
| er 72 attor • Result. • 13 x • • 13 x v.graphpad.com/q Graph So Quick | test.pdf test.pdf test.pdf test.pdf test.pdf test.pdf test.pdf test.pdf test.pdf test.pdf test.pdf test.pdf test.pdf test.pdf test.pdf test.pdf test.pdf test.pd | artisAl010075276. 3 A. Control of the Markov M.3 Radii Ou x P Re x Scientific S | o de l Gr × | TIGH4758.20101.pdf | ALISTIL23,636, ALISTATI | 13353.pdf tosjo | Es Mostri Español Es W Gr S Search S Sign In E How to Buy |
| | test.pdf test.pdf test | artisAl0100752FB. 3 A | Goftware 4. View | TIGH4758.20101.pdf TIGH4758.20101.pdf TIG 20140 TIG 20140 TI | A statt_ 23,636. | 13353.pdf tosjo sle × & Support GraphP Organize | Mostrik ES Korrish Net X W Gr > Search > Sign In £ How to Buy ad PrIsm analyze and |
| | test.pdf test.pdf test | artisAl0.100752FB. 3 A | 4. View | TIGH4758.20101.pdf TIGH4758.20101.pdf TIG 20140 Partícula — FORTF Cart Data Analysis Resource Center results | A statt_ 23,636. | 13353.pdf tosjo ele × S Support Organize graph an scientific | Mostry Mostry Mostry Search > Sign In 6 How to Buy ad Prism analyze and present your data. |
| r Result. ref 1.3 x r 1.3 x v.graphpad.com/q Graph Graph So Quick Lselect category Dutlier Result This calculator peliform asks whether that one asks whether that one asks whether that one | test.pdf | artisAl0.100752FB. M.3 Radii M.3 Radii Ou x P Re x Scientific S <u>3. Enter data</u> the ESD method (ext foant outlier fon the propriate to then en we this text is critical | Software 4. View | T1644758.20101.pdf T1644758.20101.pdf Tabla Tabl | A statt_ 23,636. A statt_ 27 A statt 77 W w × 28 Company he only re | 13353.pdf tosjo Support GraphP Organize graph an scientific MORE> InStat | Mostrix Mostrix Mostrix Mostrix Search > Sign In 6 How to Buy ad Prism analyze and present your data. |
| Arr 13 × wr 13 × w.graphpad.com/qr Graph Guick So Outlier Result This calculator perform most extreme value in asks whether that one about the principles of Descriptive Statis | test.pdf | artS3A10100752FB. 3 A Carlow Car | pdf 2 P D de l C Gr. × Software 4. View reme stude rest Unlik nove that or ulated. | TIGH4758.20101.pdf TIGH4758.2010.2010.2010.2010.2010.2010.2010.201 | A sc1951_23_636. | 13353.pdf tosjo Support GraphP Organize graph ans scientific MORE at With InS analyze • minutes. | Mostrix Mostrix Mostrix Mostrix Search > Search > Sign In g How to Buy ad Prism analyze and present your data. |
| Contraction of the provided states Contraction of the provided states Contraction of the provided states Contraction of the principles of Contraction of Contraction of Contraction of Contraction of Contraction of Contraction | test.pdf | artisAl0.00752FB. A | pdf 2 P D de l Gr × Software 4. View reme stude rest. Unlik nove that or ulated. | TIGH4758.20101.pdf TIGH4758.2010.2010.2010.2010.2010.2010.2010.201 | ALISTIZZAGA | 13353.pdf tosjo Support GraphP Graphze graph an scientific MORE> InStat With InS analyze minutes. MORE> | Mostrix Mostrix Mostrix Mostrix Mostrix Mostrix Search > Sign In £ How to Buy ad Prism analyze and present your data. tat ^e you can data in a few |
| An A and A a | text.pdf | artisAl0.100752FB. A | pdf 2 P D de l Gr × Software 4. View reme stude rest. Unlik move that or ulated. | TIGH4758.20101.pdf TIGH4758.2010.2010.2010.2010.2010.2010.2010.201 | ALISTIZZAGA ALISTATI ALISTATI ALISTATI ALISTATI ALISTATI ALISTATI ALISTATI ALISTATI Company ALISTIZZAGA Company ALISTIZZAGA Company ALISTIZZAGA Company | 13353.pdf tosjo Support GraphP Graphze graph an scientific MORE> InStat With InS analyze minutes. MORE> StatMa | Mostric ES Mostric IS Mostric Search > Sign In E How to Buy ad Prism analyze and d present your data. tat ⁶ you can data in a few te |
| Arr 12 attorn Arr 13 x Arr 13 x Arr 13 x Arr 13 x Arr 13 x Arr 13 x Arr 14 x Arr | text.pdf | artisAl0.1007527B. A | A. View 4. View reme stude rest. Unlik move that oulated. | TIGH4758.20101.pdf TIGH4758.2010.2010.2010.2010.2010.2010.2010.201 | ALISTIZZAZA | 13353.pdf tosjo support GraphP Graphan scientific MORE> InStat With InS analyze minutes. MORE> StatMat statMat sample s | Mostric Es model (Construction) Search > Search > Sign In f How to Buy ad Prism analyze and d present your data. tat ⁶ you can data in a few te * calculates ize and power. |
| Arr 13 x Arr 13 x Arr 14 x | text.pdf | arts3A101007527B. 3 A Carl and A Markov M.3 Radii Ou x P Re x Scientific S <u>3 Enter data</u> the ESD method (ext ficant outlier from the how this test is calcu | Software 4. View reme stude rest. Unlik nove that oulated. | TIGH4758.20101.pdf TIGH4758.2010.2010.2010.2010.2010.2010.2010.201 | ALISTIZZARA | 13353.pdf tosjo ele × S Support Graph P Graph an scientific MORE> InStat With InS analyze minutes. MORE> StatMate samples MORE> | Mostrix Mostrix Mostrix Mostrix Mostrix Search > Sign In f How to Buy ad PrIsm , analyze and d present your data tat ^e you can data in a few tee * calculates ize and power. |
| Arr T2 atkor Arr T2 atkor Arr T3 x Arr T3 x Arr T3 x Ar | text.pdf | arts3A1010075276. 3 A | Software 4. View reme stude rest. Unlik nove that ou | TIGH4758.20101.pdf TIGH4758.2010.2010.2010.2010.2010.2010.2010.201 | ALSSIL23,636 ALSSIATE RAN 77 WW × N Company Company P= P= R R R Company | 13353.pdf tosjo ele × S Support GraphP Organize graph ana scientific MORE> Statt MORE> StattMat StattMat StattMat | Mositic Expañol Search > Sign In @ Mositic Expañol Search > Sign In @ How to Buy ad Prism analyze and present your data tat [®] you can data in a few tee f [®] calculates isize and power. |
| The second | text.pdf | artisAl0.1007/s2FB. M.3 Radii M.3 Radii Ou x PRe x Scientific S <u>3 Enter data</u> the ESD method (ext how this test is calcr how this test is calcr | pdf 2 P D de l Gr × Coftware 4. View reme stude rest. Unlik nove that oulated. | TIGH4758.20101.pdf TIGH4758.2010.2010.2010.2010.2010.2010.2010.201 | ALSSIL23,636 ALSSIATE RAN 77 WW × V N Company Performance Company Performance Performanc | 13353.pdf tosjo de × 8 Support GraphP Organize graph ans scientific MORE.2 StatMat StatMat StatMat StatMat StatMat StatMat StatMat | Mositic Search > Sign In 6 Search > Sign In 6 How to Buy ad Prism , analyze and d present your data, tat ⁶ you can data in a few te for calculates size and power. ions about curve or statistics? |
| Arr Ti avon Arr Ti avon Arr Ti av Arr Ti avon Arr Ti av Arr Ti avon Arr Ti av Arr Ti avon Arr Ti avon A | text.pdf | artisAl0.0075276. | A View reme stude rest unlik nove that ou ulated | TIGH4758.20101.pdf TIGH4758.2010.2010.2010.2010.2010.2010.2010.201 | ALSSIL23,636 ALSTATION CONTRACTOR RAN 77 WW × V 10 Company Company P= P= N= Company P= Company | 13353.pdf tosjo Support GraphP Organize graph an scientific MORE 2 StatMat StatMate sample s MORE 2 | Control of the second sec |
| r vigraphpad.com/q vigraphpad.com/q | text.pdf | artisAl0.1007527B. 3 A | A. View 4. View 4. View reme stude rest. Unlik nove that out | TIGH4758.20101.pdf TIGH4758.2010.2010.2010.2010.2010.2010.2010.201 | ALSSIL23,636 ALSSIATE RAN 77 WW × W Company P= Company P= P= N= Company | 13353.pdf tosjo de × S Support GraphP Organize graph ans scientific MORE.2 StatMat StatMa | Mostrix Mostrix Mostrix Mostrix Mostrix Mostrix Search > Sign In @ Mostrix Mostrix Mostrix Mostrix Search > Sign In @ Mostrix Mostrix Mostrix ad PrIsm analyze and present your data analyze and present your data tat [®] you can data in a few te * calculates size and power. tions about curve or statistics? |
| Result | text.pdf | artisAl0.1007527B. 3 A Carlor of a Markov M.3 Radii M.3 Radii Scientific S <u>3. Enter data</u> the ESD method (ext ficant outlier from the propriate to though outlier from the how this test is calci- boutier? ier. P < 0.01 | pdf 2 P D de Core Gr. × Software 4. View reme stude rest. Unlik move that or ulated. | TIGH4758.20101.pdf TIGH4758.2010.2010.2010.2010.2010.2010.2010.201 | e acl951_23_636 ALSTATI COMPANY Company P= Company P= P= Company P= Company | 13353.pdf tosjo Support GraphP GraphP graph and scientific MORE 2 StatMate | Constant of the second se |

