



13  
24

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA  
DE MEXICO

ESCUELA NACIONAL DE ESTUDIOS PROFESIONALES  
ZARAGOZA

APLICACION DE LOS METODOS DE CONTRIBUCION  
DE GRUPOS A LA SIMULACION DE OPERACIONES  
DE SEPARACION LIQUIDO-VAPOR

**TESIS PROFESIONAL**  
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE  
**INGENIERO QUIMICO**  
P R E S E N T A :  
**JOSE LUIS LEYVA GARCIA**



TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

MEXICO, D. F.

1991



Universidad Nacional  
Autónoma de México



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

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

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

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

# TESIS CON FALLA DE ORIGEN

# I N D I C E

	PAGINA
I. INTRODUCCION.	1
II GENERALIDADES.	5
III METODOS DE CONTRIBUCION DE GRUPOS.	24
3.1 CONCEPTO DE CONTRIBUCION DE GRUPOS	24
3.2 METODOS DE CONTRIBUCION DE GRUPOS.	28
3.2.1 SOLUCION ANALITICA DE GRUPOS (ASOG).	30
3.2.2 UNIFAC.	34
3.2.3 PARAMETROS DE CONTRIBUCION DE GRUPOS (PFGC).	39
3.3 COMPARACION ENTRE ASOG Y UNIFAC.	41
IV ESTUDIO DEL METODO DE CONTRIBUCION DE GRUPOS UNIFAC.	43
4.1 EL MODELO UNIFAC.	43
4.2 PARAMETROS DE INTERACCION DE GRUPOS.	52
4.3 EJEMPLO DE CALCULO PARA PREDICCIONES DE COEFICIENTES DE ACTIVIDAD POR UNIFAC.	66
4.4 EVOLUCION Y APLICACION DEL METODO UNIFAC.	73
V APLICACION DE UNIFAC AL DISEÑO DE COLUMNAS DE DESTILACION.	85
5.1 CALCULO DE DESTILACION MULTICOMPONENTE POR LINEARIZACION.	86
5.2 PROCEDIMIENTO DE CALCULO PARA UNA COLUMNA DE DESTILACION.	96
VI EJEMPLO DE APLICACION.	98
VII RESULTADOS	106
VIII ANALISIS DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES.	120

IX	BIBLIOGRAFIA.	124
X	APENDICE.	
	A) CRITERIOS DE EQUILIBRIO.	129
	B) DESCRIPCION DEL PROGRAMA PARA EL DISEÑO DE COLUMNAS DE DESTILACION.	143
	C) PROGRAMAS PARA EL CALCULO DE PARAMETROS UNIQAC (PUNIQAC) Y PARA EL CALCULO DE LOS SEGUNDOS COEFICIENTES VIRIALES (CORFVIR).	175
	D) LISTADO DE RESULTADOS.	189
	d.1) SIMULACION COLUMNA.	
	d.2) CALCULO PUNIQAC.	
	d.3) CALCULO SVIR.	

## LISTA DE FIGURAS.

## PAGINA

2.1	Metodología de la Ingeniería de Procesos aplicada a la creación de Procesos Químicos.	6
2.2	Proyecto Total para el Diseño y Construcción de una Planta Química.	9
2.2.1	Desarrollo del Diseño de Procesos Químicos	10
2.3	Componentes de una Operación de Separación.	17
2.4	Configuración de una Columna de Destilación Típica.	22
5.1	Configuración de una Columna de Destilación y nomenclatura para una etapa n arbitraria	89
6.1	Configuración de la Columna de Destilación para los Sistemas 1.	99
6.2	Configuración de la Columna de Destilación para los Sistemas 2.	100
7.1	Resultados de la Columna de Destilación del Sistema 1 Etanol-Propanol-Agua-Ac. Acético.	107
7.2	Resultados de la Columna de Destilación del Sistema 2 Dinitroetano-Propanol-Tolueno-Acetona	108
7.3	Perfil de Temperaturas en la Columna de Destilación del Sistema 1.	110
7.4	Perfil de Temperaturas en la Columna de Destilación del Sistema 2	111
7.5	Perfil de Flujos Líquidos en la Columna de Destilación del Sistema 1	112
7.6	Perfil de Flujos Líquidos en la Columna de Destilación del Sistema 2.	113
7.7	Perfil de Flujos Vapor en la Columna de Destilación del Sistema 1.	114
7.8	Perfil de Flujos Vapor en la Columna de Destilación del Sistema 2.	115
7.9	Perfil de Flujos Totales en la Fase Líquida y Vapor en la Columna de Destilación del Sistema 1.	116
7.10	Perfil de Flujos Totales en la Fase Líquida y Vapor en la Columna de Destilación del Sistema 2.	117

7.11	Perfil de Factor K en la Columna de Destilación del Sistema 1.	118
7.12	Perfil de Factor K en la Columna de Destilación del Sistema 2.	119

#### LISTA DE TABLAS.

4.1	Especificaciones de Parámetros UNIFAC y Asignación de Grupos Muestra.	53
4.2	Parámetros de Interacción de Grupos.	58
6.2	Archivo de Datos de Entrada a ser Alimentados para el Sistema 1.	102
6.3	Archivo de Datos de Entrada a ser Alimentados para el Sistema 2.	103
D.1	Muestra de Salida de Datos para el Cálculo de Parámetros UNIQUAC. Sistema 1.	190
D.2	Resumen de Salida de datos para el Cálculo de Parámetros UNIQUAC. Sistema 2.	192
D.3	Resultados Computacionales de la Columna de Destilación del Sistema 1.	193
D.4	Resultados Computacionales de la Columna de Destilación del Sistema 2.	202
D.5	Muestra de Salida de Datos para el Cálculo de Coeficientes Viriales para el Sistema 1.	224
D.6	Muestra de Salida de Datos para el Cálculo de Coeficientes Viriales para el Sistema 2.	225

## 1. INTRODUCCION.

La industria química y petroquímica moderna incluye dentro de sus procesos de manufactura operaciones de separación de mezcla multicomponentes, siendo la destilación una de las más comunes. Por lo que diseños eficientes de equipo de destilación requiere de un entendimiento cuantitativo del equilibrio liquido-vapor en mezclas multicomponentes expresada a través de coeficientes de fugacidad en el caso de la fase vapor y de coeficientes de actividad para la fase líquida.

El contar con métodos para estimar equilibrios liquido-vapor para mezclas multicomponentes permite tener la información necesaria para simular y diseñar columnas de destilación, que a su vez requieren utilizar procedimientos de cálculo que han seguido muy de cerca el desarrollo de los sistemas computacionales de alta velocidad. Los primeros esfuerzos en esta línea se caracterizaron por el empleo de métodos de aproximación o cortos y los gráficos, pero con el advenimiento de las computadoras se han desarrollado modelos cada vez más exactos, junto con la aplicación de métodos numéricos para la resolución de este tipo de problemas.

Por lo que el objetivo del presente trabajo es mostrar los métodos ó procedimientos existentes que permitan estimar el equilibrio liquido-vapor a partir de un mínimo de información experimental, ya que la variedad de mezclas líquidas en la



tecnología química es extremadamente grande y no se puede esperar que información experimental este siempre disponible para todas las mezclas de interés para la industria química y petroquímica.

Para la exposición de este trabajo, la tesis se estructura de la siguiente manera.

En el Capítulo II se menciona la importancia de la Ingeniería Química en el Desarrollo, Diseño e Innovación de Procesos y en que etapas se le involucra, también se describe brevemente aspectos relacionados con la simulación rigurosa en estado estacionario de los procesos de separación química, señalando los métodos cortos para diseños preliminares de columnas de destilación y por último se detalla cuales son los componentes que integran una operación de separación y la importancia que cada una de ellas reviste en el Diseño de Procesos.

El Capítulo III presenta una introducción del Concepto de Contribución de Grupos, describiendo la base termodinámica que la soporta; también se describen los principales Métodos de Contribución de Grupos y se presenta una comparación entre dos de los más utilizados en la actualidad señalando sus ventajas e inconvenientes y como resultado de esta comparación se selecciona el que presenta las mejores bondades.

En el Capítulo IV se presenta un estudio detallado del Método de Contribución de Grupos UNIFAC incluyendo un ejemplo para el cálculo de coeficientes de actividad. Por último, se describe cual ha sido la evolución de UNIFAC y cuales aplicaciones se han desarrollado para éste.

El Capítulo V aborda los conceptos teóricos para la Aplicación del Método de Contribución de Grupos para el Diseño de Columnas de Destilación, describiendo el Método para el cálculo de Columnas de Destilación desarrollado por Naphtali y Sandholm.

En el Capítulo VI se describen los ejemplos que muestran el potencial disponible del Método UNIFAC en la simulación y diseño de Columnas de Destilación.

El Capítulo VII se muestran y analizan los resultados de los ejemplos desarrollados en el capítulo anterior a través de gráficas y tablas.

El Capítulo VIII se destina a exponer algunas conclusiones, producto de la realización de este trabajo.

En el Capítulo IX se menciona la bibliografía utilizada en el desarrollo de este trabajo de tesis.

Se incluyen cuatro apéndices que abordan temas de apoyo, siendo los siguientes:

Apéndice A, aborda conceptos teóricos sobre la termodinámica del equilibrio de fases, el coeficiente de fugacidad y el coeficiente de actividad con sus respectivas relaciones termodinámicas.

El Apéndice B describe y lista el Programa de Simulación de la Columna de Destilación por el Método Naphtali y Sandholm, así como la simbología utilizada.

En el Apéndice C se describe y lista el Programa de cómputo para el Cálculo de Parámetros UNIQUAC a partir de UNIFAC, incluyendo la lista de símbolos y subrutinas utilizadas.

El Apéndice D contiene el listado y descripción del Programa para el Cálculo de Segundos Coeficientes Viriales con su respectiva simbología. Asimismo, un listado de entrada de datos para correr el programa.

Por último, el Apéndice E contiene los listados de resultados de los ejemplos de las Columnas de Destilación corridas, así como los resultados del cálculo de los parámetros UNIQUAC y Segundos Coeficientes Viriales, mismos que son requeridos para el diseño de las columnas.

## II. GENERALIDADES

## II. GENERALIDADES

La Ingeniería Química desempeña un papel importante en el diseño de procesos químicos. Por lo anterior, el Ingeniero Químico tiene un papel primordial en el diseño, construcción, arranque y operación de plantas químicas, donde debe de aplicar los principios físico-químicos y económicos directamente.

Esta función del Ingeniero Químico involucra una serie de actividades dentro de las cuales la Ingeniería de Procesos resulta la más relevante, en virtud de que contempla la creación, cuantificación y análisis de esquemas de procesos que formarán parte de una planta industrial, la cual deberá ser segura, fácil de operar y que resulte económicamente atractiva. En la Figura 2.1 se muestra la estructura general en que se aplica la Ingeniería de Procesos a la creación de Procesos Químicos. Para lograr lo anteriormente mencionado, se requiere de la ejecución de las siguientes etapas:

- a) Desarrollo de Procesos
- b) Diseño de Procesos
- c) Innovaciones de Procesos

En el Desarrollo del Proceso se contempla la interacción directa entre el Ingeniero Químico y el Grupo de Investigación para conceptualizar el proceso a desarrollar.

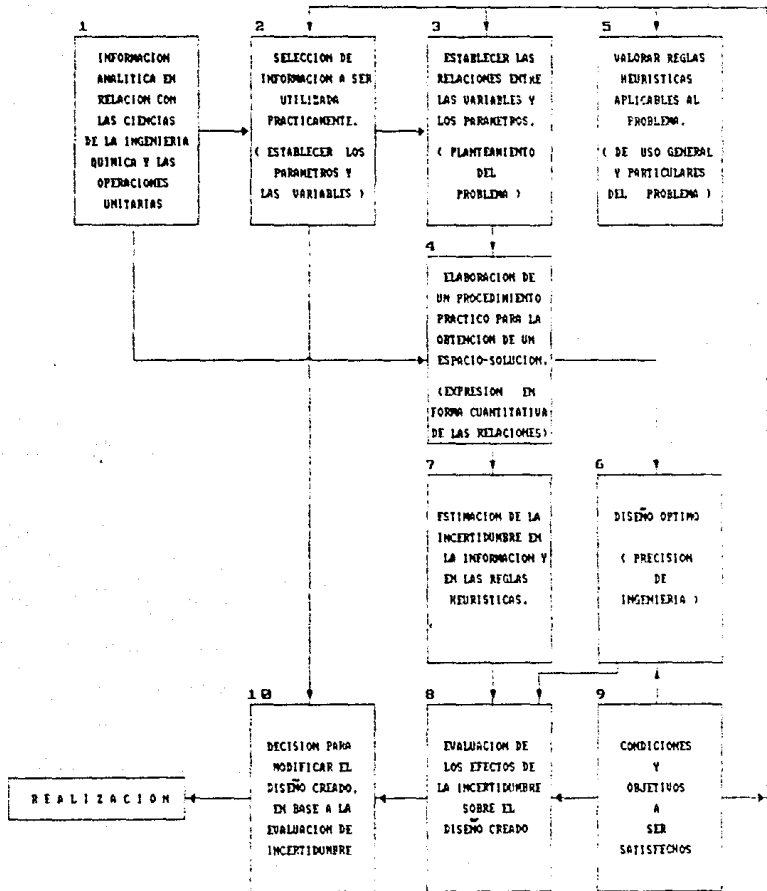


FIGURA 2.1 METODOLOGIA DE LA INGENIERIA DE PROCESOS APLICADA A LA CREACION DE PROCESOS QUIMICOS.

A partir de la conceptualización del proceso, se cuenta con la información necesaria para generar el paquete de Diseño del Proceso. La última etapa corresponde a la Innovación del Proceso, la cual va enfocada hacia la mejora del proceso existente.

De esta manera una de las tareas mas complejas y de mayor exigencia que tiene que afrontar el Ingeniero Químico es el Diseño de Procesos, punto en el que convergen por un lado el conocimiento técnico y la experiencia industrial, y por el otro lado, la creatividad, intuición e ingenio.

A su vez la Etapa de Diseño de Proceso se divide en las siguientes subetapas:

- i) Síntesis.
- ii) Análisis.
- iii) Optimización.

La Síntesis viene siendo la parte inventiva y en la cual se deciden las unidades de proceso requeridas y su interconexión.

Una vez estructurado el proceso mas viable, la siguiente etapa es la evaluación técnica-económica, es decir, la etapa de Análisis, en la cual se establecerán las bases de Diseño del Proceso con sus respectivas variables de diseño así como

la selección de los Modelos Matemáticos para cada una de las operaciones del proceso involucradas , las correlaciones para calcular las propiedades termofísicas y por último los servicios auxiliares del proceso.

Así, a partir de la información obtenida de las etapas de Síntesis y Análisis, se establece una estrategia de Optimización, aplicada a una función objetivo adecuada. La Optimización puede ser realizada tanto a la estructura del proceso como a las condiciones de operación del mismo.

Como ejemplo ilustrativo en la Figura 2.2 se muestran las etapas involucradas en un Proyecto Total para el Diseño y Construcción de una Planta Química, donde se puede observar la etapa de Diseño del Proceso, así mismo, en la Figura 2.2.1 se esquematiza las etapas involucradas en el Desarrollo del Diseño de Procesos Químicos, para lo cual es necesario realizar un balance de masa y energía a través de una simulación rigurosa en estado estacionario.

Ahora bien, la simulación rigurosa en estado estacionario para mezclas multicomponentes involucra la solución de un conjunto de ecuaciones no lineales, esto es debido a la no linealidad de las ecuaciones MESH (balances de masa y energía, relaciones de equilibrio y restricciones de las fracciones mol) así como a la complejidad de los procesos,



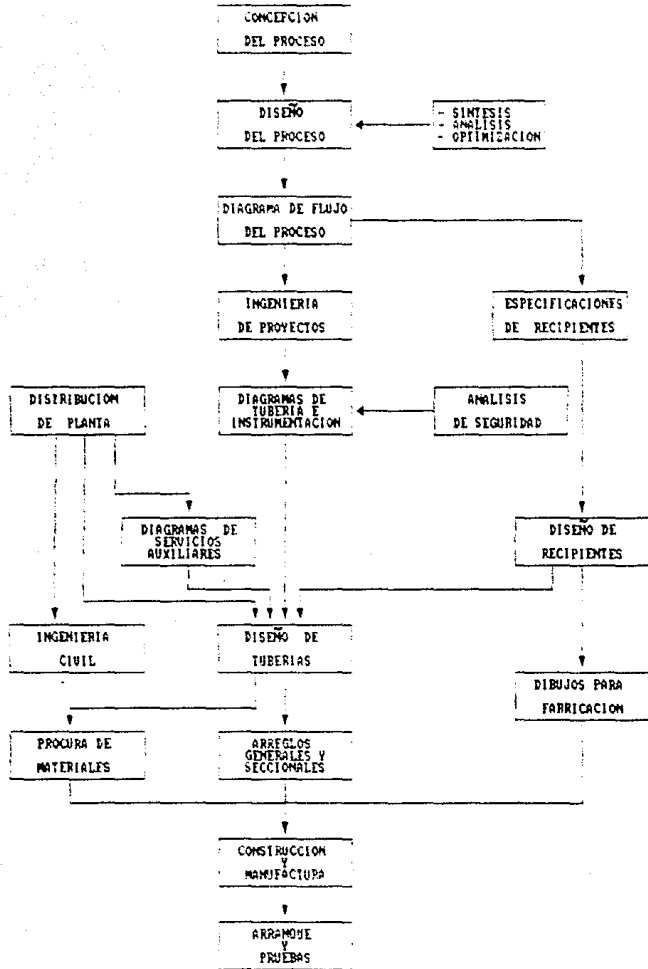


FIGURA 2.2 EL PROYECTO TOTAL PARA EL DISEÑO Y CONSTRUCCION DE UNA PLANTA QUIMICA

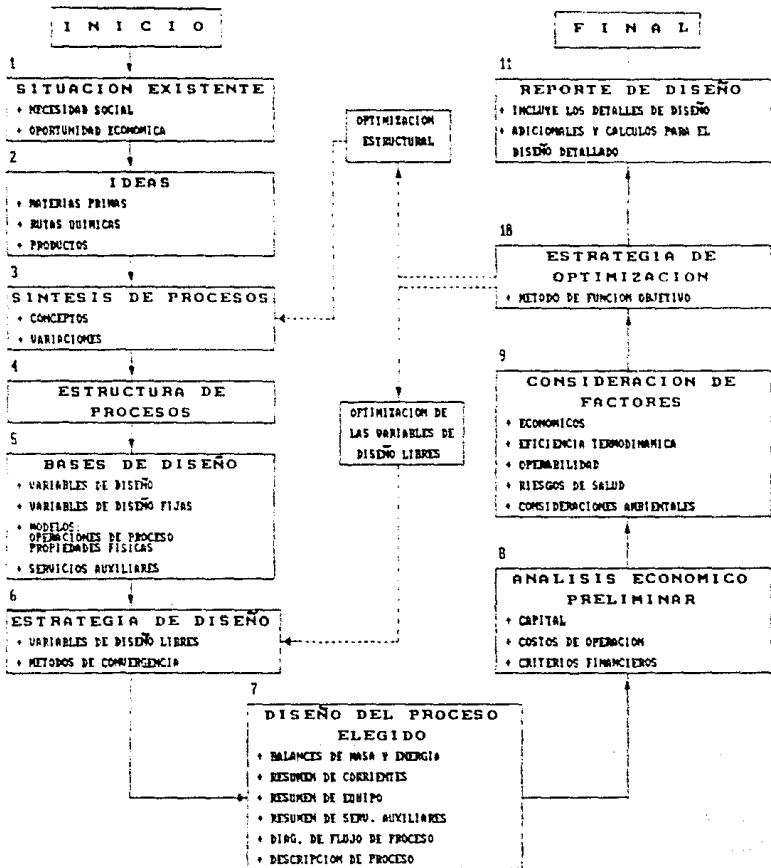


FIGURA 2.2.1 ETAPAS EN EL DESARROLLO DEL DISEÑO DE PROCESOS QUIMICOS

por lo que la simulación siempre ha resultado difícil, principalmente desde tres puntos de vista:

- a) Involucra la solución de un gran número de ecuaciones algebraicas no lineales, por medio de métodos numéricos en los cuales los errores de redondeo pueden ser significativos y la convergencia no siempre es alcanzada.
- b) Distintos tipos de problemas tienen diferentes características de convergencia, por ejemplo en mezclas de amplio rango de puntos de ebullición y en las mezclas de puntos de ebullición cercanos.
- c) El último es el relacionado con la habilidad de obtener en forma eficiente la información requerida (relación de reflujo, No. de etapas, composición, etc).

La simulación como se ha mencionado es requerida para analizar, diseñar y optimizar las operaciones de separación y sin las cuales no sería posible la separación de mezclas.

Gran parte del Diseño en Ingeniería Química es concerniente a los procesos de separación química, muchas de estas son operaciones difusionales del tipo fase de contacto, siendo la destilación, la absorción y la extracción las mas comunes. Para un diseño racional de procesos de separación química se requiere de información cuantitativa sobre el equilibrio de

fases en mezclas binarias y multicomponentes bajo consideración.

Las operaciones de separación mencionadas anteriormente tienen por objeto el purificar materias primas, intermedias y productos, através de la transferencia multietapa.

Estas operaciones de separación tiene suma importancia debido a que se emplean no tan solo para separar una alimentación (que es una mezcla) en sus componentes, sino también se utiliza en la recuperación de solventes y en la reutilización de estos al recircularlos al proceso así como en la remoción de impurezas. además se emplean en conjunto con reactores químicos para la previa purificación de la alimentación al reactor, también se utiliza en la recuperación de reactantes para su posterior recirculación al reactor y asimismo en recuperar subproductos y purificación de productos bajo ciertas especificaciones.