ANEXO

RESULTADOS DE LA PRUEBA DE VALORES DISCORDANTES (OUTLIERS) DE GRUBB

М

| C Nwww.graphpad.com/g | ulcklaics/ulubbsz/ | | | | | | | S 8 |
|--|--|---|--|--|--|--|--|---|
| • • • • • | | | | | Cart 👅 🔍 SE/ | RCH | Search > | |
| | | | | | | | Sign In 6 |) |
| Staph | Pad | 0.1.15 | | | | 0 | | |
| | | Scientific S | ontware | Data Analysis Resource Cel | nter Compar | y Support | How to Buy | |
| Quick | Calcs | | | | | | | |
| 1. Select category | 2 Choose calculator | 3 Enter data | 4 View | results | | Graph | Pad Prism | |
| Outlier Resul | te | <u>er enter oute</u> | | | - | Organiz graph a | e, analyze and nd present your | |
| This calculator perform | ned Grubbs' test, also called th | e ESD method (extr | eme studer | ntized deviate) to determine whet | her the | scientifi MORE > | c data. | |
| most extreme value in | the list you entered is a signifi- | cant outlier from the | rest. Unlike | some other outlier tests, Grubbs | ' test only | Inches | | |
| about the principles of | foutlier detection and exactly h | now this test is calcu | lated. | nier, and fuir the test again. Lean | | With In | Stat [®] you can | |
| Descriptive Stati | stics | | | | P | analyze minutes | e data in a few s. | |
| | Mean: 0.00828858007 | | | | | MORE > | | |
| | SD: 0.00882213298 | | | | | StatM | ate | |
| Out | # of values: 94 lier detected? No | | | | n | StatMa sample | te ^e calculates size and power. | |
| Sigr | ificance level: 0.01 (two-sided) | | | | | MORE > | | |
| Chu | cal value of 2. 5./ 52055/4505 | | | | 20 | E - | | |
| Your data | | | | | 5 | Que | stions about curve ng or statistics? | |
| Row Value | Z Significant O | utlier? | | | | Mor | | |
| 1 0.000000000 2 0.000005850 0 | 93952109833 93885799792 | | | | | | | |
| 3 0.0000065960 | 93877339139 | | | | | | | |
| 5 0.0000093070 | 93846617544 | | | | | | | |
| 6 0 000011220 0 | 93824930839 | 249/2010 10079/2EP | ndf v | T1614759 20101 ndf | | 626 12252 ndf | * E Marte | |
|) | 3 M • • nucsil 53 3 Image | A ▼ 12 4 M en M.5 N Ou × 20 Re × | × ¥3P lasa ∕∢Gr.× | am ▼ Tablam 20140 Fotal — FORTRA | ₩ STATI N 77 × ₩ ₩ × | ele × | na x W Gr x | ▲ 型 11 🚽 🕼 (© 07:29 p. ▲ |
| Image: Contract of the second seco | 3 May 20 Russilan 23 A | A ▼ 10 4 M en M.5 N Ou × | 1asa [–] (2 Gr. × | In an antiple and a second se | X 5TATL X 77 X 10 wv X Cart Q 5E | RCH | nal × W Gr > | 2 11 0 07:29 p. |
| 7 ■ @ 2 *** 13 × **** 13 × **** 13 * 7 n. × ***** 13 × ***** 13 × *************** | 3 M Y to nucil 3 Image Y N. x Y Sig x Y uickcalcs/grubbs2/ | A ▼ | 1asa ⁻ <i>©</i> Gr. × | | ▲ STATL ▲ N 77 × ⊕ wv × Cart ; Q SE | 2 ² tosjo 8 ele × V 8 sRCH | LS ■ < | 1 1< |
| Image: Contract of the second seco | 3 M. V to rucal. 43 Image V N × V Sig × V uickcalcs/grubbs2/ Pad ftware | A Y Mu 4 Mu en M.5 V Ou X Ø Re X | 1asa • Gr × | Total – FORTRA | X 77 X 77 X 79 WV X Cart Q SE | RCH | Is a K W Gr > | 2 19 1 1 1 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 |
| Image: Contract of the sector of the sec | 3 M V In nuceil 43 Image V N X X N Sig X V uickcales/grubbs2/ Pad ftware | A Y M. 4 M en M.5 N Ou X Ø Re X Scientific S | ase 1asa ↓ Gr. × Goftware | Total – FORTRA | A STAT | RCH Support | tS ■ 《 , , , , , , , , , , , , , , , , , , | Image: A state of the state of |
| Image: Contract of the sector of the sec | 3 Mar V An ruceila 43 Image V Na × V Sig × V uickcales/grubbs2/ Pad ftware | A Y 4 Mar. en M.5 N Ou X P Re X Scientific S | a s P 1asa [–] (a gr. × | Total – FORTRA | Cart Compar | kosjo 8 ele × 8 NRCH NRCH | na × W Gr. > Search > Sign In fi How to Buy | • • • • • • • • • • • • • • • • • • • |
| Tr: x ver 13 x ver 1 | 3 Mar V An rursila 43 Image V An X Sig X A uickcales/grubbs2/ Pad ftware Calcs 2. Choose calculator | A × • • 4 M en M.5 N Ou × • • Re × Scientific S 3. Enter data | 1asa Gr. × Software 4. View | Total – FORTRA | A STATI AN 77 | RCH | na × W Gr. > Search > Sign In 6 How to Buy Pad Prism | |
| Tr: x ≪ 13 x ≪ 13 x ≪ 13 x → C www.graphpad.com/q C www.graphpad.com/q C Science C Science | 3 Mar V An ruceila 43 Image Image Vickcales/grubbs2/ Pad ftware Calcs 2. Choose calculator | A × 24 Mar. en M.5 N Ou × 26 Re × Scientific S 3. Enter data | A. View | Total – FORTRA | AN 77 XN 77 X O w X Cart Q SE nter Compar | g ² tosja <u>8</u> de × <u>8</u> RCH y Support Organiz grapha | Ina × W Gr. > Search > Sign In 6 How to Buy Pad Prism e, analyze and nd present your | |
| Tr: x (we 13 x (we 13 x (we 13 x) → C () www.graphpad.com/q www.graphpad.com/q C () www.graphpad.com/q C () wwww.graphpad.com/q C () www.graphpad.com/q C () www.gr | 3 Mar V An rucsila. 43 Image Image Vickcales/grubbs2/ Pad ftware Calcs 2. Choose calculator ts ned Grubbs' test, also called th | A × I 4 M en M.5 N Ou × I I Re x Scientific S 3. Enter data | A. View | Total – FORTRA | AN 77 XN 77 X 0 w X Cart Q SE nter Compar her the | z² torgo Rele × R ARCH y Support Graphi Graphi Graphi MORE2 | Ina × W Gr → Search → Sign In 6 How to Buy Pad Prism ie, analyze and nd present your c data. | |
| Tr: x ver 13 | 3 May of the nucellar Additional | A × • • 4 M en M.5 N Ou × • • Re × Scientific S <u>3. Enter data</u> the ESD method (extr cant outlier from the propriate to the the | Gr. × Software 4. View reme studer rest. Unlike rove that our | Total – FORTRA Total – FORTRA www.x. www.x. d. do Data Analysis Resource Cel results tized deviate), to determine whet some other outlier tests, Grubba | AN 77 XN 77 X 0 w x X Cart 2 Q SEA nter Compar her the i test only more | 2 togo e e x E RCH y Support Graphi graph a KORE2 InStat | Ina × W Gr → Search → Sign In 6 How to Buy Pad Prism re, analyze and nd present your c data. | |