Como se ha venido mencionando, la Ingeniería de Procesos de Separación representa una parte fundamental en el Diseño y Operación de una planta química. Dentro de esta área, el proceso de destilación es uno de los mas utilizados y llega a ocupar del 40 % al 80 % de la inversión total de la planta, de ahí la necesidad de mejorar la operación de los equipos de destilación, aumentando su eficiencia y ampliando el rango de servicio que pueda cubrir.

Las operaciones de separación de etapas múltiples se clasifican en Sistemas Binarios y Sistemas Multicomponentes. La definición mas amplia para describir un sistema binario y uno multicomponente es:

Sistema Binario. Un sistema se considera binario cuando las corrientes entre etapas tiene la propiedad de que la composición de cada corriente esta determinada, fijando la fracción molar, la másica o la volumétrica de un componente particular presente en la misma.

Sistema Multicomponente. Para un sistema multicomponente será necesario fijar la fracción molar, másica o volumétrica de mas de una especie para determinar la composición de una o de las dos corrientes existentes entre etapas

Los problemas de cálculo que se involucran en las separaciones binarias pueden ser tratados fácilmente por diversos métodos, mientras que en las separaciones multicomponentes es siempre mas complicado, a pesar de que parten de los mismos conceptos básicos. El que se tengan bastantes variables independientes para especificar gran parte de las condiciones de separación facilita el tratamiento en los sistemas binarios, no pudiendo ser lo mismo en el caso de multicomponentes en el que se puedan

especificar menos condiciones aunque se tengan mayor número de variables.

Ahora bien, el sistema de ecuaciones que describe rigurosamente una operación de separación multietapa a contra corriente y a régimen permanente fue presentado por primera vez por Sorel en 1883, siendo la única suposición la etapa de equilibrio. Sin embargo, este tipo de sistema de ecuaciones no tuvo una amplia identificación sino hasta 1921, cuando se adaptaron a una técnica gráfica rápida para sistemas binarios, realizada por Ponchon y después Savarit. Posteriormente McCabe y Thiele desarrollaron en 1925 una técnica gráfica mas sencilla que la de Ponchon y Savarit, pero con restricciones.

Los métodos computacionales han ayudado a sustituir el método gráfico de Ponchon - Savarit, pero el método gráfico de McCabe & Thiele es tan simple e ilustrativo que continúa siendo utilizado en cátedras universitarias en la materia.. En base a estos métodos gráficos es posible desarrollar ecuaciones simples que representen la operación de una torre en los casos límites de reflujo mínimo y reflujo total. Estas ecuaciones fueron entonces extendidas para la representación de destilación multicomponente, dando con ello los métodos cortos para diseños preliminares de torres desarrollados en la década de los 40's y 50's por:

- Fenske (1932) ó Underwood (1932), con la ecuación para el número mínimo de etapas.
- Underwood (1948) ó Colburn (1941). con el método para la relación de reflujo mínimo.
- Gillilan (1940) con la correlación para el número de etapas vs. relación de reflujo.

Gillilan y Reed (1942) desarrollaron por primera vez un análisis de grados de libertad para este tipo de ecuaciones.

Debido al auge de las computadoras se vio la necesidad de implementar nuevos métodos rigurosos que cubrieran las deficiencias de los métodos cortos, éstos últimos se caracterizan por ser demasiado simples, muy útiles para cálculos manuales, sin embargo están restringidos a casos límites (mínimo número de etapas, reflujo total, sistemas binarios) ó bien, a sistemas reales haciendo severas simplificaciones, además sirven como estimado inicial de los métodos rigurosos, así como para hacer evaluaciones preliminares de costos y que son mas bien utilizados como métodos de diseño, aunque no son recomendables para el diseño definitivo de una torre.

Debido a estas dificultades en la simulación de procesos de separación de mezcla multicomponentes, han aparecido numerosos

algoritmos, para los cuales pueden ser clasificados en tres categorías :

- i) Métodos de descomposición de ecuaciones.
- ii) Métodos de relajación.
- iii) Métodos de Solución simultánea.

En cada caso los algoritmos son diferentes unos de otros en los siguientes aspectos:

- El modelo matemático utilizado y variables de iteración elegidas .
- Agrupamiento de las ecuaciones y algoritmos para resolver las ecuaciones.
- Técnicas de convergencia utilizadas.

Los procesos de separación de materiales utiliza para sus fines, la diferencia en las propiedades físicas y químicas, para lo cual, el Ingeniero Químico debe crear un ambiente que provoque un comportamiento diferente en las propiedades de las sustancias que componen la mezcla a separar.



Al mecanismo que provoca la diferencia en propiedades de los materiales a separar se le ha denominado agente de separación.

Por medio de un esquema sencillo, en el cual se involucra una operación de separación y las corrientes que la componen, como la corriente de alimentación o de materia, pudiendo ser una o varias y como mínimo dos corrientes de productos que difieren en composición, siendo esto una consecuencia de la naturaleza fundamental de una separación. Esta separación tiene su causa, y esta es por la adición de un agente de separación que toma la forma de otra corriente ya sea de materia o de energía.

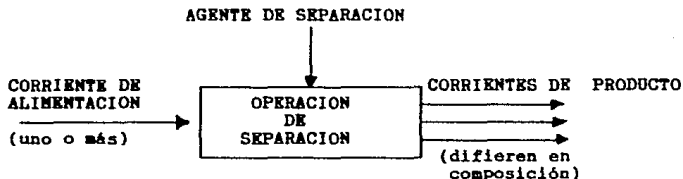


FIGURA 2.3 COMPONENTES DE UNA OPERACION DE SEPARACION.

Con mucha frecuencia el agente de separación provoca la formación de una segunda fase de materia, ahora bien, una

separación tiene lugar si la fase generada tiene composición diferente de la fase inicial (alimento), además se dice que las operaciones de separación donde las fases inmiscibles tienden hacia el equilibrio una con otra se denominan operaciones de separación de equilibrio.

Se puede mencionar otros tipos de agentes de separación y las operaciones que los involucran pero no es objetivo del presente trabajo el hacerlo, por lo que se recomienda se consulte la referencia (1).

El grado de separación que puede obtenerse con cualquiera de las operaciones de separación se indica mediante un factor de separación. Puesto que el objetivo que tiene toda operación de separación es obtener productos de composición diferentes, es lógico definir un factor de separación en función de las composiciones del producto:

$$\alpha_{ij} = \frac{x_{i1} / x_{j1}}{x_{i2} / x_{j2}}$$

El factor de separación,  $\alpha_{ij}$  entre los componentes  $i$  y  $j$  es la razón de las fracciones molares de los dos componentes en el producto 1 dividido por la razón en el producto 2. Es bien claro que el factor de separación permanecerá invariable si todas las fracciones molares se sustituyen por las fracciones másicas, caudales molares de los componentes individuales, o por caudales másicos de los mismos.

Una separación efectiva se consigue en el momento en que el factor de separación difiere significativamente de la unidad, es decir:

Si  $\alpha_{ij} = 1$ , ninguna separación de los componentes  $i$  y  $j$  tiene lugar.

Si  $\alpha_{ij} > 1$ , el componente  $i$  tiende a concentrarse en el producto 1 mas que el componente  $j$ , y el componente  $j$  tiende a concentrarse en el producto 2 mas que el componente  $i$ .

Por otro lado, si  $\alpha_{ij} < 1$ , el componente  $j$  tiende a concentrarse en el producto 1 preferentemente, y el componente  $i$  tiende a concentrarse preferentemente en el producto 2.

Ahora bien por convención los componentes  $i$  y  $j$  se seleccionan generalmente de modo que  $\alpha_{ij}$  sea superior a la unidad.

El factor de separación refleja las diferencias en las composiciones de equilibrio debidas a los fenómenos físicos fundamentales que provocan la separación. Puede reflejar también la construcción y la configuración del equipo usado para la separación. Por esta razón es conveniente definir un factor de separación inherente, que se define  $\alpha_{ij}$ , sin el supraíndice. El factor de separación inherente es el factor

de separación que se obtendrá bajo condiciones ideales. En el caso de las operaciones de separación de equilibrio, el factor de separación inherente corresponde a aquellas composiciones del producto que se obtendrían cuando se alcanzase el equilibrio entre las fases.

Se verá que el factor de separación inherente  $\alpha_{ij}$  y el factor de separación  $\alpha^*_{ij}$ , basados en las composiciones reales del producto, pueden utilizarse para el análisis de las operaciones de separación. Cuando  $\alpha_{ij}$  puede deducirse de forma relativamente fácil, la aproximación mas común es analizar una operación de separación sobre la base del factor de separación inherente  $\alpha^*_{ij}$  y tener en cuenta las desviaciones de la idealidad a través de eficacias. Este procedimiento es ventajoso, puesto que, como se verá,  $\alpha_{ij}$  es frecuentemente insensible a los cambios en la composición de la mezclas, temperatura y presión.

El modelo básico de destilación que describe la operación de una columna de destilación, utiliza el concepto de plato o etapa ideal de equilibrio. En el cual se tiene que el líquido y el vapor que salen de la misma, se encuentra en equilibrio. Además, se supone que las retenciones del líquido y el vapor se encuentran perfectamente mezcladas.

Las suposiciones de equilibrio y mezclado perfecto son esenciales, ya que a partir de estas se podrá hacer una

aproximación a los valores de la composición de los componentes en ambas fases líquido-vapor, a través de los principios termodinámicos y valores experimentales de equilibrio.

En los equipos de destilación, por lo general se utilizan diversos dispositivos (platos, charolas o empaques), para brindar un contacto íntimo entre las fases. Las charolas son colocadas una encima de otra y encerradas en una coraza cilíndrica para formar una columna o torre de destilación. De esta manera, cada plato representa en teoría una etapa ideal de equilibrio. En la Figura 2.4 se esquematiza una Columna de Destilación típica y los equipos periféricos que la componen.

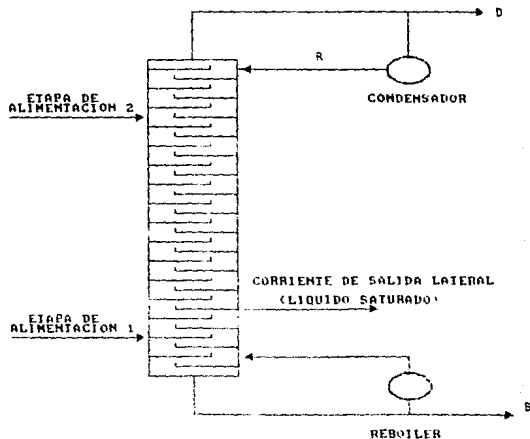
Principalmente, las columnas de destilación pueden ser divididas en dos tipos, dependiendo de su operación :

- i) Continuas, esto es, en donde la alimentación de la torre y la salida de los productos se lleva a cabo en forma ininterrumpida.
- ii) BATCH , en donde se lleva a cabo una secuencia de operación consistente en: alimentación de la torre, estabilización de la misma y salida de productos.

Una de las partes esenciales para un buen diseño de estas operaciones de separación es el conocimiento del equilibrio

FIGURA < 2.4 >

CONFIGURACION TIPICA DE UNA COLUMNA DE DESTILACION



de fase requerido. Por lo que el propósito del presente trabajo es dar a conocer métodos para estimar estos equilibrios a partir de un mínimo de información experimental.

### **III. METODOS DE CONTRIBUCION DE GRUPOS**



### III.- METODOS DE CONTRIBUCION DE GRUPOS.

#### 3.1 CONCEPTO DE CONTRIBUCION DE GRUPOS.

En los últimos años se ha dado mucha atención al desarrollo de métodos para el diseño de columnas de destilación y absorción, recibiendo una menor atención el desarrollo de métodos para extracciones líquido-líquido. Este trabajo pretende presentar una serie de procedimientos esquemáticos para el cálculo de equilibrio de multicomponentes líquido-vapor y líquido-líquido para mezclas comúnmente encontradas en los procesos de las industrias químicas.

El número de mezclas líquidas y de vapor en los procesos tecnológicos es increíblemente grande, por lo que no es razonable esperar que equilibrios experimentales líquido-vapor y líquido-líquido siempre estarán disponibles tan solo para una significativa fracción de este número de mezclas posibles. Además, para obtener buenos datos experimentales se requiere de habilidad experimental, experiencia y paciencia. Esto es por lo tanto, una necesidad económica para considerar técnicas para calcular equilibrios de fase para mezclas multicomponentes a partir de pocos datos experimentales.

Dichas técnicas o métodos requerirán solamente de un esfuerzo experimental limitado, siempre y cuando sean basados sobre fundamentos teóricos para proveer confiabilidad en la

interpolación y extrapolación con respecto a la temperatura, presión y composición.

El equilibrio líquido-vapor y líquido-líquido depende de la naturaleza de los componentes presentes, de la concentración en ambas fases, así como de la presión y la temperatura del sistema. Debido al gran número de variables las cuales determinan el equilibrio en multicomponentes, es esencial utilizar una herramienta organizacional eficiente, la cual reduzca los datos experimentales disponibles a un número pequeño de funciones y parámetros teóricamente significativos. Estas funciones y parámetros son llamados formas de los bloques constructores, los cuales construyen el equilibrio deseado. Dicha herramienta organizacional es proporcionada por análisis y síntesis termodinámico:

- Primero, los datos de componentes puros y binarios los cuales son limitados para producir cantidades termodinámicas fundamentales.
- Segundo, estas cantidades son reducidas para obtener parámetros en un modelo molecular. Ahora bien, con este modelo por síntesis puede ser usado para calcular el comportamiento de la fase vapor y líquida para multicomponentes. En este paso, es posible escalar sistemas de datos binarios y de componentes puros para obtener buenas estimaciones de las propiedades de mezclas multicomponentes de una gran variedad de componentes.

Los Métodos de Contribución de Grupos están basados en el concepto de contribución de grupos, los cuales han sido obtenidos de la estimación de una variedad de propiedades de componentes puros, tal como la densidad, capacidad calorífica y constantes críticas. La idea básica es que donde hay miles de compuestos químicos de interés en la tecnología, el número de grupos funcionales los cuales constituyen estos compuestos es mucho mas pequeño. Además, si asumimos que una propiedad física de un fluido es la suma de contribuciones hechas por los grupos funcionales de la molécula, obtenemos una técnica o metodología posible de correlacionar las propiedades de un gran número de fluidos en términos de un mucho menor número de parámetros, los cuales caracterizan las contribuciones de grupos individuales. En resumen, los Métodos de Contribución de Grupos predicen equilibrios de fase en sistemas en los cuales no existen datos.

Los Métodos de Contribución de Grupos son aproximaciones, en virtud de que la contribución de un determinado grupo en una molécula no es necesariamente la misma con respecto a otra molécula. La suposición fundamental de un Método de Contribución de Grupos es que la contribución hecha por un grupo es asumido a ser independiente de lo hecho por otro grupo. Esta suposición es válida solamente cuando la influencia de algún grupo en una molécula no es afectada por la naturaleza de otros grupos dentro de esta molécula. Por ejemplo, se esperaría que la contribución de un grupo C=O

(carbonilo) en una cetona (digamos acetona) sea la misma que la de un grupo  $C=O$  en un ácido orgánico (digamos, ácido acético). Por otro lado, la experiencia sugiere que la contribución de un grupo  $C=O$  en una acetona sea cercana (aunque no idéntica) a la contribución de un grupo  $C=O$  en 2-butanona.

La extensión de la idea del Grupo Funcional a mezclas es extremadamente atractiva; ya que el número de fluidos en la tecnología química es ya muy grande, el número de mezclas diferentes es aún mas grande, por muchos órdenes de magnitud. Un gran número de mezclas líquidas multicomponentes de interés en la industria química pueden ser constituidos a partir de los grupos funcionales establecidos hasta hoy.

Los métodos propuestos en este trabajo tienen una firme base termodinámica. Para el equilibrio líquido-vapor, el método seleccionado puede ser usado a presiones bajas o moderadas y que son comúnmente encontradas en los procesos de separación. Para el equilibrio líquido-líquido, el efecto de presión es generalmente despreciable a menos que esta sea muy grande o este cerca de la región crítica.

### 3.2 METODOS DE CONTRIBUCION DE GRUPOS.

En el diseño de columnas de destilación, torres de absorción, unidades de extracción y otros equipos de separación es necesario contar con datos de equilibrio. Los datos experimentales pueden ser encontrados en la literatura para diferentes mezclas, y para poder hacer interpolaciones y extrapolaciones en la concentración, temperatura y presión es necesario disponer de modelos confiables que nos sirvan para calcular estos equilibrios. Las ecuaciones de Wilson, NRTL y UNIFAC son ejemplos de los modelos ampliamente utilizados. Los parámetros en estos modelos son estimados frecuentemente de datos experimentales de equilibrios de mezclas binarias.

Para sistemas en los cuales los datos experimentales son reducidos o no existen, es necesario métodos predictivos. En años recientes, el enfoque por medio de Contribución de Grupos han venido a ser una herramienta valiosa para tales predicciones. A continuación se describen algunos de los Métodos de Contribución de Grupos para la predicción de equilibrios de fase que son aplicables a problemas actuales y que se encuentran en desarrollo.

ASOG ( Analytical Solution Groups ) y UNIFAC ( UNIQUAC Functional Group Activity Coefficients ) son los Modelos de Contribución de Grupos mejor establecidos para la predicción de datos de actividades en fase líquida para mezclas no-

electrolíticas. Los métodos están basados sobre el concepto **GRUPOS EN SOLUCION** . Los grupos son unidades estructurales como por ejemplo  $\text{CH}_3$  ,  $\text{OH}^-$  y otros, los cuales al adicionarse forman la molécula principal. En lugar de considerar una mezcla líquida como una solución de moléculas, la mezcla es considerada como una solución de grupos, representando esto una gran ventaja. El número de componentes de interés en la tecnología química es muy grande y el número de grupos que forman estos componentes es relativamente pequeño. Los coeficientes de actividad de un gran número de mezclas pueden ser calculados de parámetros característicos que representan unos pocos grupos de interacciones energéticas entre los grupos.

En ambos métodos los coeficientes de actividad son calculados mediante dos términos:

- a) Una parte combinatorial para diferencias en tamaño y forma de las moléculas.
- b) Otra parte residual para interacciones energéticas entre los grupos.

Como consecuencia de esta suposición, el logaritmo para el coeficiente de actividad puede ser escrito como:

$$\ln \Gamma_i = \ln \Gamma_i^C + \ln \Gamma_i^R$$

donde:

$F_i^C$  es la parte combinatoria o de tamaño o entrópica.

$F_i^R$  es la parte residual o de interacción o entálpica.

A continuación presentamos los distintos Métodos de Contribución de Grupos.

### 3.2.1.- Solución Analítica de Grupos (ASOG).

El método ASOG fue propuesto por primera vez por Derr y Deal (1969) y utiliza las ecuaciones de Wilson para describir la interacción entre los grupos y la ecuación de Flory-Huggins para describir la parte combinatoria, este método calcula el equilibrio líquido-vapor, líquido-líquido y sólido-líquido. El método ha sufrido modificaciones severas por varios autores. Una de las limitaciones que presenta este método es que únicamente un número limitado de parámetros de interacción de grupos han sido publicados en la literatura abiertamente. Kojima y Tochigi han modificado esta situación con la publicación de monogramas con el tratamiento del método ASOG para el cálculo del equilibrio líquido-vapor.

El método comprende 41 grupos y Kojima y Tochigi (2) han estimado 243 parámetros representativos de las 465 posibles

interacciones de grupos en el rango de temperatura de 303 a 423 °K.

Las ecuaciones para el cálculo de coeficientes de actividad son las siguientes:

$$\ln \Gamma_i = \ln \Gamma_i^C + \ln \Gamma_i^R \text{ -----(3.1.1)}$$

$$\ln \Gamma_i^C = (\ln \phi_i/x_i) + (1 - \phi_i/x_i) \text{ -----( 3.1.2 )}$$

$$\phi_i = x_i S_i / \sum_j x_j S_j \text{ -----( 2.1.3 )}$$

$$j = 1, 2, \dots, N$$

$S_i$  = No. de Átomos (distintos al hidrógeno) en la molécula  $i$ .

$s_i$  = Fracción del número de átomos en la molécula  $i$ .

$x_i$  = Fracción mol del líquido del componente  $i$ .

$N$  = No. de Componentes.

$$\ln \Gamma_i^R = \sum_K \delta_{Ki} ( \ln \tau_K - \ln \tau_K(i) ) \text{ -----(2.1.4)}$$

$$K = 1, 2, 3, \dots, M$$



$\delta_{ki}$  = No. de Átomos (distintos al hidrógeno) en el grupo K de la molécula i.

$\tau_K$  = Coeficiente de actividad del grupo K.

$\tau_K(i)$  = Coeficiente de actividad del grupo K en el componente puro i.

M = No. de Grupos.

$$\ln \tau_K = - \ln \sum_1 x_i a_{ki} + 1 - \sum_1 X_i a_{ik} / \sum_{K=1}^M a_{ik} \text{ -----(3.1.5)}$$

$a_{ki}$  = Parámetro de interacción característico del grupo K y i ( $a_{ki} = a_{ik}$ ).

$X_i$  = Fracción del grupo i.

$$X_i = \sum_i x_i \delta_{ii} / \sum_i \sum_K x_i \delta_{ki}$$

K = 1, 2, ..., M

i = 1, 2, ..., N

$$\ln a_{ki} = m_{ki} + n_{ki} / T \text{ -----( 3.1.6 )}$$

$m_{ki}, n_{ki}$  = Parámetros del Grupo, independientes de la temperatura.

T = Temperatura.

El término combinatorio es calculado por una ecuación similar a la ecuación de Flory-Huggins, en la cual únicamente las diferencias en tamaños de las moléculas son tomadas en consideración. El grupo residual del coeficiente de actividad  $\tau_k$  es calculado de acuerdo a la ecuación de Wilson con concentraciones dadas por la fracción de grupo  $X_k$ , siendo  $\tau_k$  una función de la temperatura también.

El tamaño de un grupo es normalmente fijado como el número de átomos (diferentes al hidrógeno) en el grupo. Para  $H_2O$ ,  $CH$  y  $C$  en alkanos, éstos adoptan los valores de:

$$\delta_{H_2O} = 1.6$$

$$\delta_{CH} = 0.8$$

$$\delta_C = 0.5$$

También cabe hacer notar que los parámetros de interacción del grupo  $ax_l$  entre los grupos  $K$  y  $l$  son considerados como funciones de la temperatura. que por cada par de grupos este nos da cuatro parámetros ( $m_{kl}$ ,  $n_{kl}$ ,  $m_{lk}$ ,  $n_{lk}$ ).

### 3.2.2.- UNIFAC.

El método UNIFAC es particularmente uno de los más confiables para calcular los coeficientes de actividad utilizando el concepto de Contribución de Grupos, siendo este una consecuencia de un modelo para el cálculo de coeficientes de actividad llamado UNIQUAC ( Universal Quasi-Chemical), el cual representa un intento para generalizar a moléculas de diferentes tamaños y formas. El modelo UNIQUAC fue propuesto por Denis Abrams y continuado por Aage Fredenslund .

El modelo UNIFAC desde su primera versión en 1975 puso en claro que poseía una gran solidez, requiriéndose de un gran esfuerzo para realizar que este método desarrollase su total potencial para incrementar su utilidad y seguridad.

El método UNIFAC ahora comprende 46 grupos. De las 561 posibles interacciones entre los grupos, 272 han sido estimados. El cálculo para el equilibrio líquido-vapor pueden ser realizados en un rango de temperatura de 300 a 425 °K para sistemas no-electrolíticos.

El UNIFAC al igual que ASOG tiene 2 términos, uno combinatorio y otro residual. Los parámetros necesarios para el uso de UNIFAC son:

a) Volúmenes de Grupo

- b) Areas superficiales de Grupo
- c) Parámetros de Interacción de Grupos (aaa y aam).

El método UNIFAC fue originalmente desarrollado para el cálculo de equilibrio líquido-vapor, y este ha sido un método flexible y confiable para estos propósitos.

Los parámetros de interacción de grupos han sido estimados de datos experimentales de equilibrios líquido-vapor. Predicciones de equilibrio líquido-líquido y de calores de mezcla (  $H^M$  ) son mostrados por Fredenslund (3).

Si un modelo de fase líquida da una buena representación simultánea del equilibrio líquido-vapor y  $H^M$ , es posible usar el modelo para cálculos de datos de equilibrio líquido-vapor a una temperatura para datos de equilibrio líquido-vapor a otra temperatura. Algunos autores (Skjold-Jorgensen (4) han mostrado que UNIFAC y UNIQAC pueden ser muy buenos para extrapolaciones de temperatura por la introducción de un número de coordinación generalizado  $z(T)$  en función de la temperatura.

Skjold-Jorgensen (4) mostraron que para mezclas de componentes no - asociados con la nueva función  $z(T)$ , se tiene:

- 1) Que la representación simultánea del equilibrio líquido - vapor y  $H^M$  es muy buena.
- 2) Que esto es posible para la predicción del equilibrio líquido-vapor a partir del método UNIFAC modificado con parámetros basados sobre datos de  $(H^M)$ .
- 3) Que la predicción de  $H^M$  a partir de una isoterma de un conjunto de datos para equilibrio líquido-vapor es cuantitativamente aceptable.

El método de UNIFAC modificado dependiente de la temperatura ha sido resultado superior al tipo simple de parámetros de interacción de grupos dependientes de la temperatura, ya que este último no tiene significado físico y extrapolaciones mas allá de la región de temperatura y componentes donde los parámetros fueron ajustados pueden llevar a grandes errores.

En resumen, el modelo UNIFAC modificado contiene aún algunos parámetros del modelo original, o sea dos por cada par de grupos.

El término combinatorio en UNIFAC y UNIQUAC no siempre representa con exactitud los coeficientes de actividad para sistemas donde la contribución residual puede tener un valor de cero, por ejemplo en mezclas de hidrocarburos alifáticos.

Las ecuaciones utilizadas para el modelo UNIFAC son:

$$\ln \Gamma_i = \ln \Gamma_i^C + \ln \Gamma_i^R \text{ ----- ( 3.2.1 )}$$

$$\ln \Gamma_i^C = \left( (\ln \phi_i/x_i) + 1 - \phi_i/x_i \right) - 1/2 z q_i (\ln \phi_i/\theta_i + 1 - \phi_i/\theta_i) \text{ ( 3.2.2 )}$$

$$\phi_i = x_i \tau_i / \sum_j x_j \tau_j$$

$$\theta_i = x_i q_i / \sum_j x_j q_j$$

(Suma de todos los componentes)

$$\tau_i = \sum_K \delta_{K_i} R_K$$

$$q_i = \sum_K \delta_{K_i} Q_K$$

(Suma de todos los componentes)

$R_K$  = parámetro de volumen para el grupo K.

$Q_K$  = parámetros de área superficial para el grupo K.

$\delta_{K_i}$  = número de grupos de tipo K en la molécula i.

$x_i$  = fracción mol del líquido del componente i.

$z$  = número de coordinación = 10

$$\ln \Gamma_i^R = \sum_k \delta_{ki} (\ln \tau_k - \ln \tau_k(i)) \text{ ----- ( 3.2.3 )}$$

$$\ln \tau_k = Q_k (1 - \ln (\sum_m Q_m \Omega_{mk}) - \sum_n (\theta_m \Omega_{kn}) / (\sum_n Q_n \Omega_{nn})) \text{ ----- ( 3.2.4 )}$$

$$Q_{nm} = \exp ( -a_{nm} / T ) \text{ ----- ( 3.2.5 )}$$

$$\theta_m = Q_m X_m / \sum_n Q_n X_n$$

$$X_m = \sum_j \delta_{mj} x_j / \sum_j \sum_n \delta_{nj} x_j$$

$a_{mn}$  = Parámetro de interacción de grupo para la interacción entre grupos m y n.

Kikic (5) propuso una nueva expresión para el término combinatorio en UNIFAC (UNIQUAC). La parte de Flory-Huggins de la expresión para  $\Gamma_i^C$  ha sido cambiada como sigue:

$$\ln \Gamma_i^C = ( \ln \Omega_i / x_i + 1 - \Omega_i / x_i ) - 1/2 \sum_j z_{ij} ( \ln \phi_j / \theta_j + 1 - \phi_j / \theta_j ) \text{ ----- ( 3.2.6 )}$$

en la cual:

$$\Omega_i = x_i \tau_i^{2/3} / \sum_j x_j \tau_j^{2/3}$$

donde:

$v_j$  es el parámetro de volumen molar del componente  $j$ .

La nueva expresión para  $\ln \gamma_i^C$  resulta mas propia para predicciones de coeficientes de actividad en mezclas conteniendo hidrocarburos saturados.

### 3.2.3- PARAMETROS DE CONTRIBUCION DE GRUPOS (PFGC).

El método PFGC fue propuesto por Cunningham (6), cuyo rango de aplicabilidad fue extendido por Wilson (7) y Moshfeghian et al (8).

El líquido es considerado que tiene una estructura entretrejida o cristalina con cavidades. La energía de Helmholtz del líquido es escrita como sigue:

$$A \text{ (PFGC)} = A \text{ (FH)} + A \text{ (W)}$$

donde  $A \text{ (FH)}$  es una contribución de tamaño de Flory-Huggins, y  $A \text{ (W)}$  es un término de interacción para la cual la ecuación de Wilson modificada es utilizada. Este supone que las expresiones para la energía de Helmholtz son expresiones análogas para la energía de Gibbs. En ambas  $A \text{ (FH)}$  y  $A \text{ (W)}$  consideran la presencia de cavidades en la estructura



líquida. Esta ecuación permite ser transformada en una ecuación de estado mediante manipulaciones matemáticas y por aproximaciones físicas razonables.

La ecuación PFGC contiene tres parámetros y por cada grupo  $i$  puro:

$B_{ii}$  = la interacción entre grupos  $i$  (en función de  $T$ )

$b_i$  = el volumen de una mol del grupo  $i$ .

$s_i$  = un parámetro proporcional a el número de grados de libertad externos por grupo  $i$  (vibracional, rotacional, etc.).

En el caso de mezclas, es necesario un coeficiente de interacción adicional por par de grupos.

Cunningham (6) aplica la ecuación PFGC especialmente para sistemas de hidrocarburos en un amplio rango de presiones y de componentes por ejemplo  $C_1$  a  $C_{32}$ . Para equilibrios líquido-vapor en mezclas con componentes polares fueron predichos con buenos resultados.

Moshfeghian (8) ha revisado y extendido la tabla de los parámetros y ha realizado cálculos para un gran número de sistemas, incluyendo hidrocarburos largos y componentes

El valor de  $\alpha$  depende que ASOG es aplicable especialmente para sistemas de procesos de licuefacción de carbón natural.

### 3.3.- COMPARACION ENTRE ASOG Y UNIFAC.

La comparación que se pretende hacer es por el hecho de que ASOG y UNIFAC se basan sobre el concepto de composición local. Una verdadera comparación entre estos dos métodos es un tanto difícil, ya que por lo general no es posible ver la diferencia en la cantidad de las aplicaciones. Ambos métodos dan unos coeficientes de actividad promedio con una exactitud de  $\pm 10\%$ . Sin embargo, en la actualidad el método UNIFAC tiene algunas ventajas en comparación con el método ASOG, siendo las siguientes:

- 1.- El método UNIFAC tiene un amplio rango de aplicación ya que tiene un gran número de parámetros de interacción que han sido publicados.

La más severa limitación para aplicar ASOG es que solamente un número limitado de parámetros de <sup>1</sup>interacción de grupos han sido publicados. Algunas compañías industriales tienen listas extensivas de parámetros ASOG aplicables a mezclas que son de importancia para los análisis.

- 2.- Los parámetros de interacción de grupos son menos dependientes de la temperatura para UNIFAC que para ASOG.
  
- 3.- El método UNIFAC esta basado en el modelo UNIQUAC. por lo tanto las relaciones de cálculo de los términos combinatorios y residuales tiene bases teóricas. Mucha de la arbitrariedad en la selección de ecuaciones para los dos términos en ASOG son por lo tanto removidos y el usuario no tendrá dificultades en definir los grupos estructurales de una mezcla dada.
  
- 4.- Las diferencias en la estructura molecular son tomadas en cuenta por el uso no solamente de los volúmenes de grupo sino también de las áreas de grupo.

Por lo dicho anteriormente, se selecciona el método UNIFAC para realizar un estudio mas detallado sobre su funcionamiento y aplicación, y esto será desarrollado en el siguiente capítulo.

**IV. ESTUDIO DEL METODO DE  
CONTRIBUCION DE GRUPOS UNIFAC.**

#### IV.- ESTUDIO DEL METODO DE CONTRIBUCION DE GRUPOS (UNIFAC).

En esta sección se describe en forma detallada el modelo UNIFAC y los parámetros necesarios para su aplicación.

##### 4.1.- El Modelo UNIFAC.

Estimación de propiedades termodinámicas de mezclas líquidas usando Contribución de Grupos fue sugerido por primera vez por Langmuir (10). Esta sugerencia recibe poca atención, posteriormente Derr y sus colaboradores (11) utilizan este método para correlacionar calores de mezcla, seguidos por Wilson y Deal (12), quienes desarrollan el método de solución de grupos para coeficientes de actividad. El método UNIFAC está basado sobre estas ideas.

El objetivo básico del método es el de utilizar datos de equilibrios de fase existentes para producir equilibrios de fase de sistemas para los cuales estos no están disponibles.

El método involucra:

Reducción adecuada de datos de coeficientes de actividad obtenidos experimentalmente para obtener los parámetros de interacciones entre pares de grupos estructurales en sistemas no electrolíticos y utiliza estos parámetros para predecir

coeficientes de actividad para otros sistemas los cuales han sido analizados experimentalmente pero los cuales contienen algunos grupos funcionales. Un "grupo" es una unidad estructural como por ejemplo  $-CH_3$ ,  $-COCH_3$  y  $-CH_2Cl$ . Las suposiciones fundamentales del método de solución de grupos son:

- 1.- El logaritmo del Coeficiente de Actividad es igual a la suma de dos contribuciones: una parte combinatoria, esencialmente para establecer diferencias en tamaño y forma de las moléculas en la mezcla, y una parte residual, esencialmente para interacciones energéticas.

Para la molécula  $i$  en alguna solución:

$$\ln \Gamma_i = \ln \Gamma_i^C + \ln \Gamma_i^R \text{ ----- ( 4.1 )}$$

combinatorial                  residual

La diferenciación entre éstos dos tipos de contribuciones para  $\Gamma_i$  es necesario, ya que la no idealidad de la fase líquida causada por efectos de tamaño y forma no pueden estar asociados con grupos de interacciones energéticas.

- 2.- La parte residual, es igual a la suma de contribuciones individuales de cada grupo soluto en la solución menos la suma de contribuciones individuales de los componentes puros involucrados:

$$\ln \Gamma_{iR} = \sum^K \delta_K(i) ( \ln \tau_K - \ln \tau_K(i) ) \text{ ----- ( 4.2 )}$$

para todos los grupos, donde:

$K = 1, 2, \dots, N$ , donde  $N$  es el número de grupos diferentes en la mezcla.

$\tau_K$  es el coeficiente de actividad residual del grupo  $K$  en una solución;  $\tau_K(i)$  es el coeficiente de actividad residual del grupo  $K$  en una solución de referencia conteniendo solamente moléculas del tipo  $i$ ; y  $\delta_K$  es el número de grupos del tipo  $K$  en la molécula  $i$ . El término  $\tau_K(i)$  es necesario para lograr la normalización cuando el coeficiente de actividad llega a ser la unidad como  $x_i \rightarrow 1$ . El estado estándar para el coeficiente de actividad del grupo residual no necesita ser definido debido a cancelación de términos.

3.- Los grupos involucrados conteniendo grupos del tipo  $1, 2, \dots, N$  son únicamente función de la concentración de los grupos y la temperatura:

$$\frac{\tau_K}{\tau_K(i)} \rightarrow = F ( X_1, X_2, \dots, X_M; T ) \text{ ----- ( 4.3 )}$$

Algunas funciones son utilizadas para representar  $\tau_k$  y  $\tau_k(i)$ . Las fracciones de grupo  $X$  son definidas como:

$$X_k = \sum \delta_{k(i)} x_i / \sum \sum \delta_{j(i)} x_i \text{-----(4.4)}$$

$i = 1, 2, \dots, M$  (número de componentes)

$j = 1, 2, \dots, N$  (número de grupos)

De acuerdo a esta suposición, por ejemplo el coeficiente de actividad residual para todas las mezclas cetonas-alkanos pueden ser calculados por alguna función  $F$ . Esto es, que algunos parámetros son usados para representar el equilibrio vapor-liquido en mezclas acetona-hexano y mezclas 5 decano-nonanone.

Para formular un método de Contribución de Grupos específico para la predicción de coeficientes de actividad, es necesario definir:

- La ecuación para calcular  $\ln \Gamma_C$ .
- La ecuación para calcular  $\tau_k$  y  $\tau_k(i)$ .
- Los grupos funcionales para formar las moléculas ( asignación de grupos ).

En los modelos de Derr, Deal, Wilson y ASOG ( Solución Analítica de Grupos ) se tiene:



(1) Los coeficientes de actividad combinatorios son calculados usando la ecuación a térmica de Flory-Huggins:

$$\ln \Gamma_1^C = \ln \tau_1^{FH} + (1 - \tau_1^{FH}) \dots \dots \dots (4.5)$$

$$\tau_1^{FH} = \delta_1^{FH} / \sum \delta_j^{FH} x_j$$

en la cual  $\delta_1^{FH}$  es el número de átomos en la molécula excepto átomos de hidrógeno.

(2)  $\tau_k$  y  $\tau_k^{(1)}$  son representados por la ecuación de Wilson:

$$\ln \Gamma_k = 1 - \ln \sum x_j \Omega_{kj} - \sum (x_i \Omega_{ik} / \sum x_j \Omega_{ij})$$

i y j = 1, 2, ..., N

dónde la variable independiente es la fracción del grupo  $X_k$

(3) A todos los grupos se les asignan números enteros asociados con su tamaño. Por ejemplo, los grupos  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}$ ,  $\text{CO}$  son asignados al tamaño 1.0, los grupos ester  $\text{COO}$  es asignado al tamaño 3, etc., únicamente el agua difiere de este esquema, siendo asignado a este el tamaño 1.4.

La combinación del modelo UNIQUAC (13) con el método de solución de grupos da origen al método UNIFAC. En el cual:

(1) Los coeficientes de actividad combinatorio son calculados mediante potencias de Staverman, introducidos por Abrahams y Prausnitz en el modelo UNIQUAC (13). La parte combinatorial toma en cuenta las contribuciones en las diferencias del tamaño y forma molecular. Estas son obtenidas de una buena definición del volúmen del grupo de su área constante  $R_k$  y  $Q_k$ .

(2) Los coeficientes de actividad de los grupos residuales son representados por la parte residual de la ecuación UNIQUAC (ecuación 3.2.3), donde la variable independiente concentración es la fracción del grupo,  $X_k$ .

(3) Las constantes que representan los tamaños y las formas de los grupos  $R_k$  y  $Q_k$  son obtenidos de datos de estructuras atómicas y moleculares, siendo estas constantes los grupos de Van der Waals de volúmen y de área superficial  $V_k$  y de  $A_k$ :

$$R_k = V_k/15.17 \text{ y } Q_k = A_k/(2.5 * 10^9) \text{ ----- ( 4.6 )}$$

Los factores de normalización 15.17 y  $2.5*10^9$  son derivados por Abrahams y Prausnitz (13).

El método UNIFAC esta constituido por las siguientes ecuaciones:

Coefficientes de Actividad Combinatorios para el Componente i:

$$\ln \Gamma_i^C = \ln \theta_i / x_i + z/2 \left( q_i \ln \theta_i / \phi_i \right) + l_i - \phi_i / x_i \left( \sum_j l_j \right) \quad (4.7)$$

$$l_i = z/2 ( r_i - q_i ) - ( r_i - 1 ) \quad ; \quad z = 10$$

$$\theta_i = q_i x_i / \sum_j q_j x_j \quad ; \quad \phi_i = r_i x_i / \sum_j r_j x_j$$

$\theta_i$  = fracción del área superficial molecular.

$\phi_i$  = fracción del volumen molecular.

i = 1, 2, ..., M ( Número de componentes )

El volumen y el área superficial de Van Der Waals se representa respectivamente como :

$$\begin{aligned} r_i &= \sum_k^K \delta_k(i) R_k \\ q_i &= \sum_k^K \delta_k(i) Q_k \end{aligned} \quad (4.8)$$

k = 1, 2, ..., N ( Número de grupos en la molécula i )

son determinadas cuando los grupos correspondientes y sus propiedades. Note que  $\Gamma_i^C$  no depende de la temperatura

Coefficientes de Actividad Residual para el grupo K:

$$\ln \tau_K = Q_K (1 - \ln (\frac{\sum_m \Omega_{mK}}{n} - \frac{\sum_m (\theta_m \Omega_{mK})}{(\sum_n \Omega_{nK})}) ) \text{ ----- ( 4.9 )}$$

m y n = 1, 2, ..., N (todos los grupos)

La ecuación (3.1.9) también es utilizada para  $\tau_K(\cdot)$ . La ecuación es similar a las usadas en el modelo UNIQUAC para calcular  $\Gamma_i^s$ .

$$\theta_m = Q_m X_m / \sum_n Q_n X_n \text{ ----- ( 4.10 )}$$

$\theta_m$  = Fracción del área del grupo

$X_m$  = Fracción superficial del grupo

con m = 1, 2, ..., M

n = 1, 2, ..., N

El parámetro  $\Omega_{nm}$  de la ecuación (3.1.9) está dado por la expresión:

$$\Omega_{nm} = \exp ( -a_{nm} / T ) \text{ ----- ( 4.11 )}$$

En la ecuación (3.1.11) contiene el parámetro de interacción de grupos.  $a_{nm}$ , este es una medida de la diferencia en la

energía de interacción entre un grupo n y un grupo m y entre dos grupos m

Notese que  $u_{nm}$  y  $u_{mn}$  que el parámetro de interacción de grupos es independiente de la temperatura. Hay dos parámetros de interacción de grupos para cada par de grupos. Los parámetros pueden ser evaluados de datos de equilibrio para ternarios o mayores.

En la contribución combinatoria el coeficiente de actividad [ecuación ( 4.7 )] depende únicamente del tamaño y forma de la molécula presente. Para moléculas de cadenas grandes,  $q_i/r_i$  tiende a un valor constante, y en este límite, la ecuación ( 4.7) se reduce a una ecuación similar a la ecuación de Flory -Huggins usada en el método ASOG (14).

La contribución residual del coeficiente de actividad, ecuación ( 4.9 ), depende del área y las interacciones de los grupos. Cuando todas las áreas son iguales, la ecuación (4.9) es similar a la usada por el método ASOG (8).

El método UNIFAC presenta varias ventajas:

- 1.- Flexibilidad, debido a que cuenta con bases para el establecimiento de los tamaños y formas de los grupos.

- 2.- Simplicidad; ya que los parámetros son casi independientes de la temperatura. en el rango de temperatura considerado para la validez del método.
- 3.- Mayor rango de aplicabilidad, debido a la disponibilidad de parámetros para un número considerable de diferentes grupos funcionales.

El método puede ser aplicado a mezclas binarias y multicomponentes no electrolíticas en condiciones donde el modelo UNIFAC tiene validez partiendo de la región crítica. Además, todos los componentes deben ser considerables. El rango de temperatura es entre 300°-425° K. Como una limitación, raramente será aplicado a mezclas conteniendo componentes con más de diez grupos funcionales.