| Tr: x we 13 x we 13 x we 13 x C www.graphpad.com/g C www.graphpad.com/g C www.graphpad.com/g C Score C C C Www.graphpad.com/g C C C C C C C C C C C C C C C C C C C | 3 May of the nucellar Additional | A × • • • • • • • • • • • • • • • • • | Goftware 4. View reme studer rest. Unlikk rove that ou plated. | Total – FORTRA Total – FORTRA WW × WW × C do Data Analysis Resource Cel results tized deviate), to determine whet some other outlier tests, Grubbs tier, and run the test again. Lear | A STATU AN 77 × @ wv × Cart Q SEA nter Compar her the ' test only more | 2 togo. Reference of togo. RCH y Support Graphia graph a scientifi MORE2 UNIT | Ina X W Gr 3 Search 3 Sign In 6 How to Buy Pad Prism re, analyze and nd present your c data. | |
| Tr: x (we 13 x (we 13 x (we 13 x) we 13 x) we 13 x (we 13 x) we 13 x (we 13 x) we 13 x | 3 May of the nucellar Additional | A Y 4 Man en M.5 N Ou X % Re X Scientific S 3. Enter data re ESD method (extr cant outlier from the propriate to the from the from the propriate to the from the from the from the propriate to the from the from the from the from the from the propriate to the from the fr | Goftware 4. View reme studer rest. Unlike toose that ou lated. | Tebla. | AN 77 XN 77 X @ wv X Cart Q SE Anter Compar her the i test only nore P | 2 togo. RCH y Support Graph graph as scientifi MORE 2 InStat With Ini analyze minutes | Ina × WG n > Search > Sign In 6 How to Buy Pad Prism e, analyze and nd present your c data. Stat [®] you can d data in a few s. | |
| Tr: x (we 13 x (we 13 x (we 13 x) we 13 x) we 13 x (we 13 x) we 13 x | 3 May of the nucellar (1) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2 | A Y 4 Man en M.5 N Ou X 2 Re X Scientific S 3. Enter data re ESD method (extr cant outlier from the propriate to the from the from the from the from the propriate to the from the from the from the from the from the propriate to the from the fr | Gr x Coftware 4. View reme studer reme studer reme studer rest. Unlike ove that ou ulated. | Tebla. | AN 77 XN 77 X @ w X Cart Q SE Anter Compar her the i test only nore P | 2 togo. RCH y Support Graph graph as scentifi MORE 2 With Int analyze MORE 2 | Ina × W Gr > Search > Sign.In 6 How to Buy Pad Prism e, analyze and nd present your c data. Stat [®] you can d data in a few s. | |
| Tr: x (see 13 x (see 13 x (see 13 x) see 13 x) see 13 x (see 13 x) see 13 x (see 13 x) see 13 x) see 13 x) see 13 x (see 13 x) see 13 x) see 13 x (see 13 x) see | 3 May of the nucellar Additional | A Y 4 Man en M.5 N Ou X 2 Re X Scientific S 3. Enter data re ESD method (extr cant outlier from the propriate to full from the full from the full from the propriate to full from the full from the propriate to full from the full | Coftware 4. View reme studer reme studer rest. Unlike nove that ou ulated. | Total – FORTRA Total – FORTRA WW × WW × C do Data Analysis Resource Cer results tized deviate), to determine whet some other outlier tests, Grubbs tier, and run the test again. Lean | A STATU AN 77 × @ w × Cart Q SE nter Compar her the i test only nore | 2 togo. RCH y Support Graph Graph Graph MORE 2 UNT IN MORE 2 StatM | In a X W Gr > Search > Sign.In 6 How to Buy Pad Prism e, analyze and nd present your c data. Stat ⁹ you can d data in a few s. | |
| Tr: x (wi 13 x (wi 13 x (wi 13 x) wi 13 x) wi 13 x (wi 13 x) wi 13 x | 3 May of the nucellar (1) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2 | A Y 4 Mar. en M.5 N 0 Y Re X Scientific S 3. Enter data He ESD method (extr cant outlier from here propriate to the here propriate to the here now this test is calcu | A View 4. View 4. View reme studer rest. Unlike nove that ou ulated. | Total – FORTRA Total – FORTRA WW × WW × C do Data Analysis Resource Cer results tized deviate), to determine whet some other outlier tests, Grubbs tier, and run the test again. Lean | A STATU AN 77 X @ w X Cart Q SE nter Compar her the i test only nmore P | 2 togo. RCH y Support Graph Scraph MORE 2 With In analyze minutes StatMa sample | In a X W Gr > Search > Sign In 6 How to Buy Pad Prism e. analyze and nd present your c data. Stat ^e you can e data in a few s. E ^e calculates size and power. | |
| Tr: x (we 13 x (we 13 x (we 13 x) we 13 x) we 13 x (we 13 x) we 13 x | 3 May of the nucellar (1) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2) (2 | A Y I d Man en M.5 N Ou X PR X Scientific S <u>3. Enter data</u> He ESD method (extr cant outlier from here propriate to the nere now this test is calcu | Coftware 4. View reme studer rest. Unlike rove that ou ulated. | Total – FORTRA Total – FORTRA WW × WW × C do Data Analysis Resource Cer results tized deviate), to determine whet some other outlier tests, Grubbs tier, and run the test again. Lean | A STATU AN 77 X @ w X Cart P Q SE nter Compar her the i test only nmore P | 2 togo. RCH y Support Graph Scentific MORE 2 StatMa StatMa StatMa StatMa | In a X W Gr > Search > Sign In 6 How to Buy Pad Prism e. analyze and nd present your c data. Stat [®] you can e data in a few s. Attention a few s. attention a few s. | |
| Tr: x (we 13 x (we 13 x (we 13 x) we 13 x) we 13 x (we 13 x) we 13 x | 3 May of the nucellar (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) (1) | A Y I d Man en M.5 N Ou X PR X Scientific S 3. Enter data the ESD method (extr cant outlier from the propriate to the neme now this test is calcu | Coftware 4. View reme studer rest. Unlike nove that ou lated. | Total – FORTRA Total – FORTRA WW × WW × C do Data Analysis Resource Cer results tized deviate), to determine whet some other outlier tests, Grubbs tier, and run the test again. Lean | A STATU AN 77 X @ w X Cart P Q SE nter Compar her the i test only nmore P Cart P Compar her the i test only more P | 2 togo. RCH y Support Graph Scraph MORE 2 With In analyze minutes StatMa StatMa StatMa StatMa | In a X W Gr > Search > Sign In 6 How to Buy Pad Prism e. analyze and nd present your c data. Stat [®] you can e data in a few s. Et [®] calculates size and power. | |