La capacidad del método UNIFAC para predecir el equilibrio en sistemas donde no existen datos termodinámicos es explicada en la referencia (15) con mayor detalle.

#### 4.2.- Parámetros de Interacción de Grupos.

Todos los métodos de Contribución de Grupos son aproximaciones, debido a que cualquier grupo dentro de una molécula no es completamente independiente de los otros grupos dentro de la misma molécula y esta interdependencia es la base esencial de todos los métodos de Contribución de Grupos.

TABLA 4.1 ESPECIFICACION DE PARAMETROS UNIFAC Y ASIGNACION DE GRUPOS MUESTRA

NUMERO DE GRUPO			ASIGNACION DE GRUPOS MUESTRA				
PRINCIPAL	SEC.	NOMBRE	R	Q	P. MOL.	N O G P	I D G P
1	1	CH <sub>3</sub>	0.9011	0.848	15.03	2,2,-4-Trimetilpentano	
1	2	CH <sub>2</sub>	0.6744	0.540	14.03	5	1
1	3	CH	0.4469	0.228	13.02	1	2
						1	3
1	4	C	0.2195	0	12.01	1	4
2	5	CH <sub>2</sub> =CH	1.3454	1.175	27.05	3-Metil-1-hexano	
2	6	CH=CH	1.1167	0.857	26.04	2	1
2	7	CH <sub>2</sub> =C	1.1173	0.988	25.04	2	2
2	8	CH=C	0.8885	0.675	25.03	1	3
2	9	C=C	0.6605	0.485	24.02	1	5
3	10	ACH	0.5315	0.400	13.02	BENCENO:	
3	11	AC	0.3652	0.120	12.01	6	10
4	12	ACCH <sub>3</sub>	1.2555	0.968	27.05	XILENO :	
4	13	ACCH <sub>2</sub>	1.0375	0.660	26.04	4	10
4	14	ACCH	0.8121	0.548	25.03	2	12
5	15	OH	1.0000	1.200	17.01	ETANOL :	
						1	1
						1	2
						1	15
6	16	CH <sub>2</sub> OH	1.4311	1.432	32.04	METANOL:	
7	17	H <sub>2</sub> O	0.9200	1.400	18.02	1	16
						1	17
8	18	ACOH	0.8952	0.680	29.02	FENOL :	
						1	18
9	19	CH <sub>3</sub> CO	1.6724	1.488	43.05	METILETILCETONA:	
9	20	CH <sub>2</sub> CO	1.4457	1.180	42.04	1	1
						1	2
						1	19

TABLA 4.1 ESPECIFICACION DE PARAMETROS UNIFAC Y ASIGNACION DE GRUPOS MUESTRA

NUMERO DE GRUPO			ASIGNACION DE GRUPOS MUESTRA				
PRINCIPAL	SEC.	NOMBRE	R	Q	P. HDL.	N O G P	I D G P
10	21	CHO	0.9980	0.948	29.02	1	HEXANOL:
						4	1
						1	2
						1	21
11	22	CH <sub>3</sub> COO	1.9031	1.728	59.04	1	BUTI-ACETATO:
11	23	CH <sub>2</sub> COO	1.6784	1.420	58.04	1	1
						3	2
						1	22
12	24	HCOO	1.2420	1.188	45.02	1	FORMATO DE ESTILO:
						1	1
						1	2
						1	24
12	25	CH <sub>3</sub> O	1.1450	1.088	31.03	1	ETIL-ETER:
13	26	CH <sub>2</sub> O	0.9193	0.780	30.03	2	1
13	27	CH-O	0.6908	0.468	29.02	1	2
13	28	FCH <sub>2</sub> O	0.9183	1.100	30.03	1	26
14	29	CH <sub>3</sub> NH <sub>2</sub>	1.5959	1.544	31.06	1	PROFIL-AMINA:
14	30	CH <sub>2</sub> NH <sub>2</sub>	1.3692	1.236	30.05	1	1
14	31	CHNH <sub>2</sub>	1.1417	0.924	29.04	1	2
						1	30
15	32	CH <sub>3</sub> NH	1.4337	1.244	30.05	1	DIETIL-AMINA:
15	33	CH <sub>2</sub> NH	1.2070	0.936	29.04	2	1
15	34	CHNH	0.9795	0.824	28.03	1	2
						1	33
16	35	CH <sub>3</sub> N	1.1865	0.940	29.04	1	TRIETIL-AMINA:
16	36	CH <sub>2</sub> N	0.9597	0.822	28.03	3	1
						2	2
						1	36
17	37	ACNH <sub>2</sub>	1.0600	0.816	28.03	5	ANILINA:
						1	10
						1	37



TABLA 4.1 ESPECIFICACION DE PARAMETROS UNIFAC Y ASIGNACION DE GRUPOS MUESTRA

NUMERO DE GRUPO			ASIGNACION DE GRUPOS MUESTRA				
PRINCIPAL	SEC.	NOMBRE	R	Q	P. MOL.	NO G P	ID G P
18	28	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N	2.9997	2.110	79.10		METIL-PIRIDINA:
18	28	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N	2.8332	1.830	78.09	1	1
18	40	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N	2.6870	1.557	77.09	1	35
18	41	CH <sub>3</sub> CN	1.8701	1.704	41.05		PROPIONITRILÓ:
18	42	CH <sub>2</sub> CN	1.8404	1.418	40.04	1	1
						1	40
20	43	COOH	1.3013	1.224	45.02		ACIDO ACETICO:
20	44	HCOOH	1.5289	1.532	46.03	1	1
						1	43
21	45	CH <sub>2</sub> CL	1.4654	1.264	49.48		CLORO-ETANO:
21	36	CHCL	1.2580	0.852	48.47	1	1
21	47	CCl	1.0060	0.724	47.46	1	45
22	48	CH <sub>2</sub> CL <sub>2</sub>	2.2564	1.938	94.93		1-DICLOROETANO:
22	49	CHCL <sub>2</sub>	2.0506	1.684	93.92	1	1
22	50	CCl <sub>2</sub>	1.8018	1.448	92.92	1	49
23	51	CHCl <sub>3</sub>	2.8709	2.410	119.38		1,1,1-TRICLOROETANO:
23	52	CCl <sub>3</sub>	2.6491	2.184	118.37	1	1
						1	52
24	53	CCl <sub>4</sub>	3.3900	2.910	152.82		TRICLOROMETANO:
						1	53
25	54	ACCl	1.1562	0.844	47.46		CLOROBENCENO:
						5	10
						1	54
26	55	CH <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	2.0086	1.869	51.04		NITROETANO:
26	56	CH <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	1.7818	1.560	50.03	1	1
26	57	CHNO <sub>2</sub>	1.5544	1.348	59.02	1	56
26	58	CCNO <sub>2</sub>	1.4177	1.194	58.02		NITROBENCENO:
						5	10
						1	58

TABLA 4.1 ESPECIFICACION DE PARAMETROS UNIFAC Y ASIGNACION DE GRUPOS MUESTRA

NUMERO DE GRUPO			ASIGNACION DE GRUPOS MUESTRA				
PRINCIPAL	SEC.	NOMBRE	R	Q	P. MOL.	N O G P	I D G P
28	59	CS <sub>2</sub>	2.0570	1.650	76.13		DISULFURO DE CARBONO:
						1	56
29	60	CH <sub>3</sub> SH	1.8770	1.676	48.10		ETANOETIOL:
29	61	CH <sub>3</sub> SH	1.6510	1.368	47.09	1	1
						1	61
30	62	FURFURAL	3.1630	2.481	96.09		FURFURAL:
						1	62
31	63	(CH <sub>2</sub> OH) <sub>2</sub>	2.4088	2.248	62.07		ETILENGLICOL:
						1	63
32	64	I	1.2540	0.992	126.90		IODOMETANO:
						1	1
						1	64
33	65	BR	0.9492	0.832	79.90		BROMOETANO:
						1	1
						1	64
34	66	CH-TRIF-C	1.2920	1.088	25.03		PROPINO:
34	67	C-TRIF-C	1.0612	0.784	24.02	1	1
						1	66
36	68	MeSO	2.8265	2.472	78.17		DIMETILSULFOXIDO:
						1	68
36	69	ACRY	2.3144	2.052	53.06		ACRILONITRIL:
						1	69
37	70	Cl(C=Cl)	0.7910	0.724	35.45		TRICLOROETILENO:
						1	8
						1	70
38	71	ACF	0.6948	0.524	31.01		FLUOROBENCENO:
						1	10
						1	71

TABLA 4.1 ESPECIFICACION DE PARAMETROS UNIFAC Y ASIGNACION DE GRUPOS MUESTRA

NUMERO DE GRUPO			ASIGNACION DE GRUPOS MUESTRA				
PRINCIPAL	SEC.	NOMBRE	R	Q	P. MOL.	N O G P	I D G P
38	70	DMF-1	2.6856	2.136	73.09		DIMETILFORMAMIDA:
39	70	DMF-2	2.5722	2.130	43.03	1	72
						2	1
						1	73
40	74	CF <sub>2</sub>	1.4060	1.390	1.390		PERFLUOROETANO:
40	75	CF <sub>2</sub>	1.0105	0.920	50.01	2	74
40	76	CF	0.6150	0.450	31.04		
40	77	COO	1.3900	1.390	44.01		BUTILACETATO:
						2	1
						1	2
						1	77
41	78	SiH <sub>3</sub>	1.6035	1.253	31.11		METILSILANO:
40	79	SiH <sub>2</sub>	1.4447	1.028	30.10	1	1
42	80	SiH	1.2851	0.749	29.09	1	78
42	81	Si	1.0470	0.410	28.09		
47	82	SiH <sub>2</sub> O	1.4338	1.062	46.10		HEXAMETIL-DISILOXANO:
43	83	SiHO	1.3030	0.784	45.09	2	1
47	84	SiO	1.1044	0.466	44.09	1	81
						1	84
44	85	TER-N	0.2854	0.092	14.01		TRITILAMINA:
						3	1
						3	2
						1	95
45	86	AMID-H	1.4550	1.305	44.03		ACETAMIDA:
						1	1
						1	88
45	87	CON(Me) <sub>2</sub>	2.8590	2.428	72.07		N,N-METILETILAMIDA:
45	88	CONMeCH <sub>3</sub>	2.6320	2.120	71.08	2	1
45	89	CON(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	2.4050	1.912	70.07	1	89

TABLA 4.2 PARAMETROS DE INTERACCION DE GRUPOS (ann), EN GRADOS KELVIN.

NUMERO DE GRUPO PRINCIPAL	1	2	3	4	5	6
1	0.000	86.020	61.130	76.500	986.500	697.200
2	-35.360	0.000	38.810	74.150	524.100	787.600
3	-11.120	3.446	0.000	167.000	636.100	637.300
4	-69.700	-113.600	-146.800	0.000	803.200	603.200
5	156.400	457.000	89.600	25.820	0.000	-137.100
6	16.510	-12.520	-50.000	-44.500	249.100	0.000
7	300.000	496.100	362.300	377.600	-229.100	289.600
8	275.800	217.500	25.340	244.200	-451.600	-265.200
9	26.760	42.920	140.100	365.800	164.500	108.700
10	505.700	133.000	0.000	0.000	-404.800	-340.200
11	114.800	132.100	85.840	-170.000	245.400	249.600
12	90.490	-62.550	0.000	0.000	191.200	155.700
13	93.360	26.510	52.130	65.690	237.700	339.700
14	-30.480	1.163	-44.850	0.000	-164.000	-481.700
15	65.330	-28.700	-22.310	223.000	-150.000	-500.400
16	-83.980	-28.380	-223.900	109.900	28.600	-406.800
17	5339.000	0.000	650.400	979.800	529.000	5.182
18	-101.600	0.000	31.870	49.800	-132.300	-378.200
19	24.820	-40.620	-22.970	-138.400	-185.400	157.800
20	315.300	1264.000	62.320	268.200	-151.600	1020.000
21	91.460	97.510	4.680	122.900	562.200	529.000
22	34.010	18.250	121.300	0.000	747.700	669.900
23	36.700	51.060	288.500	33.610	742.100	649.100
24	-78.450	160.900	-4.700	134.700	856.300	860.100
25	-141.300	-158.800	-237.700	375.500	246.900	661.600
26	-32.690	1.996	10.380	-97.050	341.700	252.600
27	5541.000	0.000	1824.000	-127.800	561.600	0.000
28	-52.650	16.620	21.500	40.680	823.500	914.200
29	-7.481	0.000	28.410	0.000	461.600	382.800
30	-25.310	0.000	157.300	404.300	521.600	0.000
31	140.000	0.000	221.400	150.600	267.600	0.000
32	128.000	0.000	58.680	0.000	501.300	0.000
33	-31.520	0.000	155.600	291.100	721.900	0.000
34	-72.880	41.380	0.000	0.000	0.000	0.000
35	50.490	422.400	-2.504	-143.200	-25.870	695.000
36	-165.900	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
37	47.410	124.200	395.800	0.000	738.900	528.000
38	-5.122	0.000	-237.200	-157.300	649.700	645.900
39	-31.950	249.000	-133.900	-240.200	64.160	172.200
40	147.300	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
41	529.000	1397.000	317.600	615.800	88.630	171.000
42	97.900	0.000	-184.300	191.600	85.190	0.000
43	109.200	0.000	293.800	221.800	84.850	0.000
44	272.000	0.000	-288.000	-1020.000	0.000	-658.000
45	8960.000	-963.000	-63.100	-196.000	0.000	0.000
46	-11.100	0.000	-11.800	-36.600	0.000	0.000

TABLA 4.2 (CONTINUACION)

NUMERO DE GRUPO PRINCIPAL	7	8	9	10	11	12
1	1318.000	1333.000	476.400	677.000	232.100	741.400
2	270.600	526.100	182.600	-35.100	37.850	449.100
3	903.800	1329.000	25.770	0.000	5.994	0.000
4	5695.000	884.900	-52.100	0.000	5688.000	0.000
5	353.500	-259.700	84.000	441.800	101.000	193.100
6	-181.000	-101.700	23.390	306.400	-10.720	193.400
7	0.000	324.500	-195.400	-257.300	14.420	0.000
8	-601.800	0.000	-356.100	0.000	-449.400	0.000
9	472.500	-133.100	0.000	-37.360	-213.700	0.000
10	232.700	0.000	128.000	0.000	-448.000	0.000
11	10000.000	-36.720	372.200	2390.000	0.000	372.900
12	0.000	0.000	0.000	0.000	-261.100	0.000
13	-314.700	0.000	52.380	-7.838	461.300	0.000
14	-330.400	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
15	-448.200	0.000	0.000	0.000	136.000	0.000
16	-598.800	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
17	-339.500	0.000	-399.100	0.000	0.000	0.000
18	-332.900	-341.600	-51.540	0.000	0.000	0.000
19	242.800	0.000	-287.500	0.000	-266.600	0.000
20	-661.170	0.000	-297.800	0.000	-256.300	312.500
21	698.200	0.000	286.300	-47.510	0.000	0.000
22	708.700	0.000	423.200	0.000	-132.900	0.000
23	826.700	0.000	552.100	0.000	176.500	468.900
24	1201.000	10000.000	372.000	0.000	129.500	0.000
25	920.400	0.000	128.100	0.000	-246.300	0.000
26	417.900	0.000	-142.600	0.000	0.000	0.000
27	360.700	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
28	1081.000	0.000	303.700	0.000	243.800	0.000
29	0.000	0.000	160.600	0.000	0.000	239.800
30	23.480	0.000	317.500	0.000	-146.300	0.000
31	0.000	838.400	0.000	0.000	152.000	0.000
32	0.000	0.000	138.000	0.000	21.920	0.000
33	0.000	0.000	-142.600	0.000	0.000	0.000
34	0.000	0.000	443.600	0.000	0.000	0.000
35	-240.000	0.000	110.400	0.000	41.570	0.000
36	386.600	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
37	0.000	0.000	-40.900	0.000	16.990	0.000
38	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
39	-287.100	0.000	97.040	0.000	0.000	0.000
40	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
41	284.400	-167.300	123.400	0.000	-234.900	65.370
42	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
43	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
44	-1080.000	0.000	-435.000	-686.000	-463.000	0.000
45	0.000	0.000	-444.000	-167.000	0.000	0.000
46	0.000	0.000	1530.000	-60.800	-466.000	0.000

TABLA 4.2 (CONTINUACION)

NUMERO DE GRUPO PRINCIPAL	13	14	15	16	17	18
1	251.500	391.500	225.700	206.600	1245.000	287.700
2	214.500	240.900	163.900	61.110	0.000	0.000
3	32.140	161.700	122.800	90.490	668.200	-4.449
4	213.100	0.000	-49.290	23.500	764.700	52.800
5	28.060	83.020	42.700	-323.000	-348.200	170.000
6	-180.600	359.300	266.000	53.900	335.500	580.500
7	540.500	48.890	168.000	304.000	213.000	459.000
8	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-305.500
9	5.202	0.000	0.000	0.000	937.900	165.100
10	304.100	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11	-235.700	0.000	-73.500	0.000	0.000	0.000
12	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
13	0.000	0.000	141.700	0.000	0.000	0.000
14	0.000	0.000	63.720	-41.110	0.000	0.000
15	-49.300	108.800	0.000	-189.200	0.000	0.000
16	0.000	38.890	865.900	0.000	0.000	0.000
17	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
18	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
19	0.000	0.000	0.000	0.000	617.100	134.300
20	-338.500	0.000	0.000	0.000	0.000	-313.500
21	225.400	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
22	-197.700	0.000	0.000	-141.400	0.000	587.300
23	-20.930	0.000	0.000	-293.700	0.000	18.780
24	113.900	261.100	91.130	-126.000	1301.000	309.200
25	0.000	203.500	-108.400	1088.000	323.000	0.000
26	-94.490	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
27	0.000	0.000	0.000	0.000	5250.000	0.000
28	112.400	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
29	63.710	106.700	0.000	0.000	0.000	0.000
30	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
31	9.207	0.000	0.000	0.000	164.400	0.000
32	476.600	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
33	736.400	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
34	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
35	-122.100	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
36	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
37	-217.900	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
38	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
39	-158.200	0.000	0.000	0.000	335.600	0.000
40	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
41	-247.800	0.000	284.500	0.000	0.000	0.000
42	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
43	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
44	2880.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
45	-74.700	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
46	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

TABLA 4.2 (CONTINUACION)

GRUPO PRINCIPAL	19	20	21	22	23	24
1	597.000	663.500	35.930	53.760	24.900	104.300
2	336.900	318.900	204.600	5.892	-13.990	-109.700
3	212.500	537.400	-18.810	-144.400	-231.900	3.000
4	6096.000	603.800	-114.100	0.000	-12.140	-141.300
5	6.712	199.000	75.620	-112.100	-98.120	143.100
6	36.230	-289.500	-38.320	-102.500	-139.400	-67.800
7	112.600	-14.090	325.400	370.400	353.700	497.500
8	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1827.000
9	481.700	669.400	-191.700	-284.000	-354.600	-39.200
10	0.000	0.000	751.900	0.000	0.000	0.000
11	494.600	660.200	0.000	108.900	-209.700	54.470
12	0.000	-356.300	0.000	0.000	-287.200	0.000
13	0.000	664.600	301.100	137.800	-154.300	47.670
14	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-99.810
15	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	71.230
16	0.000	0.000	0.000	-73.850	-352.900	-8.283
17	-216.800	0.000	0.000	0.000	0.000	8455.000
18	-169.700	-153.700	0.000	-351.600	-114.700	-165.100
19	0.000	0.000	0.000	0.000	-15.620	-54.860
20	0.000	0.000	44.420	-183.400	76.750	212.700
21	0.000	826.400	0.000	108.300	249.200	62.420
22	0.000	1821.000	-84.530	0.000	0.000	56.330
23	74.040	1346.000	-157.100	0.000	0.000	-30.100
24	492.000	689.000	11.800	17.970	51.900	0.000
25	356.900	0.000	-314.900	0.000	0.000	-255.400
26	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-34.680
27	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	514.600
28	335.700	0.000	-73.090	0.000	-26.060	-60.710
29	125.700	0.000	-27.940	0.000	0.000	0.000
30	0.000	0.000	0.000	0.000	48.480	-133.100
31	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
32	0.000	0.000	0.000	-40.820	21.760	48.490
33	0.000	0.000	1169.000	0.000	0.000	225.800
34	329.100	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
35	0.000	0.000	0.000	-215.000	-343.600	-58.430
36	-42.310	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
37	304.000	898.200	428.500	0.000	-149.800	134.200
38	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-124.600
39	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-186.700
40	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
41	-61.600	1179.000	0.000	305.400	-193.000	335.700
42	0.000	2450.000	0.000	0.000	0.000	0.000
43	0.000	2496.000	0.000	0.000	0.000	102.000
44	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
45	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
46	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

TABLA 4.2 (CONTINUACION)