| Tr: x (we 13 x (we 13 x (we 13 x) we 13 x) we 13 x (we 13 x) we 13 x | 3 May of the notestile 43 Image Ima | A Y 4 Mar. en M.5 N Ou X 2 Re X Scientific S 3. Enter data re ESD method (extr cant outlier from the propriate to fuel from the fuel from the fuel from the propriate to fuel from the fuel from the propriate to fuel from the fuel | Coftware | Total — FORTRA Total — FORTRA WW X WW X O do Data Analysis Resource Cer results tized deviate), to determine whet i some other outlier tests, Grubbs tier, and run the test again. Lean | A STATU AN 77 X @ w X Cart Q SE Anter Compar Anter Compar | 2 togo. RCH y Support Graph Graph Graph MORE 2 With In analyze MORE 2 StatM StatMa StatMa StatMa StatMa StatMa StatMa MORE 2 StatMa StatMA StatMa StatMa | In a X W Gr > Search > Sign.In 6 How to Buy Pad Prism e. analyze and nd present your c data. Stat [®] you can data in a few s. Stat [®] you can data in a few s. Stat [®] you can data in a few s. | |
| Tr. x (see 13 x (see 13 x (see 13 x) see 13 x) see 13 x (see 13 x) see 13 x) see 13 x (see 13 x) see 13 x) see 13 x (see 13 x) see | 3 May 1 An nucellar 4 3 Image | Am Y I d Mm en M.5 N Ou X P Re X Scientific S 3. Enter data re ESD method (extr cant outlier from the propriate to fuel from the fuel for the fuel for the fuel for the fuel for the fuel for the fuel for the fuel for the fuel for the fuel for the fuel for the fuel for the fuel for th | Coftware | Total — FORTRA Total — FORTRA WW X WW X O do Data Analysis Resource Cer results tized deviate), to determine whet i some other outlier tests, Grubbs tier, and run the test again. Lean | A STATU AN 77 X @ w X Cart Q SE her the i test only nore P P | 2 togo. RCH y Support Graph Graph Graph MORE 2 With In analyze MORE 2 StatM StatM StatM StatM StatM MORE 2 StatM | In a X W Gr > Search > Sign In 6 How to Buy Pad Prism e. analyze and nd present your c data. Stat [®] you can data in a few s. Stat [®] you can data in a few s. Stat [®] you can data in a few s. | |
| Tr. x (we 13 x (we 13 x (we 13 x) we 13 x) we 13 x (we 13 x) we 13 x | 3 May of the notestile 4 3 Image Im | Am Y I d Mm en M.5 N Ou X P Re X Scientific S 3. Enter data re ESD method (extr cant outlier from the propriate to fuel from the fuel from the propriate to fuel from the propriate to fuel from the proprise to fuel from the propriate to fuel fr | Coftware | Total — FORTRA Total — FORTRA WW X WW X O do Data Analysis Resource Cer results tized deviate), to determine whet i some other outlier tests, Grubbs tier, and run the test again. Lear | A STATU AN 77 X @ w X Cart Q SE nter Compar her the i test only nore P P | 2 togo. RCH y Support Graph Graph Graph MORE 2 UNTH IN ANNE 2 StatM S | search > Search > Sign In 6 How to Buy Pad Prism e. analyze and dpresent your c data. Stat [®] you can e data in a few s. ate te [®] calculates size and power. ations about curve go r statistics? e> | |
| Tr: X we 13 x we 13 x we 13 x C we 13 x we 13 x we 13 x we 13 x C we we 13 x we 13 x we 13 x C we we 13 x we 13 x we 13 x C we we 13 x we 13 x we 13 x C we we 13 x we 13 x we 13 x C we we 13 x we 13 x we 13 x C we we 13 x we 13 x we 13 x C we we 13 x we 13 x we 13 x C we we 13 x we 13 x we 13 x C we we 13 x we 13 x we 13 x C we we 13 x we 13 x we 13 x C we we shall be a we have a w | 3 May 1 An nucellar 4 3 Image | Am Y I Ham en M.5 N Qu X Re X Scientific S 3. Enter data re ESD method (extr cant outlier from the propriate to then rem now this test is calcu utlier? | Gr x Coftware 4. View reme studer rest. Unlike nove that our ulated. | Total — FORTRA Total — FORTRA WW X WW X O do Data Analysis Resource Cel results tized deviate), to determine whet i some other outlier tests, Grubbs thier, and run the test again. Lear | AN 77 XN 77 X @ wv X Cart Q SE nter Compar her the i test only nore P | 2 togo. RCH y Support Graph Graph Graph Science UNT In Science StatMe StatMe StatMe StatMe StatMe StatMe MORE 2 CH CH CH CH CH CH CH CH CH CH | It's a kinet of the second sec | |
| Tr. X we 13 x we 13 x we 13 x C we 13 x we 13 x we 13 x we 13 x C www.graphpad.com/q C www.graphpad.com/q C www.graphpad.com/q C utiler Resul Tris calculator perform most extreme value in asks whether that on about the principles c Descriptive Stati Vour data Row Value 1 0.000005313 0 0.000005480 2 0.000005480 2 0.000005480 2 0.000005480 3 0.00005480 3 0.000005480 3 0.000005480 3 0.00005480 3 0.0005480 3 0.00005480 3 0.00005480 3 0.00005480 3 0.00005480 3 0.00005480 3 0.00005480 3 0.00005480 3 0.00005480 3 0.00005480 3 0.0005480 3 0.00005480 3 0.00005480 3 0.0005480 3 0.000548 | 3 May 1 An nucellar 4 3 Image | Am Y 4 Man en M.5 N (0) X 2 Re X Scientific S 3. Enter data the ESD method (extr cant outlier from the propriate to then rem now this test is calcu utlier? | Coftware | Total — FORTRA Total — FORTRA | AN 77 XN 77 X @ wv X Cart Q SE nter Compar her the i test only nore P | 2 togio 2 togio 3 ete x 2 4 Craph 4 Crapha 5 Certafi 4 Crapha 5 Certafi 4 Crapha 5 Certafi 4 Crapha 5 Certafi 4 Crapha 5 Certafi 4 Crapha 5 Certafi 4 Corganiz 5 Certafi 5 Certafi | It's a constant of the second | |
| Tr: X wit 13 | 3 May 1 An nucellar 2 3 Image | Am Y I Ham en M.5 N Qu X Re X Scientific S 3. Enter data re ESD method (extr cant outlier from the propriate to then rem now this test is calcu utlier? | Coftware A. View Coftware Coftwar | Total — FORTRA Total — FORTRA | A STATU AN 77 X @ w X Cart Q SE nter Compar her the i test only nmore P Cart Q SE her the i test only nore P | 2 togo. RCH y Support Graph Graph Graph MORE 2 INStat MORE 2 StatMa | It's an example of the second | |
| Tr. × (wer 13 × (wer 13 × (wer 13 ×) → C → www.graphpad.com/q www.graphpad.com/q C → www.graphpad.com/q C → www.graphpad.com/q C → C → www.graphpad.com/q C → wwww.graphpad.com/q C → www.grap | 3 May 1 An nucellar 4 3 Image | Am + @ 4 Mm en M.5 N ou × PR x Scientific S 3. Enter data the ESD method (extr cant outlier from the reant outlie | Coftware | Total FORTRA Total FORTRA Image: Second S | A STATU AN 77 X O w X Cart Q SE nter Compar her the i test only more P Cart Q SE her the i test only nore P | 2 togio RCH y Support Grapha scientifi MORE 2 MORE 2 StatMa | It's an example of the second | er todas las descargas |

HISTOGRAMAS DE DISTRIBUCION DE LOS RESULTADOS DE LA PRUEBA DE VALORES DISCORDANTES (OUTLIERS) - FORTRAN 77 Y MATLAB 7



VALORES CRITOCOS PRUEBA F - N.C. 95%

0

Tabla-O.1-Valores críticos para la distribución F para el nivel de significancia de 0.5 (nivel de confianza de 95%) (tomados de la Tabla A2 de Verma, 2005) $[v_l = grados \ de \ libertad \ del \ numerador; v_2 = grados \ de \ libertad \ del \ denominador]$

| ν_2 | $ v_1 ^1$ | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 15 | 20 | 25 | 30 | 40 | 50 | 100 | 1000 | эc |
|---------|------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|------|
| 1 V | 161.4 | 199.5 | 215.7 | 224.6 | 230.2 | 234.0 | 236.8 | 238.9 | 240.5 | 241.9 | 243.0 | 243.9 | 246.0 | 248.0 | 249.3 | 250.1 | 251.2 | 251.8 | 253.0 | 254.2 | 254 |
| 2 | 18.51 | 19.00 | 19.16 | 19.25 | 19.30 | 19.33 | 19.35 | 19.37 | 19.38 | 19.40 | 19.40 | 19.41 | 19.43 | 19.45 | 19.46 | 19.46 | 19.47 | 19.48 | 19.49 | 19.50 | 19.5 |
| 3 | 10.13 | 9.55 | 9.28 | 9.12 | 9.01 | 8.94 | 8.89 | 8.85 | 8.81 | 8.79 | 8.76 | 8.74 | 8.70 | 8.66 | 8.63 | 8.62 | 8.59 | 8.58 | 8.55 | 8.53 | 8.53 |
| 4 | 7.71 | 6.94 | 6.59 | 6.39 | 6.26 | 6.16 | 6.09 | 6.04 | 6.00 | 5.97 | 5.94 | 5.91 | 5.86 | 5.80 | 5.77 | 5.74 | 5.72 | 5.70 | 5.66 | 5.63 | 5.63 |
| 5 | 6.61 | 5.79 | 5.41 | 5.19 | 5.05 | 4.95 | 4.88 | 4.82 | 4.77 | 4.73 | 4.70 | 4.68 | 4.62 | 4.56 | 4.52 | 4.50 | 4.46 | 4.44 | 4.41 | 4.37 | 4.37 |
| 6 | 5.99 | 5.14 | 4.76 | 4.53 | 4.39 | 4.28 | 4.21 | 4.15 | 4.10 | 4.06 | 4.03 | 4.00 | 3.94 | 3.87 | 3.84 | 3.81 | 3.77 | 3.75 | 3.71 | 3.67 | 3.67 |
| 7 | 5.59 | 4.74 | 4.35 | 4.12 | 3.97 | 3.87 | 3.79 | 3.73 | 3.68 | 3.64 | 3.60 | 3.57 | 3.51 | 3.44 | 3.40 | 3.38 | 3.34 | 3.32 | 3.27 | 3.23 | 3.23 |
| 8 | 5.32 | 4.46 | 4.07 | 3.84 | 3.69 | 3.58 | 3.50 | 3.44 | 3.39 | 3.35 | 3.31 | 3.28 | 3.22 | 3.15 | 3.11 | 3.08 | 3.04 | 3.02 | 2.97 | 2.93 | 2.93 |
| 9 | 5.12 | 4.26 | 3.86 | 3.63 | 3.48 | 3.37 | 3.29 | 3.23 | 3.18 | 3.14 | 3.10 | 3.07 | 3.01 | 2.94 | 2.89 | 2.86 | 2.83 | 2.80 | 2.76 | 2.71 | 2.71 |
| 10 | 4.96 | 4.10 | 3.71 | 3.48 | 3.33 | 3.22 | 3.14 | 3.07 | 3.02 | 2.98 | 2.94 | 2.91 | 2.85 | 2.77 | 2.73 | 2.70 | 2.66 | 2.64 | 2.59 | 2.54 | 2.54 |
| 11 | 4.84 | 3.98 | 3.59 | 3.36 | 3.20 | 3.09 | 3.01 | 2.95 | 2.90 | 2.85 | 2.82 | 2.79 | 2.72 | 2.65 | 2.60 | 2.57 | 2.53 | 2.51 | 2.46 | 2.41 | 2.40 |
| 12 | 4.75 | 3.89 | 3.49 | 3.26 | 3.11 | 3.00 | 2.91 | 2.85 | 2.80 | 2.75 | 2.72 | 2.69 | 2.62 | 2.54 | 2.50 | 2.47 | 2.43 | 2.40 | 2.35 | 2.30 | 2.30 |
| 13 | 4.67 | 3.81 | 3.41 | 3.18 | 3.03 | 2.92 | 2.83 | 2.77 | 2.71 | 2.67 | 2.63 | 2.60 | 2.53 | 2.46 | 2.41 | 2.38 | 2.34 | 2.31 | 2.26 | 2.21 | 2.21 |
| 14 | 4.60 | 3.74 | 3.34 | 3.11 | 2.96 | 2.85 | 2.76 | 2.70 | 2.65 | 2.60 | 2.57 | 2.53 | 2.46 | 2.39 | 2.34 | 2.31 | 2.27 | 2.24 | 2.19 | 2.14 | 2.13 |
| 15 | 4.54 | 3.68 | 3.29 | 3.06 | 2.90 | 2.79 | 2.71 | 2.64 | 2.59 | 2.54 | 2.51 | 2.48 | 2.40 | 2.33 | 2.28 | 2.25 | 2.20 | 2.18 | 2.12 | 2.07 | 2.07 |
| 16 | 4.49 | 3.63 | 3.24 | 3.01 | 2.85 | 2.74 | 2.66 | 2.59 | 2.54 | 2.49 | 2.46 | 2.42 | 2.35 | 2.28 | 2.23 | 2.19 | 2.15 | 2.12 | 2.07 | 2.02 | 2.01 |
| 17 | 4.45 | 3.59 | 3.20 | 2.96 | 2.81 | 2.70 | 2.61 | 2.55 | 2.49 | 2.45 | 2.41 | 2.38 | 2.31 | 2.23 | 2.18 | 2.15 | 2.10 | 2.08 | 2.02 | 1.97 | 1.96 |
| 18 | 4.41 | 3.55 | 3.16 | 2.93 | 2.77 | 2.66 | 2.58 | 2.51 | 2.46 | 2.41 | 2.37 | 2.34 | 2.27 | 2.19 | 2.14 | 2.11 | 2.06 | 2.04 | 1.98 | 1.92 | 1.92 |