-----						
NUMERO DE						
GRUPO						
PRINCIPAL	25	26	27	28	29	30
-----						
1	321.500	661.500	543.000	153.600	184.400	354.500
2	393.100	357.500	0.000	76.300	0.000	0.000
3	538.200	168.000	194.900	52.070	-10.430	-64.690
4	-126.900	3629.000	4448.000	-9.451	0.000	-20.360
5	287.800	61.110	157.100	477.000	147.500	-120.500
6	17.120	75.140	0.000	-31.090	37.840	0.000
7	678.200	220.600	399.500	88.100	0.000	188.000
8	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9	174.500	137.500		216.100	-46.280	-163.700
10	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11	629.000	0.000	0.000	183.000	0.000	202.300
12	0.000	0.000	0.000	0.000	4.339	0.000
13	0.000	95.180	0.000	140.900	-8.538	0.000
14	68.810	0.000	0.000	0.000	-70.140	0.000
15	4350.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
16	-86.360	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
17	699.100	0.000	-62.730	0.000	0.000	0.000
18	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
19	52.310	0.000	0.000	230.900	21.370	0.000
20	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
21	464.400	0.000	0.000	450.100	59.020	0.000
22	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
23	0.000	0.000	0.000	116.600	0.000	-64.380
24	475.800	490.900	534.700	132.200	0.000	546.700
25	0.000	154.500	0.000	0.000	0.000	0.000
26	794.400	0.000	533.200	0.000	0.000	0.000
27	0.000	-85.120	0.000	0.000	0.000	0.000
28	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
29	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
30	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
31	0.000	481.300	0.000	0.000	0.000	0.000
32	0.000	64.280	0.000	0.000	0.000	0.000
33	224.000	125.300	0.000	0.000	0.000	0.000
34	0.000	174.400	0.000	0.000	0.000	0.000
35	0.000	0.000	0.000	0.000	85.700	0.000
36	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
37	0.000	379.400	0.000	167.900	0.000	0.000
38	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
39	0.000	0.000	0.000	0.000	-71.000	0.000
40	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
41	1107.000	0.000	0.000	885.500	0.000	0.000
42	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
43	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
44	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
45	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
46	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
-----						



TABLA 4.2 (CONTINUACION)

NUMERO DE GRUPO PRINCIPAL	31	32	33	34	35	36
1	3025.000	335.800	479.500	298.900	526.500	689.000
2	0.000	0.000	0.000	31.140	-137.400	0.000
3	210.400	113.300	-13.590	0.000	169.900	0.000
4	4975.000	0.000	-171.300	0.000	4284.000	0.000
5	-318.900	313.500	133.400	0.000	-202.100	0.000
6	0.000	0.000	0.000	0.000	-399.300	0.000
7	0.000	0.000	0.000	0.000	-139.000	160.800
8	-687.100	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9	0.000	53.590	245.200	-246.600	-44.580	0.000
10	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11	-101.700	148.300	0.000	0.000	52.080	0.000
12	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
13	-20.110	-149.500	-202.300	0.000	172.100	0.000
14	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
15	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
16	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
17	125.300	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
18	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
19	0.000	0.000	0.000	-203.000	0.000	81.570
20	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
21	0.000	0.000	-25.900	0.000	0.000	0.000
22	0.000	177.600	0.000	0.000	215.000	0.000
23	0.000	86.400	0.000	0.000	363.700	0.000
24	0.000	247.800	41.940	0.000	337.700	0.000
25	0.000	0.000	-60.700	0.000	0.000	0.000
26	139.800	304.300	10.170	-27.700	0.000	0.000
27	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
28	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
29	0.000	0.000	0.000	0.000	31.660	0.000
30	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
31	0.000	0.000	0.000	0.000	-417.200	0.000
32	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
33	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
34	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
35	535.800	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
36	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
37	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
38	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
39	-191.700	0.000	0.000	6.699	136.600	0.000
40	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
41	0.000	288.100	0.000	0.000	-29.340	-53.910
42	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
43	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
44	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
45	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
46	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

TABLA 4.2 (CONTINUACION)

NUMERO DE GRUPO PRINCIPAL	37	38	39	40	41	42
1	-4.189	225.800	485.300	-2.859	387.100	407.200
2	-66.460	0.000	-70.450	0.000	48.330	0.000
3	-259.100	389.300	245.600	0.000	103.500	551.900
4	0.000	101.400	5629.000	0.000	69.260	683.300
5	225.800	44.780	-143.900	0.000	190.300	269.100
6	33.470	-48.250	-172.400	0.000	165.700	0.000
7	0.000	0.000	319.000	0.000	-197.500	0.000
8	0.000	0.000	0.000	0.000	-494.200	0.000
9	-34.570	0.000	-61.700	0.000	-18.800	0.000
10	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11	-83.300	0.000	0.000	0.000	560.200	0.000
12	0.000	0.000	0.000	0.000	-70.240	0.000
13	240.200	0.000	254.800	0.000	417.000	0.000
14	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
15	0.000	0.000	0.000	0.000	-38.770	0.000
16	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
17	0.000	0.000	-293.100	0.000	0.000	0.000
18	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
19	3.509	0.000	0.000	0.000	120.300	0.000
20	-11.160	0.000	0.000	0.000	-337.000	169.300
21	-245.400	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
22	0.000	0.000	0.000	0.000	-96.870	0.000
23	11.200	0.000	0.000	0.000	255.800	0.000
24	187.100	215.200	498.600	0.000	256.500	639.300
25	0.000	0.000	0.000	0.000	-145.100	0.000
26	10.760	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
27	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
28	-47.370	0.000	0.000	0.000	469.800	0.000
29	0.000	0.000	78.920	0.000	0.000	0.000
30	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
31	0.000	0.000	302.200	0.000	0.000	0.000
32	0.000	0.000	0.000	0.000	68.550	0.000
33	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
34	0.000	0.000	-119.800	0.000	0.000	0.000
35	0.000	0.000	-97.710	0.000	153.700	0.000
36	0.000	0.000	0.000	0.000	423.460	0.000
37	0.000	0.000	0.000	0.000	730.800	0.000
38	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
39	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
40	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
41	-198.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
42	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
43	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	639.300
44	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
45	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
46	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

TABLA 4.2 (CONTINUACION)

NUMERO DE GRUPO PRINCIPAL	43	44	45	46
1	327.000	383.000	-1380.000	729.000
2	0.000	0.000	-2340.000	0.000
3	254.300	109.000	75.900	784.000
4	355.500	1320.000	482.000	386.000
5	202.700	0.000	0.000	0.000
6	0.000	214.000	0.000	0.000
7	0.000	365.000	0.000	0.000
8	0.000	0.000	0.000	0.000
9	0.000	135.000	-1680.000	-58.000
10	0.000	-7.180	333.000	6810.000
11	0.000	-54.600	0.000	6960.000
12	0.000	0.000	0.000	0.000
13	0.000	5780.000	131.000	0.000
14	0.000	0.000	0.000	0.000
15	0.000	0.000	0.000	0.000
16	0.000	0.000	0.000	0.000
17	0.000	0.000	0.000	0.000
18	0.000	0.000	0.000	0.000
19	0.000	0.000	0.000	0.000
20	127.200	0.000	0.000	0.000
21	0.000	0.000	0.000	0.000
22	0.000	0.000	0.000	0.000
23	0.000	0.000	0.000	0.000
24	0.000	0.000	0.000	0.000
25	0.000	0.000	0.000	0.000
26	0.000	0.000	0.000	0.000
27	0.000	0.000	0.000	0.000
28	0.000	0.000	0.000	0.000
29	0.000	0.000	0.000	0.000
30	0.000	0.000	0.000	0.000
31	0.000	0.000	0.000	0.000
32	0.000	0.000	0.000	0.000
33	0.000	0.000	0.000	0.000
34	0.000	0.000	0.000	0.000
35	0.000	0.000	0.000	0.000
36	0.000	0.000	0.000	0.000
37	0.000	0.000	0.000	0.000
38	0.000	0.000	0.000	0.000
39	0.000	0.000	0.000	0.000
40	0.000	0.000	0.000	0.000
41	0.000	0.000	0.000	0.000
42	498.800	0.000	0.000	0.000
43	0.000	0.000	0.000	0.000
44	0.000	0.000	0.000	0.000
45	0.000	0.000	0.000	0.000
46	0.000	0.000	0.000	0.000

En esta sección se da una lista de los parámetros de interacción de grupos  $a_{nm}$  y las constantes de los grupos puros  $R_k$  y  $Q_k$ , que son necesarios para el método.

Los valores de  $R_k$  y  $Q_k$  son en pocos casos calculados utilizando la ecuación ( 4.6 ). En la tabla ( 4.1.) se listan estos valores para los grupos principales y sub-grupos.

La tabla ( 4.2 ) proporciona los parámetros de interacción de grupos,  $a_{nm}$ .

#### 4.3.- Ejemplo de Cálculo para Predicciones de Coeficientes de Actividad por UNIFAC.

Definición:

Cual es el coeficiente de actividad para la acetona en la mezcla de Acetona (1) - Pentano (2), si el sistema esta a  $307^{\circ}$  K y  $x_1 = 0.047$  ?

El pentano (2) esta formado por 2 grupos  $CH_3$  - y 3 grupos  $CH_2$  - . La acetona es formada por 1 grupo  $CH_3$  - y 1 grupo  $CH_2 CO$  -

Solución

GRUPO	NÚMERO	R <sub>k</sub>	Q <sub>k</sub>
CH <sub>3</sub>	1	0.9011	0.848
CH <sub>2</sub>	2	0.6744	0.540
CH <sub>3</sub> CO	22	1.6724	1.488

ACETONA (1):

PENTANO (2):

$$\delta_{1(1)} = \delta_{CH_3} = 1$$

$$\delta_{1(2)} = \delta_{CH_3} = 2$$

$$\delta_{22(1)} = \delta_{CH_3CO} = \frac{1}{2}$$

$$\delta_{2(2)} = \delta_{CH_2} = \frac{3}{5}$$

De la ecuación ( 4.8 )

$$r_1 = \sum_k \delta_{k(1)} R_k$$

$$y \quad q_1 = \sum_k \delta_{k(1)} Q_k$$

ACETONA

$$r_1 = \delta_{1(1)} * R_{1(1)} + \delta_{22(1)} * R_{22(1)}$$

$$r_1 = 1 * 0.9011 + 1 * 1.6724 = 2.5735$$

$$q_1 = \delta_{1(1)} * Q_1 + \delta_{22(1)} * Q_{22}$$

$$q_1 = 1 * 0.848 + 1 * 1.488 = 2.336$$

PENTANO

$$\tau_2 = \delta_1(2) * R_1(2) + \delta_{22}(2) * R_{22}(2)$$

$$\tau_2 = 2 * 0.9011 + 3 * 0.6744 = 3.8254$$

$$q_2 = \delta_1(2) * Q_1(2) + \delta_2(2) * Q_{22}(2)$$

$$q_2 = 2 * 0.848 + 3 * 0.540 = 3.316$$

De la ecuación ( 4.7 ):

$$\ln \Gamma_i^C = \ln \Phi_i/x_i + z/2 \left( q_i \ln \theta_i/\Phi_i \right) + l_i \frac{-\Phi_i/x_i}{\left( \sum x_j l_j \right)} \quad (4.7)$$

$$l_i = z/2 \left( \tau_i - q_i \right) - \left( \tau_i - 1 \right) \quad ; \quad z = 10$$

$$\theta_i = q_i x_i / \sum q_j x_j \quad ; \quad \Phi_i = \tau_i x_i / \sum \tau_j x_j$$

$$\Phi_1 = \tau_1 * x_1 / \tau_1 * x_1 + \tau_2 x_2$$

$$\Phi_1 = 2.57 * 0.047 / 2.57 * 0.047 + 3.82 * 0.953$$

$$\Phi_1 = 0.03211 \quad \text{-----} \quad \Phi_2 = 0.96789$$

$$\theta_1 = x_1 * q_1 / x_1 * q_1 + x_2 * q_2$$

$$\theta_1 = 2.336 * 0.047 / 2.336 * 0.047 + 3.316 * 0.953$$

$$\theta_1 = 0.03358 \quad \text{-----} \quad \theta_2 = 0.96642$$

$$l_1 = 10 / 2 (2.573 - 2.336) - (2.573 - 1)$$

$$l_1 = -0.3860$$

$$l_2 = 10 / 2 (3.825-3.316) - (3.825-1)$$

$$l_2 = -0.2784$$

Ahora sustituyendo en la ecuación ( 4.7 ):

$$\ln \Gamma_1^C = \ln (0.032/0.047) - 10/2 * 2.336 + \ln (0.0335/0.0321) - 0.386 \\ + 0.0211/0.047(0.047 * 0.386 + 0.955 * 0.2784)$$

$$\ln \Gamma_1^C = -0.0505$$

De la tabla ( 4.4 ):

$$a_{1,22} = a_{2,22} = 476.4 \text{ } ^\circ\text{K}$$

$$a_{1,2} = a_{2,1} = a_{1,1} = a_{2,2} = a_{22,22} = 0 \text{ } ^\circ\text{K}$$

De la ecuación ( 4.11 ):

$$\Omega_{1,22} = \Omega_{2,22} = \exp (-476.4/307) = 0.2119$$

$$\Omega_{22,1} = \Omega_{22,2} = \exp (-276.78/307) = 0.9165$$

$$\Omega_{1,1} = \Omega_{2,1} = \Omega_{1,2} = \Omega_{2,2} + \Omega_{22,22} = 1$$

Para Acetona pura se usa la ecuación ( 4.10 ):

$$X_n = \sum_j \delta_n(j) x_j / \sum_j \sum_n \delta_n(j) x_j$$

$$X_1(1) = \delta_1(1) x_1 / \delta_1(1) x_1 + \delta_{22}(1) x_{22} = 1 * 0.5 / 1 * 0.5 + 1 * 0.5 = 0.5$$

$$X_{22}(1) = \delta_{22}(1) x_{22} / \delta_1(1) x_1 + \delta_{22}(1) x_{22} = 1 * 0.5 / 1 * 0.5 + 1 * 0.5 = 0.5$$

$$\theta_1(1) = Q_1 * X_1 / Q_1 * X_1 + Q_{22} * X_{22} = 0.848 * 0.5 / 0.848 * 0.5 + 1.488 * 0.5$$

$$\theta_1(1) = 0.363 \text{ -----} \rightarrow \theta_{22}(1) = 0.637$$

Sustituyendo en la ecuación ( 4.9 ):

$$\ln \tau_k = Q_k (1 - \ln \left( \frac{\sum_n \Omega_n k}{n} \right) - \sum \left( \frac{\theta_n \Omega_n k}{\sum_n \Omega_n} \right)) \text{ ----- ( 4.9 )}$$

$$\ln \tau_1 = Q_1 (1 - \ln(\theta_1 * \Omega_{1,1} + \theta_{22} * \Omega_{22,1})) - ((\theta_1 \Omega_{1,1} / \theta_1 \Omega_{1,1} + \theta_{22} \Omega_{22,1}) + (\theta_{22} \Omega_{1,22} / \theta_{22} \Omega_{22,22}))$$

$$\begin{aligned} \ln \tau_1(1) &= 0.848 (1 - \ln (0.363 * 1 + 0.637 * 0.9165)) - \\ &((0.363 * 1 / 0.363 * 1 + 0.637 * 0.9165) + \\ &(0.637 * 0.2119 + 0.363 * 0.2119 + 0.637 * 1)) \end{aligned}$$

$$\ln \tau_1(1) = 0.4089$$

$$\begin{aligned} \ln \tau_{22}(1) &= Q_{22} (1 - \ln(\theta_1 \Omega_{1,22} + \theta_{22} \Omega_{22,22})) - ((\theta_1 \Omega_{22,1} / \theta_1 \Omega_{1,1} + \\ &\theta_{22} \Omega_{22,1}) + (\theta_{22} \Omega_{22,22} / \theta_1 \Omega_{1,22} + \theta_{22} \Omega_{22,22})) \end{aligned}$$



$$\ln r_{22}(1) = 1.485 (1 - \ln (0.363 + 0.2119 + 0.637 + 1) - (0.363 + 0.9175 / 0.363 + 1 + 0.637 + 0.9165) + (0.637 + 1 / 0.363 + 0.2119 + 0.637 + 1))$$

$$\ln r_{22}(1) = 0.1389$$

Para  $x_1=0.047$ , se usa la ecuación ( 4.10 ):

$$X_1 = \delta_1(1)x_1 + 5_1(2)x_2/x_1(\delta_1(1) + 5_1(2)) + x_2(5_1(2) + 5_2(2))$$

$$X_1 = 1 * 0.047 + 0 + 0.953 * 0.047 / (1 + 1) + 0.953(2+3)$$

$$X_1 = 0.4019$$

$$X_2 = x_1 * 5_2(1) + x_2 * 5_2(2) / x_1(\delta_1(1) + 5_2(1)) + x_2(\delta_1(2) + 5_2(2))$$

$$X_2 = 0.047 * 0 + 0.953 * 3 / 0.047(1+1) + 0.953(2+3)$$

$$X_2 = 0.5884$$

$$X_{22} = x_1 * 5_22(1) + x_2 * 5_22(2) / x_1(\delta_1(1) + 5_22(1)) + x_2(\delta_1(2) + 5_22(2))$$

$$X_{22} = 0.047 * 1 + 0.953 * 0 / 0.047(1+1) + 0.953(2+3)$$

$$X_{22} = 0.0097$$

$$\theta_1 = Q_1 X_1 + Q_2 X_2 + Q_3 X_{22}$$

$$\theta_1 = 0.848 * 0.4019 / 0.848 * 0.4019 + 0.54 * 0.5884 + 1.488 * 0.0097$$

$$\theta_1 = 0.5065$$

$$\theta_1 = Q_2 X_2 / Q_1 X_1 + Q_2 X_2 + Q_{22} X_2^2$$

$$\theta_1 = 0.54 * 0.5884 / 0.848 * 0.4019 + 0.54 * 0.5884 + 1.488 * 0.0097$$

$$\theta_1 = 0.4721$$

$$\implies \theta_{22} = 0.0214$$

De la ecuación ( 4.9 ):

$$\ln \tau_{22} = Q_{22} ( 1 - \ln( \theta_1 \Omega_{1,22} + \theta_2 \Omega_{2,22} + \theta_{22} \Omega_{22,22} ) - \\ ( ( \theta_1 \Omega_{22,1} / \theta_1 \Omega_{1,1} + \theta_2 \Omega_{2,1} \theta_{22} \Omega_{22,1} ) + \\ ( \theta_{22} \Omega_{22,22} / \theta_1 \Omega_{1,22} + \theta_2 \Omega_{2,22} + \theta_{22} \Omega_{22,22} ) ) )$$

$$\ln \tau_{22} = 1.488 ( 1 - \ln ( 0.5065 * 0.2119 + 0.4721 * 0.2119 + \\ 0.021481 ) - ( ( 0.5065 + 0.9165 / 0.5065 * 1 + 0.4721 * 1 + \\ + 0.24 + 0.9165 ) + ( 0.4721 + 0.9165 / 0.5065 * 1 + 0.4721 * 1 + \\ 0.0214 * 0.9165 ) + ( 0.0214 * 1 / 0.5065 * 0.2119 + 0.4721 * 0.2119 \\ + 0.0214 * 1 ) ) )$$

$$\ln \tau_{22} = 2.2067$$

de manera similar :  $\ln \tau_1 = 0.0014$

Entonces de la ecuación ( 4.2 ) :

$$\ln \Gamma_1^R = \Gamma_1^{(1)} ( \ln \tau_1 - \ln \tau_1^{(1)} ) + \Gamma_2^{(1)} ( \ln \tau_2 - \ln \tau_2^{(1)} )$$

$$\ln \Gamma_1^R = 1 * ( 0.0014 - 0.4089 ) + 1 * ( 2.2067 - 0.1389 )$$

$$\ln \Gamma_1^R = 1.6603$$

$$\implies \ln \Gamma_1 = \ln \Gamma_1^R + \ln \Gamma_1^C$$

$$\ln \Gamma_1 = 1.6603 - 0.0505 \quad \circ \quad \Gamma_1 = 5.00$$

Este valor de  $\Gamma_1$  es comparado con un valor experimental de 4.4, encontrado en T.C Lo.H. H. Bieber and A. E. Karr, J. Chem. Eng. Data (1962).

#### 4.4 Evolución y Aplicación del Método de Contribución de Grupos UNIFAC.

A continuación se describe de manera breve cual ha sido la evolución del Método de Contribución de Grupos UNIFAC a

través de las revisiones y extensiones realizadas por investigadores especialistas en el tema.

Como se había mencionado anteriormente, en 1975 Fredenslund (17) publicó un trabajo en el cual demostró como el método UNIFAC puede ser utilizado para predecir el equilibrio de fases en sistemas conteniendo hidrocarburos (saturados, insaturados y aromáticos), alcoholes, agua, cetonas, ésteres, hidrocarburos clorinados, aminas y nitrilos. El trabajo original consideró 25 diferentes grupos funcionales, desde entonces el trabajo sobre el método UNIFAC ha continuado en un esfuerzo para entender su confiabilidad y aplicabilidad para el diseño de procesos de separación.

En 1977 Aage Fredenslund, Jurgen Gmehling, Michael L. Michelsen, Peter Rasmussen y John M. Prausnitz (18) publicaron un trabajo sobre el Diseño Computarizado de Columnas de Destilación Multicomponente usando Método de Contribución de Grupos UNIFAC para el Cálculo de Coeficientes de Actividad y el cual proporcionaría a la ingeniería de procesos una herramienta rápida y confiable para la predicción de condiciones de equilibrio requeridas para el diseño de columnas de destilación.

Debe señalarse que UNIFAC es la abreviación que según la Universal Quasichemical Functional Group Activity Coefficients, basada en la teoría quasiquímica de soluciones.

de líquidos propuesta por Guggenheim (18) y generalizada por Abrahms y Prausnitz (15) y aplicada a grupos funcionales dentro de las moléculas.

Como ya se mencionó, los coeficientes de actividad resultan ser de suma importancia para el cálculo del factor de separación  $K$  requerido para el diseño de procesos de separación, por lo que UNIFAC proporciona una herramienta muy útil para éstos cálculos.

Ya para 1977 se habían determinado parámetros de interacción de grupos para más de 50 grupos funcionales diferentes. Para ese entonces las bases del método UNIFAC cubrían 70% de todos los datos publicados de equilibrio líquido - vapor para mezclas no electrolíticas a presiones bajas y moderadas. Estos parámetros de interacción de grupos estuvieron basados en datos de equilibrio de 2,500 sistemas binarios, los cuales fueron seleccionados a partir de un conjunto de datos de más de 4,000 sistemas binarios almacenados y colectados en la University of Dortmund por Gmehling y Onken (19). Estos datos fueron complementados con datos de Wichterde (20).