| 19 | 4.38 | 3.52 | 3.13 | 2.90 | 2.74 | 2.63 | 2.54 | 2.48 | 2.42 | 2.38 | 2.34 | 2.31 | 2.23 | 2.16 | 2.11 | 2.07 | 2.03 | 2.00 | 1.94 | 1.88 | 1.88 |
| 20 | 4.35 | 3,49 | 3.10 | 2.87 | 2.71 | 2.60 | 2.51 | 2.45 | 2.39 | 2.35 | 2.31 | 2.28 | 2.20 | 2.12 | 2.07 | 2.04 | 1.99 | 1.97 | 1.91 | 1.85 | 1.84 |
| 21 | 4.32 | 3.47 | 3.07 | 2.84 | 2.68 | 2.57 | 2.49 | 2.42 | 2.37 | 2.32 | 2.28 | 2.25 | 2.18 | 2.10 | 2.05 | 2.01 | 1.96 | 1.94 | 1.88 | 1.82 | 1.81 |
| 22 | 4.30 | 3.44 | 3.05 | 2.82 | 2.66 | 2.55 | 2.46 | 2.40 | 2.34 | 2.30 | 2.26 | 2.23 | 2.15 | 2.07 | 2.02 | 1.98 | 1.94 | 1.91 | 1.85 | 1.79 | 1.78 |
| 23 | 4.28 | 3.42 | 3.03 | 2.80 | 2.64 | 2.53 | 2.44 | 2.37 | 2.32 | 2.27 | 2.24 | 2.20 | 2.13 | 2.05 | 2.00 | 1.96 | 1.91 | 1.88 | 1.82 | 1.76 | 1.76 |
| 24 | 4.26 | 3.40 | 3.01 | 2.78 | 2.62 | 2.51 | 2.42 | 2.36 | 2.30 | 2.25 | 2.22 | 2.18 | 2.11 | 2.03 | 1.97 | 1.94 | 1.89 | 1.86 | 1.80 | 1.74 | 1.73 |
| 25 | 4.24 | 3.39 | 2.99 | 2.76 | 2.60 | 2.49 | 2.40 | 2.34 | 2.28 | 2.24 | 2.20 | 2.16 | 2.09 | 2.01 | 1.96 | 1.92 | 1.87 | 1.84 | 1.78 | 1.72 | 1.71 |
| 26 | 4.23 | 3.37 | 2.98 | 2.74 | 2.59 | 2.47 | 2.39 | 2.32 | 2.27 | 2.22 | 2.18 | 2.15 | 2.07 | 1.99 | 1.94 | 1.90 | 1.85 | 1.82 | 1.76 | 1.70 | 1.69 |
| 27 | 4.21 | 3.35 | 2.96 | 2.73 | 2.57 | 2.46 | 2.37 | 2.31 | 2.25 | 2.20 | 2.17 | 2.13 | 2.06 | 1.97 | 1.92 | 1.88 | 1.84 | 1.81 | 1.74 | 1.68 | 1.67 |
| 28 | 4.20 | 3.34 | 2.95 | 2.71 | 2.56 | 2,45 | 2.36 | 2.29 | 2.24 | 2.19 | 2.15 | 2.12 | 2.04 | 1.96 | 1.91 | 1.87 | 1.82 | 1.79 | 1.73 | 1.66 | 1.65 |
| 29 | 4.18 | 3.33 | 2.93 | 2.70 | 2.55 | 2.43 | 2.35 | 2.28 | 2.22 | 2.18 | 2.14 | 2.10 | 2.03 | 1.94 | 1.89 | 1.85 | 1.81 | 1.77 | 1.71 | 1.65 | 1.64 |
| 30 | 4.17 | 3.32 | 2.92 | 2.69 | 2.53 | 2.42 | 2.33 | 2.27 | 2.21 | 2.16 | 2.13 | 2.09 | 2.01 | 1.93 | 1.88 | 1.84 | 1.79 | 1.76 | 1.70 | 1,63 | 1.62 |
| 35 | 4.12 | 3.27 | 2.87 | 2.64 | 2.49 | 2.37 | 2.29 | 2.22 | 2.16 | 2.11 | 2.07 | 2.04 | 1.96 | 1.88 | 1.82 | 1.79 | 1.74 | 1.70 | 1.63 | 1.57 | 1.54 |
| 40 | 4.08 | 3.23 | 2.84 | 2.61 | 2.45 | 2.34 | 2.25 | 2.18 | 2.12 | 2.08 | 2.04 | 2.00 | 1.92 | 1.84 | 1.78 | 1.74 | 1.69 | 1.66 | 1.59 | 1.52 | 1.51 |
| 50 | 4.03 | 3.18 | 2.79 | 2.56 | 2.40 | 2.29 | 2.20 | 2.13 | 2.07 | 2.03 | 1.99 | 1.95 | 1.87 | 1.78 | 1.73 | 1.69 | 1.63 | 1.60 | 1.52 | 1.45 | 1.44 |
| 60 | 4.00 | 3.15 | 2.76 | 2.53 | 2.37 | 2.25 | 2.17 | 2.10 | 2.04 | 1.99 | 1.95 | 1.92 | 1.84 | 1.75 | 1.69 | 1.65 | 1.59 | 1.56 | 1.48 | 1.40 | 1.39 |
| 80 | 3.96 | 3.11 | 2.72 | 2.49 | 2.33 | 2.21 | 2.13 | 2.06 | 2.00 | 1.95 | 1.91 | 1.88 | 1.79 | 1.70 | 1.64 | 1.60 | 1.54 | 1.51 | 1.43 | 1.34 | 1.32 |
| 100 | 3.94 | 3.09 | 2.70 | 2.46 | 2.31 | 2.19 | 2.10 | 2.03 | 1.97 | 1.93 | 1.89 | 1.85 | 1.77 | 1.68 | 1.62 | 1.57 | 1.52 | 1.48 | 1.39 | 1.30 | 1.28 |
| 200 | 3.89 | 3.04 | 2.65 | 2.42 | 2.26 | 2.14 | 2.06 | 1.98 | 1.93 | 1.88 | 1.84 | 1.80 | 1.72 | 1.62 | 1.56 | 1.52 | 1.46 | 1.41 | 1.32 | 1.21 | 1.19 |
| 500 | 3.86 | 3.01 | 2.62 | 2.39 | 2.23 | 2.12 | 2.03 | 1.96 | 1.90 | 1.85 | 1.81 | 1.77 | 1.69 | 1.59 | 1.53 | 1.48 | 1.42 | 1.38 | 1.28 | 1.14 | 1.11 |
| 1000 | 3.85 | 3.01 | 2.61 | 2.38 | 2.22 | 2.11 | 2.02 | 1.95 | 1.89 | 1.84 | 1.80 | 1.76 | 1.68 | 1.58 | 1.52 | 1.47 | 1.41 | 1.36 | 1.26 | 1.11 | 1.08 |
| oc | 3.84 | 3.00 | 2.60 | 2.37 | 2.21 | 2.10 | 2.01 | 1.94 | 1.88 | 1.83 | 1.79 | 1.75 | 1.67 | 1.57 | 1.51 | 1.46 | 1.39 | 1.35 | 1.24 | 1.08 | 1.00 |