La determinación de los parámetros de interacción de grupos a partir de la base de datos procedió como sigue :

- 1) Para los datos Termodinámicamente consistentes (Christiansen and Fredenslund, (21), los coeficientes de

Bärbel Kolbe, Jürgen Gmehling y Peter Ramsussen (24), en el que nuevos parámetros fueron reportados para ocho grupos diferentes previamente no cubiertos por UNIFAC en 1977, y algunos de los parámetros previamente publicados anteriormente a esta primer revisión fueron revisados sobre las bases de nuevos datos experimentales líquido-vapor. En esta revisión, la definición del grupo alcohol fue modificada haciéndola UNIFAC más fácil para usar y más confiable para mezclas conteniendo alcohol.

Los nuevos ocho grupos diferentes que fueron incluidos en esta Revisión y Extensión fueron los grupos aminos terciarios, formatos, bromatos, iodatos, metanol-etil, furfural, piridina y glicoles.

En ésta Revisión y Extensión de UNIFAC fueron revisados 46 parámetros de interacción de grupos previamente reportados en 1977, estos fueron de una mayor calidad que los anteriormente calculados y logrando cubrir un mayor rango de temperatura.

Asimismo, se definió un nuevo grupo alcohol (OH), siendo más flexible que el anteriormente definido por Fredenslund en 1977, el cual consideraba a este como un grupo más grande conteniendo 2 átomos de carbono y a un lado el OH, siendo posible con este predecir las propiedades de muchos tipos de alcohales excepto para el metanol, logrando con este nuevo grupo predecir los coeficientes de actividad en mezclas

conteniendo alcóholes que con el anterior el cual, tenía cinco subgrupos y un parámetro especial para el etanol.

Estas revisiones y extensiones hicieron que el Método UNIFAC fuese más flexible y que su rango de aplicabilidad y exactitud fueran incrementadas.

En 1983 se realizó otra Revisión y Extensión del Método UNIFAC, en el cual los parámetros de interacción de grupos UNIFAC revisados hasta esa fecha, fueron presentados para los grupos alcóholes y éteres. Estos parámetros son también útiles para un grupo éster flexible el cual por ejemplo, puede ser usado para acrilatos y benzoatos.

En esta Revisión y Extensión, los parámetros de contribución de grupos entre el alcáno ( $\text{CH}_2$ ) y el alqueno ( $\text{CH}=\text{C}$ ) fueron estimados por Greening (25) a partir de una muy pequeña base de datos conteniendo mezclas con éter-olefinas solamente.

Muchos coeficientes de actividad a dilución infinita para sistemas alcáno-alqueno a temperaturas de un rango de 305 - 354 °K, fueron medidos por Alessi (26). Este mismo fue quien se decidió a usar estos datos para reestimar los parámetros de interacción de alcáno-alcóholes. Asimismo, se consideró necesario reestimar los parámetros de interacción para el grupo  $\text{OH}$ , el cual es un grupo Éter conectado a un grupo alqueno.

En lo que respecta al grupo éster, este es definido en forma usual como un grupo grande (COO), el cual consiste de un grupo COO mas un grupo CH<sub>3</sub> o CH<sub>2</sub>. esto significa que este grupo no es muy flexible, ya que esto hace solamente posible predecir coeficientes de actividad para mezclas que contengan ésteres de ácidos acéticos ó propanóicos ó derivados de estos, fallando el Método UNIFAC para el caso de mezclas conteniendo acrilatos.

Por lo anterior, se propuso utilizar el grupo éster como COO, siendo la aplicación de este grupo la de poder ser utilizado solamente cuando sea imposible utilizar el grupo COO, por ejemplo para los acrilatos y benzoatos.

En 1986, Mamata Mukhopahyany y Avinash S. Patrak (27) publicaron Datos de Equilibrio Líquido-Líquido para el cálculo de Extracción de Aromáticos usando el Modelo UNIFAC Modificado.

En este trabajo utilizaron el modelo de UNIFAC Modificado para la predicción de equilibrio líquido-líquido para la extracción de sistemas multicomponentes aromáticos. Los coeficientes de actividades teóricos fueron utilizados a dilución infinita para la evaluación de los parámetros de interacción de grupos entre el par de grupos de CH<sub>2</sub>-sulfolano y sus coeficientes de temperatura. Estos parámetros de grupos



# ESTA TESIS NO DEBE SALIR DE LA BIBLIOTECA

fueron utilizados en el Modelo UNIFAC modificado. La validez de estos parámetros fueron comprobados comparando los resultados predichos con datos experimentales obtenidos de la literatura.

Anteriormente, se había utilizado el modelo UNIFAC para la predicción de datos de equilibrio multicomponente líquido-líquido para la extracción de aromáticos ligeros a partir de nafta reformada con sulfolane como el solvente polar. Los parámetros binarios de interacción de grupos para todos los posibles pares de grupos involucrados en los cálculos excepto el CH<sub>2</sub>-sulfolane, fueron evaluados a partir de datos de equilibrio líquido-vapor de miscibilidades binarias, donde para este último par fue evaluado a partir de solubilidad mutua (Karve, (28)), de la miscibilidad binaria parcial. En este trabajo, los coeficientes de actividad isobáricos a dilución infinita fueron empleados para la evaluación del par de parámetros de interacción de grupos CH<sub>2</sub>-sulfolane. El modelo UNIFAC modificado (5) con la dependencia de temperatura sobre los parámetros de interacción de grupos sugerido por Larsen (29) han sido considerados para la predicción de los datos de equilibrio de multicomponentes líquido-líquido.

Los grupos binarios de parámetros de interacción entre el par de grupos CH<sub>2</sub>-sulfolane han sido evaluados por reducción de estos datos y adoptando la técnica de búsqueda simplex

modificada por Nelden y Mead. Esto involucra un análisis de regresión estadística sobre todos los datos experimentales para minimizar y seleccionar la función objetivo la cual incorpora las variaciones de temperatura de los datos isobáricos.

En este trabajo se demostró la aplicabilidad que tiene el modelo UNIFAC modificado y su validez para evaluar los parámetros de interacción de grupos por los coeficientes de actividad a dilución infinita, para los datos de equilibrio líquido-líquido

#### APLICACION DE UNIFAC.

A continuación se esquematiza las aplicaciones actuales del modelo UNIFAC:

##### i) Cálculo de equilibrios:

- Líquido-vapor
- Líquido-Líquido
- Sólido-Líquido
- Líquido-Líquido-vapor

##### ii) Cálculo de Propiedades Termodinámicas:

- Presión de vapor
- Constantes de Henry

- Entalpias de Mezclado
- Puntos de Flash para mezclas líquidas inflamables

Como ejemplo ilustrativo de aplicación del Método UNIFAC para cálculo de propiedades termodinámicas, a continuación se describe el trabajo para el cálculo del punto de flash en mezclas.

## CALCULO DE PUNTO DE FLASH

En 1982 se publicó un trabajo por Jurgen Gemehling y Peter Rasmussen (30), en el cual se demostró la aplicación del Método de Contribución de Grupos UNIFAC en la predicción del punto de flash (flash point) de mezclas líquidas binarias y multicomponentes. Si bien el punto de flash no es una propiedad física fundamental esta es requerida para clasificar líquidos combustibles de acuerdo a su relativa flamabilidad, por lo tanto resultan importantes en regulaciones para el manejo y almacenaje en la industria química.

El punto de flash para un componente puro  $i$  puede ser escrito como la temperatura  $T_f$  para lo cual:

$$P_i^s/L_i = 1 \text{-----}(1)$$

y para mezclas binarias y multicomponentes

$$\sum_i (P_i/L_i) = 1 \quad i= 1,2,\dots, N \text{-----}(2)$$

donde:

$P_i$  = presión parcial del componente  $i$  en mezcla aire-vapor la cual esta en equilibrio como la mezcla líquida.

$L_i$  = es la presión parcial en mezcla gas-aire con una composición correspondiente al límite inferior de flamabilidad del componente puro.

$L_i$  es calculado :

$$L_i(t) = L_i(25) - 0.182 (t-25) / H_{ci} \text{-----(3)}$$

donde:

$L_i(t)$  y  $L_i(25)$  en KPa y son los límites inferiores de flamabilidad a  $t$  ( $^{\circ}\text{C}$ ) y  $25$   $^{\circ}\text{C}$  respectivamente;  $H_{ci}$  es el calor neto de combinación en KJ/mol.

La presión parcial  $P_i$  corresponde al equilibrio líquido-vapor a la temperatura  $t$  y puede ser calculada usando la ecuación de mezcla vapor-aire de un gas ideal

$$P_i = x_i \tau_i P_i^s$$

donde  $x_i$  es la fracción mol del componente  $i$  y  $\tau_i$  es el coeficiente de actividad y  $P_i^s$  es la presión de vapor del componente  $i$  a la temperatura  $T$ .

La  $P_i^s$  puede ser calculada por medio de la ecuación de Antoine:

$$\log P^s_i = A_i - B_i/(t+C_i) \text{ -----(5)}$$

En resumen, la  $\tau_i$  es calculada del equilibrio líquido-vapor a través de UNIFAC, obteniendo excelentes predicciones al ser utilizada para calcular el punto de flash de mezclas binarias y multicomponentes en virtud de que los resultados obtenidos con respecto a los valores experimentales son satisfactorios. Estas predicciones son confiables tanto para mezclas que contengan componentes combustibles como para aquéllas que contengan compuestos no combustibles como el agua.

**V APLICACION DE UNIFAC AL  
DISEÑO DE COLUMNAS DE  
DESTILACION**

## V. APLICACION DE UNIFAC AL DISEÑO DE COLUMNAS DE DESTILACION.

Desde el punto de vista de la termodinámica clásica, la descripción del Método de Contribución de Grupos UNIFAC es ahora completada. Se ha visto que UNIFAC proporciona un medio exacto y confiable para la estimación de composiciones en equilibrio de fase para muchas mezclas de interés en la tecnología química. Hay numerosas situaciones donde UNIFAC puede ser empleado en la práctica. En esta sección se ilustra la aplicación práctica de UNIFAC con un importante ejemplo en el DISEÑO de una Columna de destilación para la Separación de Mezclas Multicomponentes.

No es el propósito de este trabajo dar una descripción detallada del programa para el DISEÑO de una Columna de Destilación, mas bien es mostrar con un ejemplo como UNIFAC puede ser incorporado a un procedimiento de DISEÑO de columnas.

El ejemplo esta basado en el método para el Cálculo de Destilación de Multicomponentes de Naphtali and Sandholm.



## 5.1 CALCULO DE DESTILACION MULTICOMPONENTE POR LINEARIZACION

La técnica desarrollada por Naphtali and Sandholm para el DISEÑO de Columnas Multicomponentes, fue seleccionada por las siguientes ventajas:

- i) La presencia de soluciones no ideales así como la eficiencia de Murphree por plato son tomadas en cuenta de manera rigurosa.
- ii) El método es flexible, porque puede ser usado para destilación, extracción y absorción, además pueden ser especificadas un determinado número alimentaciones y corrientes laterales de salida, cosa que no pueden otros, por ejemplo Wanna-Heulel que solo sirve para destilación.

Así mismo, las condiciones para el reboiler y condensador pueden ser especificadas.

- iii) El método converge rápidamente ya que la solución se obtiene mediante una reducción cuadrática de los errores.n.

Las ecuaciones de conservación de masa, energía y de equilibrio de fase son referidas para cada componente y cada etapa. Las ecuaciones resultantes tienen una estructura

tridiagonal, lo cual permite una solución rápida por iteración de Newton-Raphson. La técnica es descrita brevemente en esta sección.

La configuración de la columna de destilación utilizada es mostrada en la figura 5.1. En el programa usado aquí, la columna de destilación puede ser considerada hasta con 50 etapas, 10 componentes, un condensador parcial y un número de alimentaciones y corrientes laterales. Cambios en estas limitaciones pueden ser fácilmente hechas.

El usuario debe especificar:

- Número de etapas.
- Eficiencias de etapas.
- Localización de la alimentación y corrientes laterales.
- Composiciones de alimentación, flujos y estados térmicos.
- Presión de la columna.
- Condiciones de fase en las corrientes laterales y flujos.
- Relación de reflujo.
- Flujo del destilado.

La nomenclatura para una etapa  $n$  arbitraria, la cual incluye la posibilidad de alimentaciones y corrientes laterales, es dada en la figura 4.1.

En lo siguiente,  $M$  es el número total de componentes y  $N$  el número total de etapas incluyendo el reboiler ( $N = 1$ ) y el condensador ( $n = N$ ). Para la etapa  $n$  se deben establecer las siguientes relaciones independientes (funciones de discrepancia)  $F_k(n,i)$ , las cuales deben ser satisfechas.

**BALANCE DE MATERIALES ( $k=1$ ).**

$$F_1(n,i) = (1+S^L_n/L_n)l_{n,i} + (1+S^V_n/V_n)v_{n,i} - v_{n-1,i} - l_{n+1,i} - f_{n,i} = 0 \quad (5.1)$$

$n = 2, 3, \dots, N-1$

$$F_1(1,i) = (1 + S^L_1/L_1)l_{1,i} + (1+S^V_1/V_1)v_{1,i} - l_{2,i} - f_{1,i} = 0 \quad (5.2)$$

$$F_1(N,i) = (1+S^L_N/L_N)l_{N,i} + (1+S^V_N/V_N)v_{N,i} - v_{N-1,i} - f_{N,i} = 0 \quad (5.3)$$

$V_N$  es el destilado y  $L_1$  el producto de los fondos.

Las ecuaciones (5.1) hasta (5.3) comprenden  $N * M$  relaciones.

Figura 5.1.

CONFIGURACION DE COLUMNA DE DESTILACION

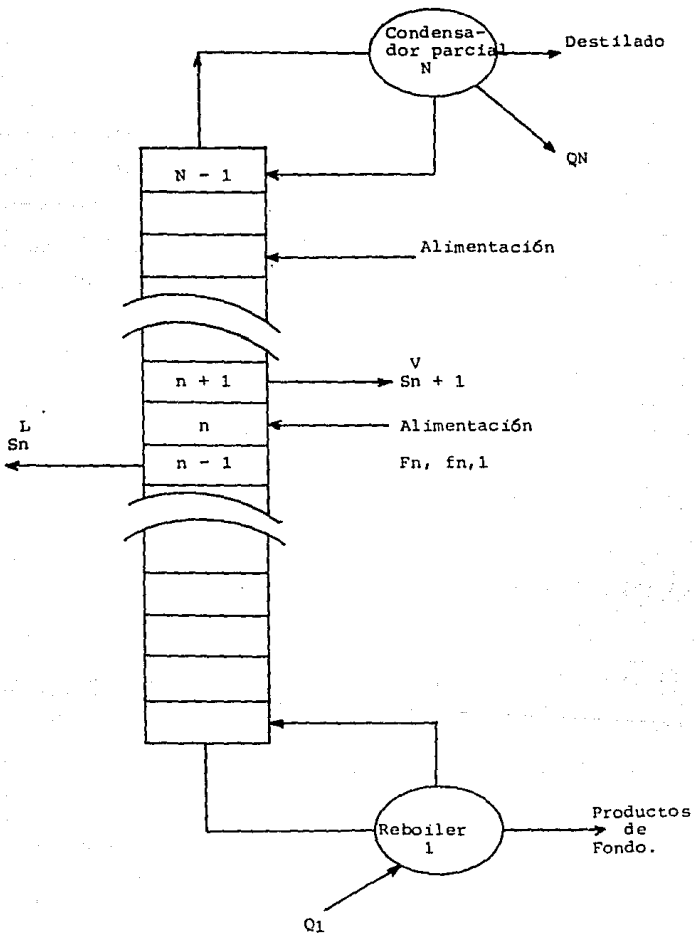
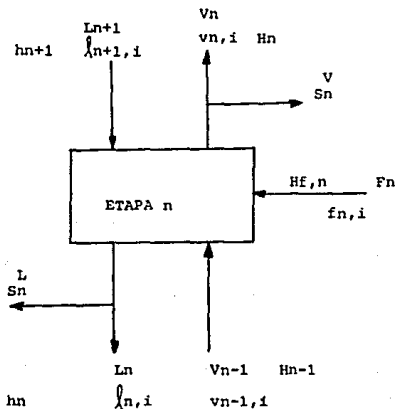


Figura 5.1. (Cont.)

NOMENCLATURA PARA UNA ETAPA ARBITRARIA EN UNA COLUMNA DE DESTILACION.



Subíndice n: Flujo desde la etapa n,  $n = 1, 2, \dots, N$

S bídndice i: Componente i,  $i = 1, 2, \dots, M$

H = Entalpía de la fase vapor.

h = Entalpía de la fase líquida.

$H_f$  = Entalpía de Alimentación.

V = Flujo total de Vapor.

$v$  = Flujo de vapor por componente.

L = Flujo total de Líquido

$\lambda$  = Flujo de Líquido por componente.

F = Alimentación total

f = Alimentación por Componente.

$S_L$  = Corriente Lateral de Líquido.

$S_V$  = Corriente Lateral de Vapor.

Balances de Energía (k=2) (Índice i fuera)

$$F_2(n) = (1 + SL_n/L_n)h_n + (1 + SV_n/V_n)H_n - H_{n-1} - h_{n+1} - h_f, n=0 \text{ --- ( 5.4 )}$$

$$n = 2, 3, \dots, N-1$$

$$Q_1 = (1 + SL_1/L_1)h_1 + (1 + SV_1/V_1)H_1 - h_2 - h_f, 1 \text{ --- ( 5.5 )}$$

$$-Q_M = (1 + SL_M/L_M)h_M + (1 + SV_M/V_M)H_M - H_{M-1} - h_f, M \text{ --- ( 5.6 )}$$

Las ecuaciones (5.5) y (5.6) serán usadas para generar  $F_2(1)$  y  $F_2(N)$  si el calor removido del condensador  $Q_M$ , y el calor suministrado al reboiler,  $Q_1$ , fueron variables especificados.

Sin embargo en nuestro caso la relación reflujo,  $R$ , y el flujo del destilado,  $V_N$ , son especificados en su lugar, (ver especificaciones 7 y 8. En estos casos se usan las ecuaciones ( 5.5 ) y ( 5.6 ) para calcular  $Q_1$  y  $Q_M$ , y las siguientes funciones de discrepancia son seleccionadas para reemplazar a estas:

$$F_2(i) = \sum_{i=1}^i l_{i,i} - L_i = 0 \text{ --- ( 5.7 )}$$

$$i = 1, 2, \dots, M$$

donde a partir del balance total de materia en la columna:

$$L_1 = \sum_{n=1}^N \sum_{i=1}^M f_{n,i} = V_M - \sum_{n=1}^N (S_{nL} + S_{nV})$$

$$n = 1, 2, \dots, N$$

$$i = 1, 2, \dots, M$$

$$F_2(n) = \sum_{i=1}^M L_{n,i} - L_n = 0 \quad (5.8)$$

$$\text{donde } L_n = R * V_n$$

Las ecuaciones (5.4), (5.7) y (5.8) comprende N funciones Discrepancia.

CONDICIONES DE EQUILIBRIO CON EFICIENCIAS DE ETAPA MURPHREE (k=3):

La eficiencia de etapa Murphree es definida por:

$$\eta_{n,i} = \frac{y_{n,i} - y_{n-1,i}}{K_{n,i} x_{n,i} - y_{n-1,i}} \quad (5.9)$$

$$\text{donde: } K_{n,i} = \left[ \frac{y_i}{x_i} \right]_n = \left[ \frac{\Gamma_i f_i^*}{\tau_i P} \right]$$

Esta ecuación puede ser rearmplada para dar la siguiente función discrepancia:

$$F_3(n,i) = \frac{\eta_{n,i} K_{n,i} V_{nL} y_{n,i}}{L_n - v_{n,i}} + \frac{(1 - \eta_{n,i}) v_{n-1} V_n}{V_{n-1}} = 0 \quad (5.10)$$

Para el reboiler, la eficiencia es 1. esto es:

$$\eta_{1,i} = 1, \text{ todas las } i$$

Hay  $N * M$  ecuaciones del tipo  $k=3$ . En esta ecuación (5.10) es donde el método UNIFAC entra en el cálculo, vía el coeficiente de distribución,  $K_{n,i}$ .

Las funciones Discrepancia  $F_{k(n,i)}$  son una medición cuantitativa de la falla de las variables independientes para satisfacer las condiciones físicas en la columna.

$F_1(n,i)$  es el número de unidades de calor/tiempo, por el cual el balance de entalpía no es satisfecho, y para  $F_1(n,i)$  y  $F_2(n)$  la discrepancia es medida en moles/tiempo. En términos de álgebra, las ecuaciones (5.1) hasta (5.4), (5.7), (5.8) y (5.10) comprende un vector de Funciones de Discrepancia:

$$E(x) = \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{bmatrix} = 0$$

El cual contiene  $N * (2M+1)$  elementos, y además puede ser resuelto igualmente para muchas incógnitas (variables independientes):

$$x = \begin{bmatrix} 1 \\ y \\ T \end{bmatrix} \quad (5.11)$$



Donde el vector  $l$  contiene a todos los elementos  $l_{n,i}$ ,  $\gamma$  a todos los elementos  $v_{n,i}$ , y  $T$  a todos los elementos  $T_n$ .

Ya que todos los  $l_{n,i}$ ,  $v_{n,i}$  y  $T_n$ 's son conocidos, las composiciones y flujos del producto así como los perfiles de concentración y temperatura en la columna son fácilmente encontrados.

La ecuación ( 4.11 ) es resuelta por iteración Newton-Raphson, utilizando la convergencia simultanea de todas las variables independientes,  $x$ .