VALORES CRITOCOS PRUEBA F - N.C. 99%

Р

Tabla-P.1-Valores críticos para la distribución F para el nivel de significancia de 0.1 (nivel de confianza de 99%) (tomados de la Tabla A3 de Verma, 2005)

 $[v_1 = grados \ de \ libertad \ del \ numerador; v_2 = grados \ de \ libertad \ del \ denominador]$

| ν ₂ | v_1 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 15 | 20 | 25 | 30 | 40 | 50 | 100 | 1000 | x |
|----------------|---------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|--------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|------|
| 1 | 405 | 500 | 540 | 563 | 576 | 586 | 593 | 598 | 602 | 606 | 608 | 611 | 616 | 621 | 624 | 626 | 629 | 650 | 655 | 637 | 637 |
| ; V | 98 50 | 99.00 | 99.17 | 99.25 | 99.30 | 99 33 | 99 36 | 99 37 | 99 39 | 99.40 | 99.41 | 99.42 | 99.43 | 99.45 | 99.46 | 99.46 | 99.47 | 99.48 | 99.49 | 99.51 | 99.5 |
| 3 | 34.12 | 30.82 | 29.46 | 28.71 | 28.24 | 27.91 | 27.67 | 27.50 | 27.34 | 27.22 | 27.12 | 27.03 | 26.85 | 26.67 | 26.58 | 26.50 | 26.41 | 26.35 | 26.24 | 26.14 | 26.1 |
| 4 | 21.20 | 18.00 | 16.69 | 15.98 | 15.52 | 15.21 | 14 98 | 14.80 | 14.66 | 14.55 | 14.45 | 14 37 | 14 19 | 14 02 | 13.91 | 13.84 | 13.75 | 13.69 | 13.58 | 13.48 | 13.5 |
| 5 | 16.26 | 13.27 | 12.06 | 11.39 | 10,97 | 10.67 | 10.46 | 10.29 | 10.16 | 10.05 | 9,96 | 9.89 | 9.72 | 9.55 | 9.45 | 9.38 | 9.30 | 9.24 | 9.13 | 9.03 | 9.02 |
| 6 | 13.75 | 10.92 | 9.78 | 9.15 | 8.75 | 8.47 | 8.26 | 8.10 | 7.98 | 7.87 | 7.79 | 7.72 | 7.55 | 7.40 | 7.29 | 7.23 | 7.15 | 7.09 | 6.99 | 6.89 | 6,88 |
| 7 | 12.25 | 9.55 | 8.45 | 7.85 | 7.46 | 7.19 | 6.99 | 6.84 | 6.72 | 6.62 | 6.54 | 6.47 | 6.31 | 6.16 | 6.06 | 5.99 | 5.91 | 5.86 | 5.75 | 5.66 | 5.65 |
| 8 | 11.26 | 8.65 | 7.59 | 7.01 | 6.63 | 6.37 | 6.18 | 6.03 | 5.91 | 5.81 | 5.73 | 5.67 | 5.52 | 5.36 | 5.26 | 5.20 | 5.12 | 5.07 | 4.96 | 4.87 | 4.86 |
| 9 | 10.56 | 8.02 | 6.99 | 6.42 | 6.06 | 5.80 | 5.61 | 5.47 | 5.35 | 5.26 | 5.18 | 5.11 | 4.95 | 4.81 | 4.71 | 4.65 | 4.57 | 4.52 | 4.41 | 4.32 | 4.31 |
| 10 | 10.04 | 7.56 | 6.55 | 5.99 | 5.64 | 5.39 | 5.20 | 5.06 | 4.94 | 4.85 | 4.77 | 4.71 | 4.56 | 4.41 | 4.31 | 4.25 | 4.17 | 4.12 | 4.01 | 3.92 | 3.91 |
| 11 | 9.65 | 7.21 | 6.22 | 5.67 | 5.32 | 5.07 | 4.89 | 4.74 | 4.63 | 4.54 | 4.46 | 4.40 | 4.25 | 4.10 | 4.00 | 3.94 | 3.86 | 3.81 | 3.71 | 3.61 | 3.60 |
| 12 | 9.33 | 6.93 | 5.95 | 5.41 | 5.06 | 4.82 | 4.64 | 4.50 | 4.39 | 4.30 | 4.22 | 4.16 | 4.01 | 3.86 | 3.76 | 3.70 | 3.62 | 3.57 | 3.47 | 3.37 | 3.36 |
| 13 | 9.07 | 6.70 | 5.74 | 5.21 | 4.86 | 4.62 | 4.44 | 4.30 | 4.19 | 4.10 | 4.02 | 3.96 | 3.82 | 3.66 | 3.57 | 3.51 | 3.43 | 3.38 | 3.27 | 3.18 | 3.17 |
| 14 | 8.86 | 6.51 | 5.56 | 5.04 | 4.69 | 4.46 | 4.28 | 4,14 | 4.03 | 3.94 | 3.86 | 3.80 | 3.65 | 3.51 | 3.41 | 3.35 | 3.27 | 3.22 | 3.11 | 3.02 | 3.00 |
| 15 | 8.68 | 6.36 | 5.42 | 4.89 | 4.56 | 4.32 | 4.14 | 4.00 | 3.89 | 3.80 | 3.73 | 3.67 | 3.52 | 3.37 | 3.28 | 3.21 | 3.13 | 3.08 | 2.98 | 2.88 | 2.87 |
| 16 | 8.53 | 6.23 | 5.29 | 4.77 | 4.44 | 4.20 | 4.03 | 3.89 | 3.78 | 3.69 | · 3.62 | 3.55 | 3.41 | 3.26 | 3.16 | 3.10 | 3.02 | 2.97 | 2.86 | 2.76 | 2.75 |
| 17 | 8.40 | 6.11 | 5.18 | 4.67 | 4.34 | 4.10 | 3.93 | 3.79 | 3.68 | 3.59 | 3.52 | 3.46 | 3.31 | 3.16 | 3.07 | 3.00 | 2.92 | 2.87 | 2,76 | 2.66 | 2.65 |
| 18 | 8.29 | 6.01 | 5.09 | 4.58 | 4.25 | 4.01 | 3.84 | 3.71 | 3.60 | 3.51 | 3.43 | 3.37 | 3.23 | 3.08 | 2.98 | 2.92 | 2.84 | 2.78 | 2.68 | 2.58 | 2.57 |
| 19 | 8.18 | 5.93 | 5.01 | 4.50 | 4.17 | 3.94 | 3.77 | 3.63 | 3.52 | 3.43 | 3.36 | 3.30 | 3.15 | 3.00 | 2.91 | 2.84 | 2.76 | 2.71 | 2.60 | 2.50 | 2.49 |
| 20 | 8.10 | 5.85 | 4.94 | 4.43 | 4.10 | 3.87 | 3.70 | 3.56 | 3.46 | 3.37 | 3.29 | 3.23 | 3.09 | 2.94 | 2.84 | 2.78 | 2.69 | 2.64 | 2.54 | 2.43 | 2.42 |
| 21 | 8.02 | 5.78 | 4.87 | 4.37 | 4.04 | 3.81 | 3.64 | 3.51 | 3.40 | 3.31 | 3.24 | 3.17 | 3.03 | 2.88 | 2.78 | 2.72 | 2.64 | 2.58 | 2.48 | 2.37 | 2.36 |
| 22 | 7.95 | 5.72 | 4.82 | 4.31 | 3.99 | 3.76 | 3.59 | 3.45 | 3.35 | 3.26 | 3.18 | 3.12 | 2.98 | 2.83 | 2.73 | 2.67 | 2.58 | 2.53 | 2,42 | 2.32 | 2.31 |
| 23 | 7.88 | 5.66 | 4.76 | 4.26 | 3.94 | 3.71 | 3.54 | 3.41 | 3.30 | 3.21 | 3.14 | 3.07 | 2.93 | 2.78 | 2.69 | 2.62 | 2.54 | 2.48 | 2.37 | 2.27 | 2.26 |
| 24 | 7.82 | 5.61 | 4.72 | 4.22 | 3.90 | 3.67 | 3.50 | 3.36 | 3.26 | 3.17 | 3.09 | 3.03 | 2.89 | 2.74 | 2.64 | 2.58 | 2.49 | 2.44 | 2.33 | 2.22 | 2.21 |
| 25 | 7.77 | 5.57 | 4.68 | 4.18 | 3.85 | 3.63 | 3.46 | 3.32 | 3.22 | 3.13 | 3.06 | 2.99 | 2.85 | 2.70 | 2.60 | 2.54 | 2.45 | 2.40 | 2.29 | 2.18 | 2.17 |
| 26 | 7.72 | 5.53 | 4.64 | 4.14 | 3.82 | 3.59 | 3.42 | 3.29 | 3.18 | 3.09 | 3.02 | 2.96 | 2.81 | 2.66 | 2.57 | 2.50 | 2.42 | 2.36 | 2.25 | 2.14 | 2.13 |
| 27 | 7.68 | 5.49 | 4.60 | 4.11 | 3.78 | 3.56 | 3.39 | 3.26 | 3.15 | 3.06 | 2.99 | 2.93 | 2.78 | 2.63 | 2.54 | 2.47 | 2.38 | 2.33 | 2.22 | 2.11 | 2.10 |
| 28 | 7.64 | 5.45 | 4.57 | 4.07 | 3.75 | 3.53 | 3.36 | 3.23 | 3.12 | 3.03 | 2.96 | 2.90 | 2.75 | 2.60 | 2.51 | 2.44 | 2.35 | 2.30 | 2.19 | 2.08 | 2.06 |
| 29 | 7.60 | 5.42 | 4.54 | 4.04 | 3.73 | 3.50 | 3.33 | 3.20 | 3.09 | 3.00 | 2.93 | 2.87 | 2.73 | 2.57 | 2.48 | 2.41 | 2.33 | 2.27 | 2.16 | 2.05 | 2.03 |
| 30 | 7.56 | 5.39 | 4.51 | 4.02 | 3.70 | 3.47 | 3.30 | 3.17 | 3.07 | 2.98 | 2.91 | 2.84 | 2.70 | 2.55 | 2.45 | 2.39 | 2.30 | 2.24 | 2.13 | 2.02 | 2.01 |
| 35 | 7.42 | 5.27 | 4.40 | 3.91 | 3.59 | 3.37 | 3,20 | 3.07 | 2.96 | 2.88 | 2.80 | 2.74 | 2,60 | 2.44 | 2.35 | 2.28 | 2.19 | 2.14 | 2.02 | 1.90 | 1.89 |
| 40 | 7.31 | 5.18 | 4.31 | 3.83 | 3.51 | 3.29 | 3.12 | 2.99 | 2.89 | 2.80 | 2.73 | 2.66 | 2.52 | 2.37 | 2.27 | 2.20 | 2.11 | 2.06 | 1.94 | 1.82 | 1.80 |
| 50 | 7.17 | 5.06 | 4.20 | 3.72 | 3.41 | 3.19 | 3.02 | 2.89 | 2.78 | 2.70 | 2.62 | 2.56 | 2.42 | 2.27 | 2.17 | 2.10 | 2.01 | 1.95 | 1.82 | 1.70 | 1.68 |
| 60 | 7.08 | 4.98 | 4.13 | 3.65 | 3.34 | 3.12 | 2.95 | 2.82 | 2.72 | 2.63 | 2.56 | 2.50 | 2.35 | 2.20 | 2.10 | 2.03 | 1.94 | 1.88 | 1.75 | 1.62 | 1.60 |
| 80 | 6.96 | 4.88 | 4.04 | 3.56 | 3.26 | 3.04 | 2.87 | 2.74 | 2.64 | 2.55 | 2.48 | 2.42 | 2.27 | 2,12 | 2.01 | 1.94 | 1.85 | 1.79 | 1.65 | 1.51 | 1.49 |
| 100 | 6.90 | 4.82 | 3.98 | 3.51 | 3.21 | 2.99 | 2.82 | 2,69 | 2.59 | 2.50 | 2.43 | 2.37 | 2.22 | 2.07 | 1.97 | 1.89 | 1.80 | 1.74 | 1.60 | 1.45 | 1.43 |
| 200 | 6.76 | 4.71 | 3.88 | 3.41 | 3.11 | 2.89 | 2.73 | 2.60 | 2.50 | 2.41 | 2.34 | 2.27 | 2.13 | 1.97 | 1.87 | 1.79 | 1.69 | 1.63 | 1.48 | 1.30 | 1.28 |
| 500 | 6.69 | 4.65 | 3.82 | 3.36 | 3.05 | 2.84 | 2.68 | 2.55 | 2.44 | 2.36 | 2.28 | 2.22 | 2.07 | 1.92 | 1.81 | 1.74 | 1.63 | 1.57 | 1.41 | 1.20 | 1.16 |
| 1000 | 6.66 | 4.63 | 3.80 | 3.34 | 3.04 | 2.82 | 2.66 | 2.53 | 2.43 | 2.34 | 2.27 | 2.20 | 2.06 | 1.90 | 1.79 | 1.72 | 1.61 | 1.54 | 1.38 | 1.16 | 1.11 |
| œ | 6.63 | 4.61 | 3.78 | 3.32 | 3.02 | 2.80 | 2.64 | 2.51 | 2.41 | 2.32 | 2.25 | 2.18 | 2.04 | 1.88 | 1.77 | 1.70 | 1.59 | 1.52 | 1.36 | 1.15 | 1.00 |

ANEXO

VALORES CRITOCOS PRUEBA t

Q

| Two-sided CL | 60% | 80% | 90% | 95% | 98% | 99% | 99.8% |
|--------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| Two-sided SL | 0.40 | 0.20 | 0.10 | 0.05 | 0.02 | 0.01 | 0.002 |
| One-sided CL | 80% | 90% | 05% | 97 5% | 00% | 00 5% | 00 0% |
| One-sided SL | 0.20 | 0.10 | 0.05 | 0.025 | 0.01 | 0.005 | 0.001 |
| | | | | | 0.01 | 0.000 | 0.001 |
| v (df) | t _{0.800} | t _{0.900} | t _{0.950} | t _{0.975} | t _{0.990} | t _{0.995} | t _{0.999} |
| 1 | 1.376 | 3.078 | 6.314 | 12.706 | 31.820 | 63.656 | 318.294 |
| 2 | 1.061 | 1.886 | 2.920 | 4.303 | 6.965 | 9.925 | 22.327 |
| 3 | 0.978 | 1.638 | 2.353 | 3.182 | 4.541 | 5.841 | 10.214 |
| 4 | 0.941 | 1.533 | 2.132 | 2.776 | 3.747 | 4.604 | 7.173 |
| 5 | 0.920 | 1.476 | 2.015 | 2.571 | 3.365 | 4.032 | 5.893 |
| 6 | 0.906 | 1.440 | 1.943 | 2.447 | 3.143 | 3.707 | 5.208 |
| 7 | 0.896 | 1.415 | 1.895 | 2.365 | 2.998 | 3.499 | 4.785 |
| 8 | 0.889 | 1.397 | 1.860 | 2.306 | 2.896 | 3.355 | 4.501 |
| 9 | 0.883 | 1.383 | 1.833 | 2.262 | 2.821 | 3.250 | 4.297 |
| 10 | 0.879 | 1.372 | 1.812 | 2.228 | 2.764 | 3.169 | 4.144 |
| 11 | 0.876 | 1.363 | 1.796 | 2.201 | 2.718 | 3,106 | 4.025 |
| 12 | 0.873 | 1.356 | 1.782 | 2.179 | 2.681 | 3.055 | 3,930 |
| 13 | 0.870 | 1.350 | 1.771 | 2.160 | 2.650 | 3.012 | 3 852 |
| 14 | 0.868 | 1.345 | 1.761 | 2.145 | 2.624 | 2.977 | 3 787 |
| 15 | 0.866 | 1.341 | 1.753 | 2.131 | 2.602 | 2.947 | 3.733 |
| 16 | 0.865 | 1.337 | 1.746 | 2.120 | 2 583 | 2 921 | 3 686 |
| 17 | 0.863 | 1.333 | 1.740 | 2 110 | 2 567 | 2 898 | 3 646 |
| 18 | 0.862 | 1.330 | 1.734 | 2.101 | 2 552 | 2.878 | 3 610 |
| 19 | 0.861 | 1 328 | 1 729 | 2 093 | 2 539 | 2.861 | 3 570 |
| 20 | 0.860 | 1.325 | 1.725 | 2.086 | 2 528 | 2.845 | 3 552 |
| 21 | 0.859 | 1 323 | 1 721 | 2 080 | 2 518 | 2.831 | 3 527 |
| 22 | 0.858 | 1 321 | 1 717 | 2.000 | 2.518 | 2.851 | 3.505 |
| 23 | 0.858 | 1.319 | 1 714 | 2.074 | 2.500 | 2.819 | 3 485 |
| 24 | 0.857 | 1 318 | 1 711 | 2.064 | 2.500 | 2.307 | 3.465 |
| 25 | 0.856 | 1 316 | 1 708 | 2.004 | 2.492 | 2.797 | 3.407 |
| 26 | 0.856 | 1.315 | 1.706 | 2.000 | 2.405 | 2.707 | 3.430 |
| 27 | 0.855 | 1.313 | 1.703 | 2.050 | 2.479 | 2.779 | 3.435 |
| 28 | 0.855 | 1 313 | 1.701 | 2.032 | 2.475 | 2.771 | 3.421 |
| 20 | 0.854 | 1 313 | 1.600 | 2.046 | 2.407 | 2.705 | 3.408 |
| 30 | 0.854 | 1.310 | 1.607 | 2.045 | 2.402 | 2.750 | 3.390 |
| 35 | 0.852 | 1 306 | 1.697 | 2.042 | 2.437 | 2.750 | 3.385 |
| 40 | 0.851 | 1.300 | 1.694 | 2.030 | 2.430 | 2.724 | 3.340 |
| 45 | 0.850 | 1.303 | 1.004 | 2.021 | 2.425 | 2.704 | 3.307 |
| 50 | 0.830 | 1.301 | 1.676 | 2.014 | 2.412 | 2.690 | 3.281 |
| 60 | 0.849 | 1.299 | 1.670 | 2.009 | 2.403 | 2.0/8 | 3.201 |
| 70 | 0.845 | 1.290 | 1.071 | 2.000 | 2.390 | 2.660 | 3.232 |
| 80 | 0.847 | 1.294 | 1.664 | 1.994 | 2.381 | 2.648 | 3.211 |
| 00 | 0.840 | 1.292 | 1.004 | 1.990 | 2.3/4 | 2.639 | 3.195 |
| 100 | 0.840 | 1.291 | 1.002 | 1.987 | 2.368 | 2.632 | 3.183 |
| 200 | 0.845 | 1.290 | 1.000 | 1.984 | 2.364 | 2.626 | 3.174 |
| 200 | 0.843 | 1.286 | 1.652 | 1.972 | 2.345 | 2.601 | 3.131 |
| 500 | 0.842 | 1.283 | 1.648 | 1.965 | 2.334 | 2.586 | 3.107 |
| 1000 | 0.842 | 1.282 | 1.646 | 1.962 | 2.330 | 2.581 | 3.098 |
| x0 | 0.842 | 1.282 | 1.645 | 1.960 | 2.326 | 2.576 | |

Tabla-Q.1-Valores críticos de la distribución t de Student (tomados de la Tabla A1 de Verma, 2005)