La convergencia simultánea es mas eficiente que la convergencia secuencial cuando las volatilidades de los componentes dependen de la temperatura y composición. Resolviendo estas ecuaciones a través de fijar un conjunto de valores de las variables independientes,  $x$ , la cual hace al conjunto de funciones Discrepancia igual a cero.

$$F(x) = 0$$

Es la iteración Newton-Raphson, un nuevo conjunto de valores de las variables independientes,  $x_r$ , es generado a partir de un estimado previo,  $x_{r-1}$ , en la siguiente forma:

$$x_r = \frac{x_{r-1} - F_{r-1}(x_{r-1})}{\left[ \frac{\partial F}{\partial x} \right]_{x_{r-1}}} \quad ( 5.13 )$$

Quando  $(x_r - x_{r-1})$  es lo suficientemente pequeña, el conjunto correcto de valores de  $x$  ha sido encontrado y el proceso de iteración es detenido.

Las variaciones entre iteraciones subsecuentes son limitadas arbitrariamente como sigue:

- (1) Valores negativos para flujos molares de componentes son iguales a cero.
- (2) Las velocidades de flujo por componente que excedan  $L_n$  son igualados a  $L_n$ .
- (3) El cambio máximo en la temperatura en cada etapa,  $T_n$ , es 10 K.

La suposición inicial para las variables independientes,  $x_0$ , deben ser proporcionados por el usuario del programa. Una suposición inicial disparatada puede hacer invalida la aproximación por linealización Newton-Raphson, así como tender a que el método de convergencia falle. Para mejorar

las características de la convergencia para llegar a la solución correcta Naphtali y Sandholm, modificaron el método Newton-Raphson.

Se usa en forma directa la iteración Newton-Raphson, y en caso de divergencia se modificarán los límites de la iteración listada o alterar la suposición inicial,  $x_0$ .

Cuando los valores de las incógnitas  $x$  se vuelven mas correctos, la convergencia a los valores finales se acelera. La convergencia cuadrática es obtenida cerca de la solución correcta.

La única etapa sin explicar en la secuencia de cálculo es la evaluación de la corrección de la matriz del jacobiano,  $(\partial F / \partial x)$  en la cual cada elemento es la derivada parcial de una de las funciones discrepancia con respecto a una de las variables de iteración, con todas las demás variables de iteración mantenidas constantes.

El Jacobiano esta en nuestra aplicación muy grande, frecuentemente esta en el orden de 200 por 200. Por lo tanto, la evaluación de estos elementos por eliminación ordinaria de Gauss consume mucho mas tiempo. Afortunadamente, la evaluación de este Jacobiano en particular es grandemente facilitado por el hecho de que las condiciones en la etapa  $n$  es solamente influenciada directamente por las condiciones de las etapas  $n+1$  y

n-1. Como un resultado, el Jacobiano se convierte en un bloque tridiagonal en su estructura, la cual permite la solución rápida por eliminación de bloques.

Las derivadas de las funciones Discrepancia (F) con respecto a la temperatura son encontrados analíticamente y con respecto a los flujos por componente en forma numérica.

## 5.2 PROCEDIMIENTO DE CALCULO PARA UNA COLUMNA.

El procedimiento de Cálculo puede ser delineado como sigue:

- 1.- Lectura de Entrada (datos de componente puro, datos termodinámicos para la mezcla y detallar las especificaciones de la columna así como los platos de alimentación, relación de reflujo, etc.).
- 2.- Suposición inicial de la temperatura y perfiles de flujo de componentes.
- 3.- Determinar todos los factores K, entalpías de corriente y los derivados con respecto a la temperatura y composición.
- 4.- Formar las funciones Discrepancia  $F(x)$

- 5.- Determinar los elementos de la matriz Jacobiano y resolver el sistema bloque tridiagonal de ecuaciones.
- 6.- Determinar las correcciones para la temperatura y los perfiles de flujo para los componentes en vapor y liquido.

Determinar los nuevos perfiles.

- 7.- Son las correcciones mas pequeñas que un valor especificado?

Si es NO; entonces ir a 3 con perfiles nuevamente determinados.

Si es SI, entonces ir a 8.

- 8.- Imprimir la salida final y parar.

## **VI EJEMPLOS DE APLICACION**

## 6. EJEMPLO DE APLICACION.

A continuación se completa el estudio del Método de Contribución de Grupos UNIFAC a través de dos ejemplos de aplicación en el Diseño de Columnas de Destilación, con lo cual se muestra el potencial que éste método tiene.

### 6.1 Descripción de Ejemplos.

En la figura 6.1 y 6.2 se esquematiza la configuración de los ejemplos a utilizarse y los cuales corresponden a los sistemas siguientes:

SISTEMA (1)		SISTEMA (2)	
Componente	No.	Componente	No.
ETANOL	(1)	1,2 Dicloroetano	(1)
N-PROPANOL	(2)	N-Propanol	(2)
AGUA	(3)	Tolueno	(3)
AC.ACETICO	(4)	Acetona	(4)

Características de los sistemas:

- Incluye Coeficientes de actividad.
- Incluye Coeficientes de fugacidad.
- Incluye Dimerización.
- Incluye Entalpías de Exceso.

FIGURA < 6.1 >

CONFIGURACION DE LA COLUMNA DE DESTILACION  
SISTEMA 1

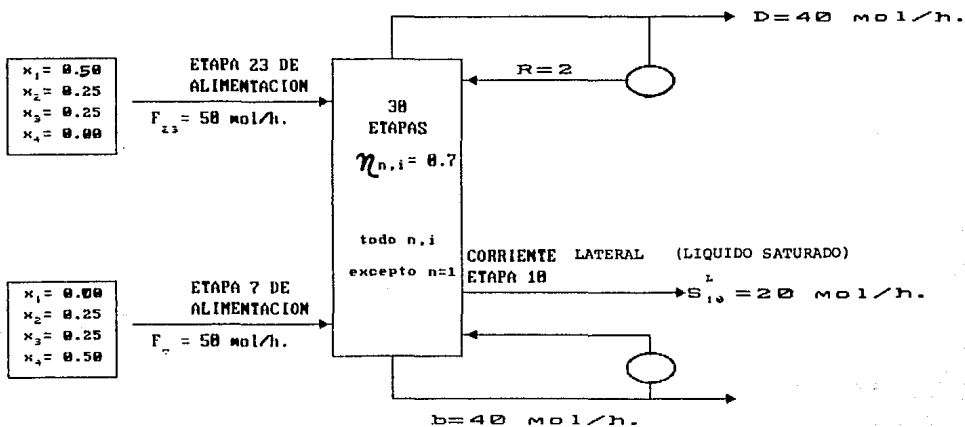
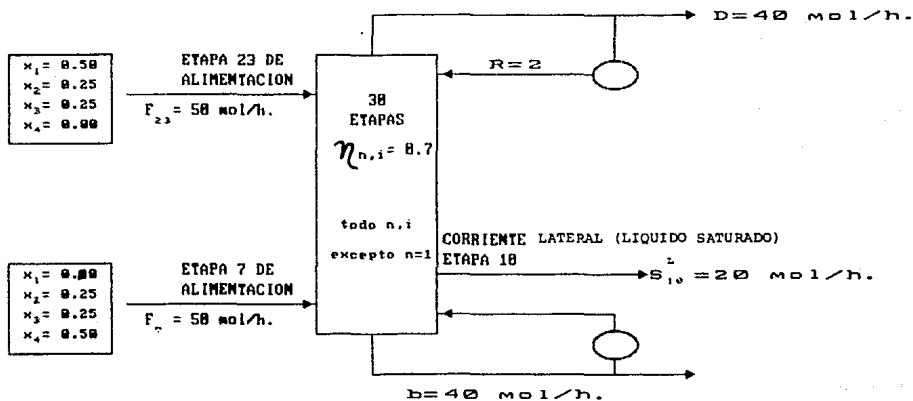




FIGURA < 6.2 >

CONFIGURACION DE LA COLUMNA DE DESTILACION  
SISTEMA 2



Información adicional:

Composición de Alimentación y Parámetros de Antoine para cada componente:

Sistema (1)

No. Comp.	Alimentación (moles)	Parámetros de Antoine		
		a	b	c
1	25.0	8.045	1554.30	222.65
2	25.0	7.997	1569.70	209.50
3	25.0	7.967	1668.21	228.00
4	25.0	7.188	1416.70	211.00

Sistema (2)

No. Comp.	Alimentación (moles)	Parámetros de Antoine		
		a	b	c
1	25.0	6.802	949.62	230.0
2	25.0	7.997	1569.70	209.5
3	25.0	7.120	1654.70	190.0
4	25.0	7.024	1161.00	224.0

Configuración de las columnas:

No. de Etapas de la columna = 30

Destilado (mol/h) = 40

Relación de reflujo = 2

Presión total = 1

En la tabla 6.1 y 6.2 se muestra el arreglo que debe tener el archivo de datos para la entrada al Programa de Cómputo para el Diseño de Columnas de Destilación (Apéndice B). En estas tablas se muestran los datos a ser alimentados y su

TABLA 6.1

ARCHIVO DE DATOS A SER ALIMENTADOS PARA EL SISTEMA 1.

1	4	NK
2	2,2,2,4	NOAC,NOFUG,NODIM,NOEX,NDIM
3	ETANOL-AGUA- N PROPANOL-AC. ACETICO.	NAME
4	1.97199,2.1055,-0.43199	}
5	2.51200,2.7799,-0.44039	
6	1.40000,0.9200,-2.32000	}
7	2.07200,2.2024,-0.55039	
8	0.100E01,0.12273E01,0.19283E00,-0.21691E00	}
9	0.77161E00,.1E01,0.87732E00,-0.33463E-01	
10	0.18128E01,0.20593E00,0.1E01,-0.6743E-01	}
11	0.41135E01,0.27263E01,0.29816E01,0.1E01	
12	0.0E00,-0.2033E-03,0.90927E-03,0.1395E-02	}
13	0.13147E-03,0.0E00,-0.24844E-03,0.11243E-02	
14	-0.11735E-02,0.96916E-03,0.0E00,0.13632E-02	}
15	-0.4968E-02,-0.25139E-02,-0.37084E-02,0.0E00	
16	-920.093,-477.755,-223.862,-616.148	}
17	-727.402,-418.917,-194.041,-539.903	
18	-477.755,-1160.935,-252.53,-783.738	}
19	-418.917,-931.554,-219.091,-668.275	
20	-223.862,-252.530,-652.368,-323.959	}
21	-194.041,-219.091,-479.629,-604.094	
22	-326.105,-394.054,-183.889,-1160.955	}
23	-285.07,-344.738,-159.758,-931.554	
24	353.373	T1,T2
25	10.108.3018.0	A,EX
26	8.04494,1554.3,22.65	}
27	7.99733,1569.7,209.5	
28	7.96681,1668.2,229.0	}
29	7.18807,1416.7,211.0	
30	-3032.32,37.904,7903.72,18.672	}
31	-2812.8,35.16,7722.4,26.77	
32	-1440.0,18.0,9230.62,8.705	}
33	-2246.4,28.09,4374.75,17.92	
34	30,2,1,0,2	NST,NFEED,NSL,NSV,NOON
35	40,2,1,100,80	DEST,REFLX,P.TT,TB
36	2	KMU
37	.7	HU(I) & HUS
38	7	NF
39	85,0,0,12.5,12.5,25	TF(NF),FKV(NF),FSTR(NF,J)
40	23	NF
41	110,1,25,12.5,12.5,0	TF(NF),FKV(NF),FSTR(NF,J)
42	10	SL
43	20	SV

TABLA 6.2

ARCHIVO DE DATOS A SER ALIMENTADOS PARA EL SISTEMA 2.

1	4	NK
2	2.2.2.4	NOAC,NOFUG,MODIM,NOEX,NDIM
3	1.2 DICLOROETANO-N PROPANOL-TOLUENO-ACETONA	NAME
4	2.42800.2.93080.0.08320	} Q(I),R(I),XL(I)
5	2.51200.2.7799.-0.44039	
6	2.96800.3.922280.1.85130	
7	2.33800.2.57350.-0.38600	
8	0.100E01.0.11371E00.0.18238E01.0.20497E00	
9	0.11282E-01.0.1E01.0.13917E01.0.96890E-00	
10	0.44101E01.0.52172E-01.0.1E01.0.15201E01	} A(O)(J,I)
11	0.23124E01.0.53528E-01.0.1000E01.0.10E01	
12	0.0E00.0.12082E-02.-0.86722E-03.0.10517E-02	} A(1)(J,I)
13	-0.20533E-03.0.0E00.-0.59075E-03.0.65881E-04	
14	0.48590E-03.0.11974E-02.0.0E00.-0.7153E-03	
15	-0.20691E-02.-0.62619E-03.0.86770E-03.0.0E00	
16	-1267.738.-797.219.-933.574.-967.743	
17	-1092.489.-692.769.-821.143.-824.669	
18	-729.219.-1267.738.-933.574.-1529.911	
19	-692.769.-1092.489.-821.143.-1263.136	
20	-933.574.-933.574.-1267.738.-1253.977	} BI2
21	-821.143.-821.143.-1092.499.-1073.803	
	-967.743.-1529.911.-1253.977.-1206.350	
23	-824.669.-1263.136.-1073.803.-996.947	
24	340.360	TI,T2
25	10.108.3019.0	A,EX
26	6.80270.949.62.230.0	} ART(K,J)
27	7.99733.1569.7.209.5	
28	7.12032.1654.7.190.0	
29	7.02447.1161.0.224.0	
30	-2156.12.47.109.9257.12.23.123	} ENP(J,K)
31	-1440.0.18.0.9230.62.8.705	
32	-2540.6.23.8.12305.35.11.256	
33	-3245.6.31.12.5347.89.22.62	
34	30.2.1.0.2	NST,NFEED,NSL,NSV,NOON
35	40.2.1.100.80	DEST,REFL,P,ATT,TE
36	2	KMU
37	7	KU(I) & MUS
38	7	NF
39	85.0.0.12.5.12.5.25	TF(NF),FKV(NF),FSTR(NF,J)
40	23	NF
41	110.1.25.12.5.12.5.0	TF(NF),FKV(NF),FSTR(NF,J)
42	10	SL
43	20	SV

correspondencia de acuerdo a los parámetros y variables requeridos para el cálculo de la columna y cuya nomenclatura viene señalada en el Apéndice B sección B.1.

Cabe señalar que en las tablas 6.1 y 6.2 vienen señaladas variables que no han sido especificadas originalmente, por lo que a continuación se mencionan y se explica de que forma son obtenidas.

Variables:  $Q(I)$ ,  $R(I)$ ,  $A(0)(J,I)$  y  $A(1)(I,J)$

Son obtenidos utilizando el Programa de Cómputo para Calcular los Parámetros UNIQAC y el cual viene descrito en el Apéndice C, así mismo en la sección E.2 del Apéndice E se muestran los resultados obtenidos del cálculo de estas variables requeridas para los sistemas 1 y 2.

Variables:  $BI1$  y  $BI2$ .

Son calculadas a través del Programa de Cómputo para Calcular los Coeficientes Viriales y el cual se encuentra descrito en el Apéndice D. En el Apéndice E sección E.3 se muestran los resultados de Coeficientes Viriales para los sistemas 1 y 2.

El resto de las variables a especificar están en función de la configuración de la columna a diseñar y del sistema que se trate.

## 6.2 LISTADO DE RESULTADOS DE LA CORRIDA DEL EJEMPLO DE APLICACION.

En el anexo D se muestran los resultados obtenidos de la corrida computacional del ejemplo No. 1 para cada una de las iteraciones calculadas y al final de estas se dan los resultados del cálculo etapa por etapa de la temperatura, flujos totales y por componente de la fase líquida y vapor, así como los perfiles del factor K de separación, las fracciones mol de la fase líquida y fase vapor para cada etapa en la columna de destilación, también proporciona los flujos de producto (fase líquida y vapor) para sus respectivas etapas de salida y por último se muestra el cálculo del balance de calor para el reboiler y el condensador de la columna de destilación diseñada bajo las condiciones señaladas en el punto 6.1.

## VII RESULTADOS

## 7. Resultados.

En el Apéndice D sección D.1 se muestran los resultados obtenidos de la corrida computacional del sistema 1 y 2 utilizados como ejemplos de aplicación en el Diseño de Columnas de Destilación usando como herramienta fundamental el Método de Contribución de Grupos UNIFAC: en éstos se listan cada una de las iteraciones calculadas y al final de estas se dan los resultados del cálculo etapa por etapa de la temperatura, flujos totales y por componente de la fase líquida y vapor, así como los perfiles del factor K de separación, las fracciones mol de la fase líquida y fase vapor para cada etapa en la columna de destilación, también proporciona los flujos de producto (fase líquida y vapor) para sus respectivas etapas de salida y por último se muestra el cálculo del balance de calor para el reboiler y el condensador de la columna de destilación diseñada bajo las condiciones señaladas en el punto 6.1.

Mas sin embargo, es necesario que dichos resultados sean presentados de manera esquemática, en virtud de que los resultados obtenidos de listados no reflejan o dan idea del comportamiento ocurrido etapa por etapa en las Columnas Diseñadas.

En las figuras 7.1 y 7.2 se muestran de manera esquemática un resumen de los resultados obtenidos del Cálculo de la Columna



FIGURA < 7.1 >

RESULTADOS DE LA COLUMNA DE DESTILACION DEL SISTEMA ETANOL (1)-N-PROPANOL (2)-AGUA (3)-AC. ACETICO (4)

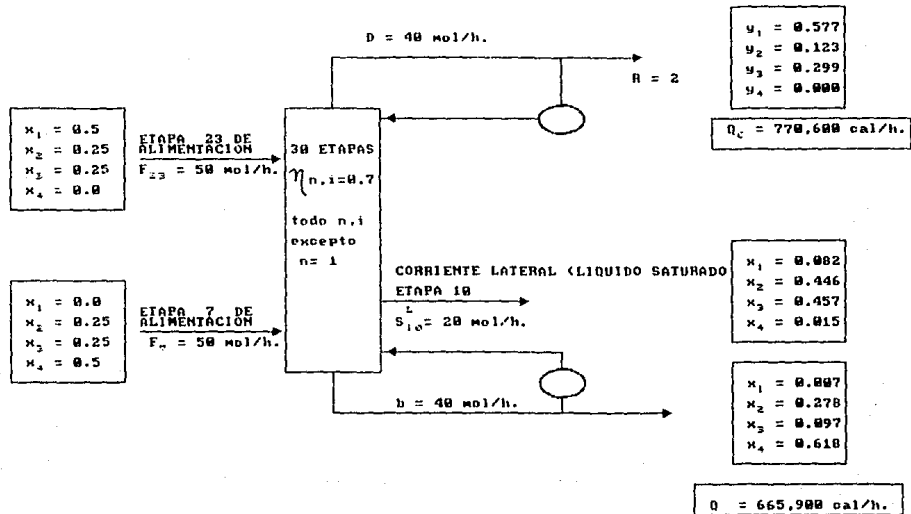
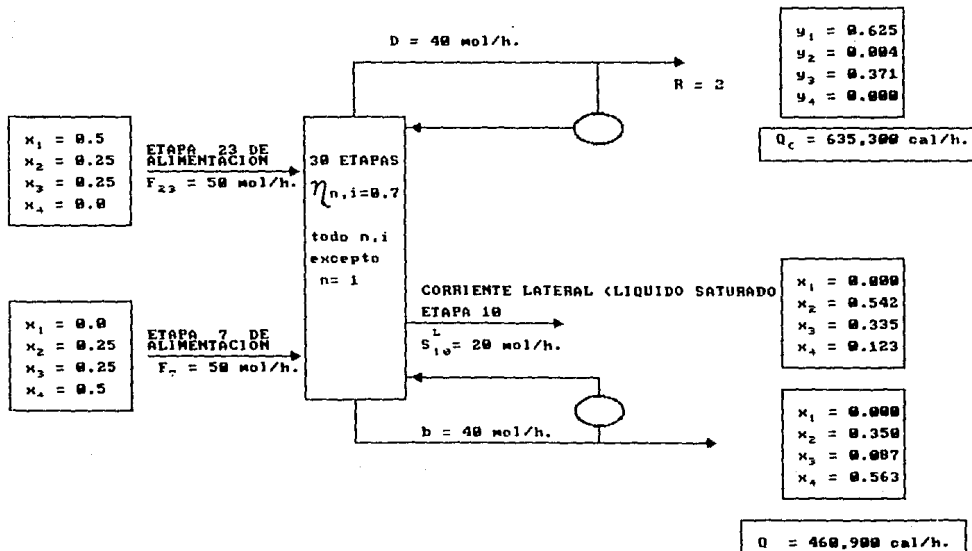


FIGURA < 7.2 >

RESULTADOS DE LA COLUMNA DE DESTILACION DEL SISTEMA  
1,2 DICLOROETANO<1>-N-PROPANOL<2>-TOLUENO<3>-ACETONA<4>



de Destilación para los Sistemas 1 y 2, utilizando el Método de Naphtali-Sandholm con UNIFAC.

Las figuras 7.3 y 7.4 indican cual es el perfil de temperaturas de los sistemas 1 y 2 respectivamente en la Columna de Destilación, pudiéndose apreciar cual es el comportamiento de la temperatura para cada una de las etapas de equilibrio.

Las figuras 7.5 y 7.6 muestran el perfil de flujos de la fase líquida con los que trabajan los sistemas 1 y 2 respectivamente en la columna.

En las figuras 7.7 y 7.8 muestran el perfil de flujos de la fase vapor de los sistemas 1 y 2 respectivamente etapa por etapa en las columnas diseñadas.

En las figuras 7.9 y 7.10 se indican cuales son los perfiles totales etapa por etapa dentro de la columna para los sistemas 1 y 2.

Las figuras 7.11 y 7.12 muestran el comportamiento de factor de separación dentro de la columna etapa por etapa para los sistemas 1 y 2 respectivamente.

FIGURA ( 7.3 )

PERFIL DE TEMPERATURAS EN LA COLUMNA

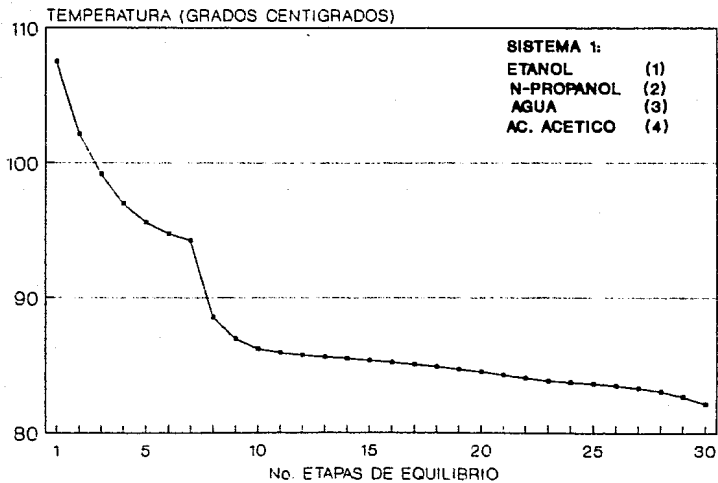


FIGURA ( 7.4 )

PERFIL DE TEMPERATURAS EN LA COLUMNA

TEMPERATURA (GRADOS CENTIGRADOS)

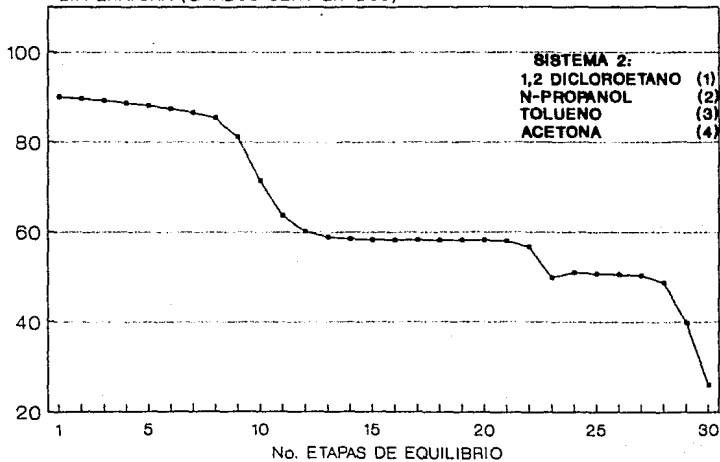


FIGURA ( 7.6 )

PERFIL DE FLUJOS EN LA COLUMNA DESTILACION

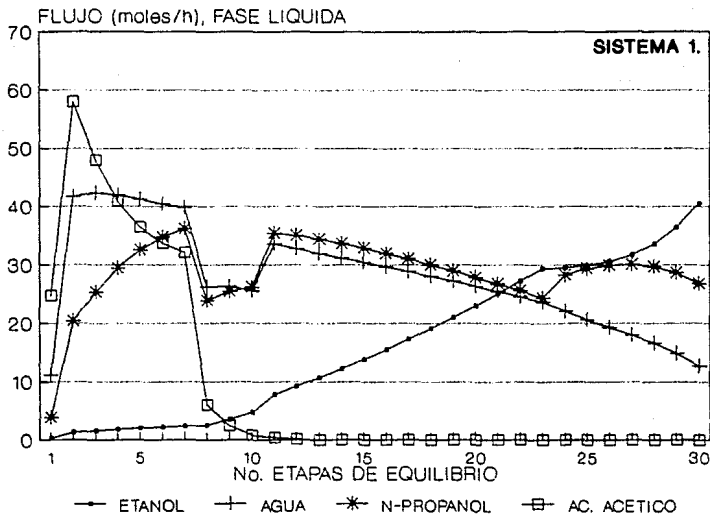


FIGURA ( 7.8 )

PERFIL DE FLUJOS EN LA COLUMNA DESTILACION

FLUJO (moles/h), FASE LIQUIDA

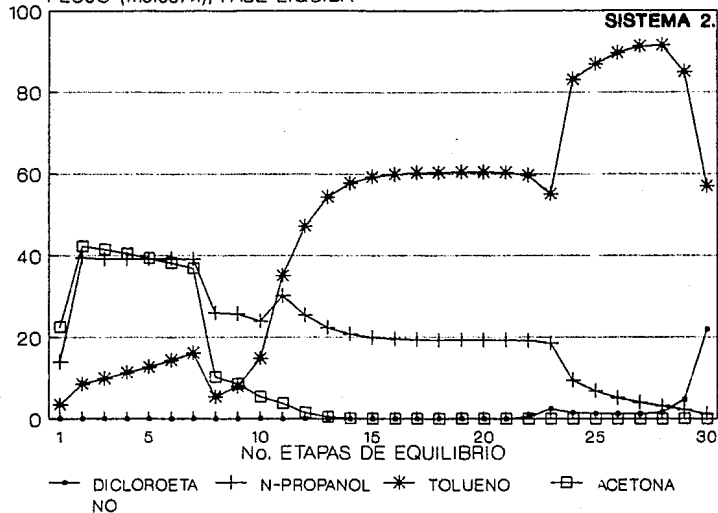


FIGURA ( 7.7 )

PERFIL DE FLUJOS EN LA COLUMNA DESTILACION

FLUJO (moles/h), FASE VAPOR

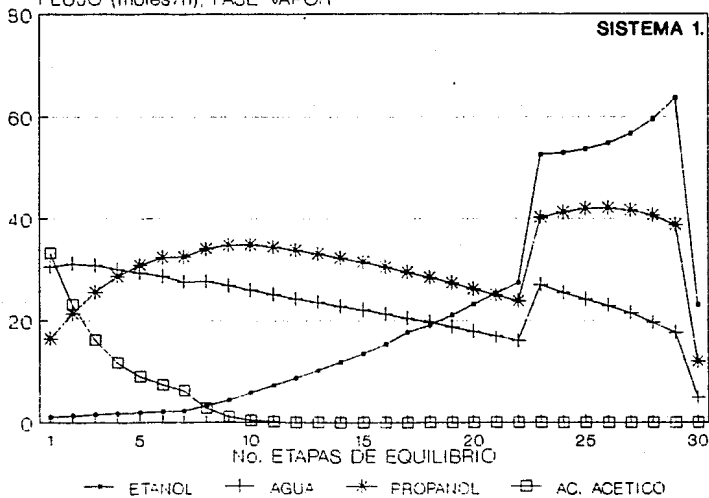




FIGURA ( 7.8 )

PERFIL DE FLUJOS EN LA COLUMNA DESTILACION

FLUJO (moles/h), FASE VAPOR

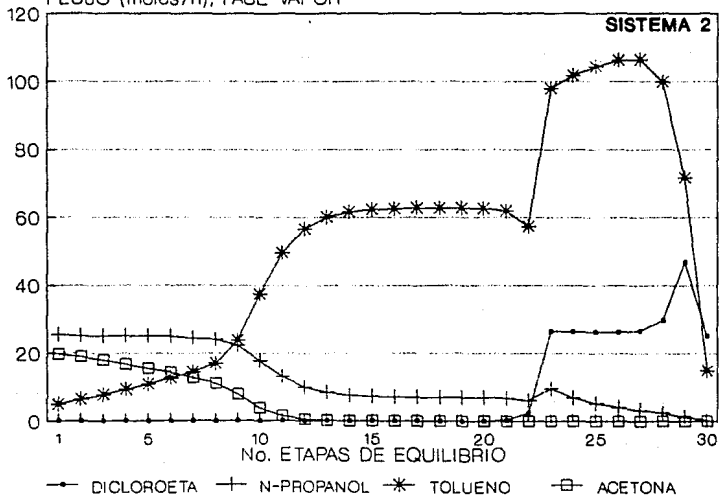


FIGURA ( 7.9 )

PERFIL DE FLUJOS EN LA COLUMNA DESTILACION

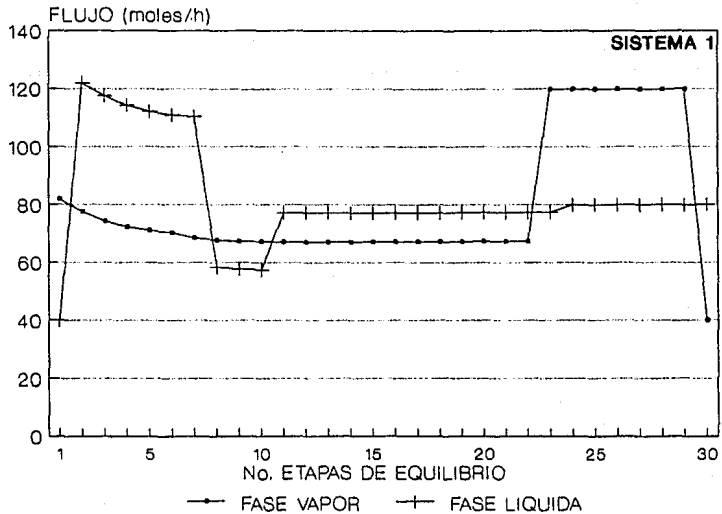


FIGURA ( 7.10 )

PERFIL DE FLUJOS EN LA COLUMNA DESTILACION

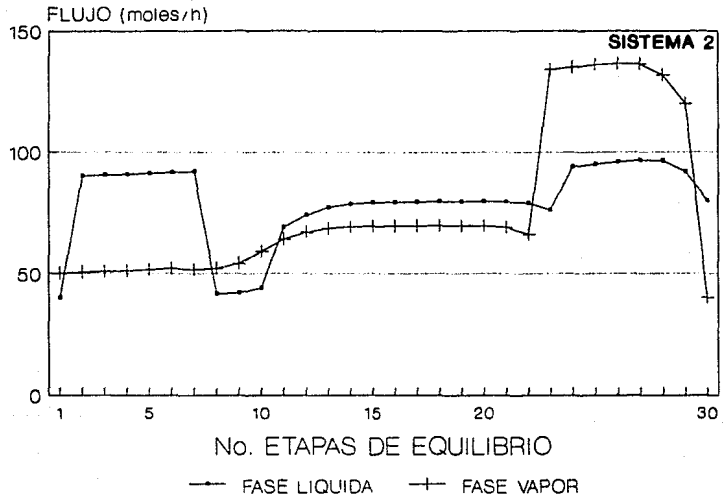


FIGURA ( 7.11 )  
PERFIL DE FACTOR K EN LA COLUMNA

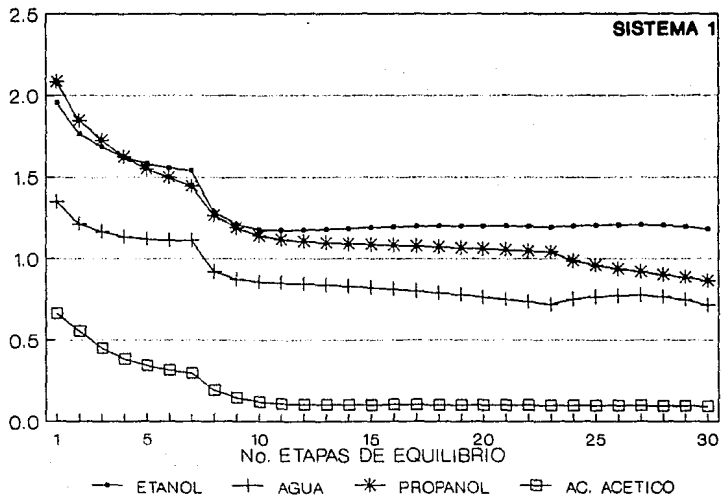
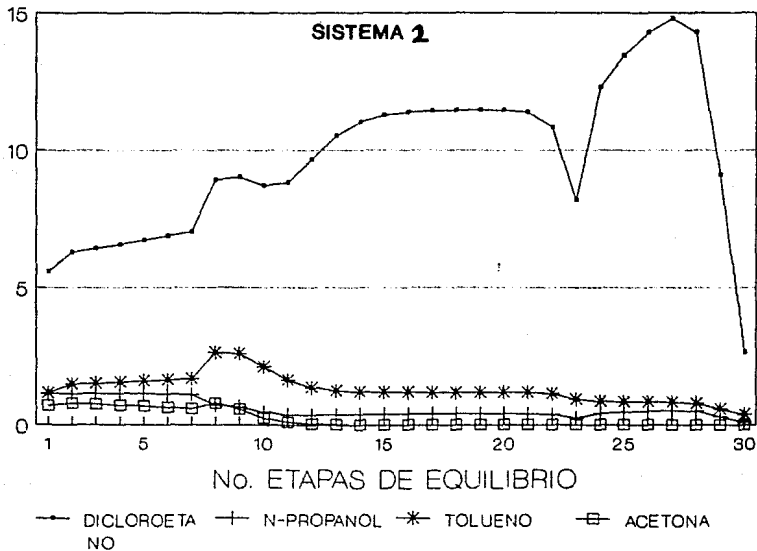


FIGURA ( 7.12 )

PERFIL DE FACTOR K EN LA COLUMNA



## **CAPITULO VIII**

### **ANALISIS DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES**

## ANÁLISIS DE RESULTADOS.

Como anteriormente se ha mencionado, dentro de las aplicaciones mas importantes de UNIFAC es la de emplearlo en el análisis del comportamiento de las columnas de destilación, ésto es logrado a través de los perfiles de temperatura, flujos de vapor y de líquido, flujos totales y del factor K en la columna de destilación que se esté analizando ó estudiando, así mismo con variación en los parámetros de diseño, como por ejemplo número de etapas, relación de reflujo, flujo de destilado, etc., hace posible la comparación entre distintas configuraciones y condiciones de operación de las columnas, permitiendo de esta manera seleccionar el sistema mas adecuado sin necesidad de operar los equipos en campo.

Para demostrar el funcionamiento del programa de cómputo desarrollado por Naphtali-Shandholm utilizando UNIFAC, éste fue probado con dos sistemas químicos definidos en el capítulo anterior; el sistema (1) (etanol-n propanol-agua-ac. acético) siendo el mismo que presenta Åage Fredenslund (3) para demostrar la aplicabilidad de UNIFAC en el Diseño de Columnas de Separación, llegando a los mismos resultados y con el mismo número de iteraciones, éstos son mostrados de manera gráfica en el capítulo VII y en listados de cómputo en el Apéndice D, con ésto se muestra el funcionamiento de este programa de cómputo utilizado para la aplicación del método

UNIFAC para el estudio y análisis de comportamiento de sistemas químicos con la finalidad de obtener las mejores condiciones en el proceso y por lo tanto un diseño óptimo del equipo de separación. En el caso del sistema (2), este fue seleccionado de entre los sistemas existentes en la tecnología química, para éste sistema se utilizaron los programas PUNQUAC y COEFVIR para el cálculo de los Parámetros UNQUAC a partir de UNIFAC y el cálculo de los Segundos Coeficientes Viriales respectivamente en virtud de que son requeridos para el cálculo de columnas de destilación utilizando el programa de Naphtali-Shandholm.

Los resultados obtenidos de los dos ejemplos de aplicación muestran la gran versatilidad, eficacia y utilidad del método UNIFAC en el Diseño de Columnas de Destilación, mas sin embargo, éste método UNIFAC no se limita a estos equipos de separación sino que también se le puede utilizar en el Diseño de Operaciones de Separación líquido-líquido, sólido-líquido y líquido-líquido-sólido.



## CONCLUSIONES.

En el desarrollo de este trabajo se ha observado la importancia que tienen los Métodos de Contribución de Grupos en el Diseño de Procesos de Separación y en específico para Columnas de Destilación, pero no solo se limita únicamente a éste aspecto sino también es utilizado para el cálculo de propiedades termodinámicas que a su vez son requeridas para otros cálculos de diseño como se indica en el capítulo IV.

El Método de Contribución de Grupos UNIFAC seleccionado para este trabajo es el que mayor desarrollo ha tenido de entre los otros métodos existentes, sin embargo, como todo método \*ésto implica mejoras continuas para ampliar el rango de aplicación, esto es en cuanto a temperatura, así como la inclusión de nuevos grupos funcionales y a la verificación de los valores de parámetros previamente obtenidos para los grupos funcionales, en virtud de que éstos van siendo corregidos o correlacionados de mejor manera con lo cual se va obteniendo mayor exactitud y precisión para el cálculo de las propiedades y de los equilibrios de fases.

También se destacó la importancia de recopilar una gran cantidad de información fundamental que sirva de respaldo para la creación de un banco de datos de equilibrios, información que debe ser integrada para lograr un excepcional crecimiento y expansión.

Se recomienda que trabajos futuros sobre éste tema incluyan revisiones bibliográficas que indiquen cual es el Estado actual de los Métodos de Contribución de Grupos aplicados a las operaciones de separación con la finalidad de conocer las mejoras que van surgiendo sobre éste en particular. Asimismo cabe señalar que nuevos grupos funcionales están siendo incorporados para completar la variedad de especies químicas que hoy día van siendo de suma importancia en la mayoría de las industrias.

También es deseable se realicen revisiones sobre los métodos de cálculo de operaciones de separación para de ésta manera eficientar al máximo su cálculo, obteniendo así mayor rapidez y menores tiempos de cómputo, en virtud de que hoy día con los avances de la computadora se logrará una mayor precisión en tales diseños.

## IX BIBLIOGRAFIA

## IX BIBLIOGRAFIA.

- (1) C. Judson King. " Procesos de Separación ", Mc Graw Hill Book Company New York. 1982.
- (2) K. Kojima and K. Tochigi, " Prediction of vapor-liquid equilibria by ASOG Method ", Elsevier Scientific Publishing Co. Amsterdam-Oxford-New York (1979).
- (3) Aage Fredenslund, " Vapor- Liquid Equilibria using UNIFAC " , Elsevier Scientific Publishing Company Amsterdam-Oxford-New York (1977).
- (4) Skjold-Jorgensen, " Vapor-Liquid Equilibria by UNIFAC Group Contribution" , Eng. Chem. Process Des. Dev. Vol. 18, No. 4, 1979.
- (5) Kikic, I.; Alessi P., Rasmussen P., Fredenslund Aa., "On the Combinatorial Part of the UNIFAC and UNIQUAC Models" Can. J. Chem. Eng. Vol. 52 April 1982.
- (6) Cunningham, J. R. and G. M. Wilson, Proceedings of the 54th GPA National Meeting, Denver 1974.
- (7) Wilson, G. M Adv. in Chemistry Series , Symp. Ser. 1977.

- (8) Moshfeghian, M. A. Shariat and J. H. Erbar, paper presented at the 86th AICHE, National Meeting Houston, 1979.
- (9) Robert C. Reid; John M. Prausnitz; B. E. Poling 'The Properties of Gases and Liquids' Fourth edition, Mc. Graw Hill.
- (10) I. Langmuir. " The Distribution and Orientation of Molecular, Third Colloid Symposium Monograph, The Chemical Catalog Company Inc., New York, 1925.
- (11) E. L. Derr and M. Papadopoulos, J. Am. Chem. Soc. 81(1959)2285.
- (12) G. M. Wilson and C. H. Deal, Ind. Eng. Chem. Fundamentals, 1(1962)20.
- (13) D. S. Abrams and J. M. Prausnitz, AICHE Journal, 21 (1975)116.
- (14) P. J. Flory, J. Chem. Phys. 9(1941)660; 10(1942)51 and M. L. Huggins J. Chem. Phys. 9(1941)40; Ann. N. Y. Acad. Sci., 431(1942)1.

- (15) Aage Fredenslund, R. L. Jones and J. M. Prausnitz, *AICHE Journal* 21(1975)1086.
- (16) Aage Fredenslund, Jurgen Gmehling, Michael L. Michelsen, Peter Rassmusen and John M. Prausnitz, *Ind. Eng. Chem., Process Design and Development*, 1977.
- (17) Aage Fredenslund, Russel L. Jones and J. M. Prausnitz, "Group-Contribution Estimation of Activity Coefficients in Non-ideal Liquid Mixtures", *AICHE Journal* (Vol. 21, No. 6)1975.
- (18) Guggenheim, E. A., "Mixtures", Clarendon Press, Oxford 1952.
- (19) Gmehling and J. Onken, "Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection", *DECHEMA Chemistry Data Series*, Frankfurt am Main, vol. 1 part 1-8, 1977; ver también Onken, U., Gmehling, J., *Chem. Ing. Tech.* (1977).
- (20) Wichterle, J., Linek, J., Halá, E., "Vapor-Liquid Equilibrium Data Bibliography" Elsevier Amsterdam, 1973; Supplement I, 1976.
- (21) Christiansen, L. J., and Fredenslund, documento presentado en el 12th. Symposium on Computer Applications in Computer & Chemical Engineering 1979.

- (22) Hayden, J. G., O'Connell, J. P., Ind. Eng. Chem., Process Des. Dev. 14, 209 (1975).
- (23) Nelder, J. A., Mead, R., Simplex Method for Function Minimization, Comput. Journal 7,308 (1965).
- (24) Skjold-Jorgensen, B. Kolbe, J. Gmehling and P. Rasmussen, " Vapor-Liquid Equilibria by UNIFAC Group Contribution ". Revision and Extension, Ind. Eng. Chem. process Des. Dev. Vol. 18, No. 4 (1979).
- (25) Gmehling, J. ; Rasmussen, P., Fredenslund, Aa. Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev. 16, 420 (1982).
- (26) Alessi, P.; Kikic I.; Fredenslund, Aa., Rasmussen, P. Can. J. Chem. Eng., 31, 94, (1982).
- (27) Mamata Muklopahany and Avinash S. Pathak, L-L-E Data for Aromatics Extraction Calculations using a Modified UNIFAC Model. Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 1986, 25, 733-736.
- (28) Karvo, M. J. Chem. Thermodyn, Prentice Hall, 1980.
- (29) Larsen, B. L.; Fredenslund, Aa.; Rasmussen, P. " Phase Equilib. Separat. Process, Mc Graw Hill, 1973.

(30) J. Gmehling and P. Rasmussen, Ind. Eng. Chem. Fundam.  
34, 951 (1982).

(31) Gmehling J.; Rasmussen P. Ind. Eng. Chem. Fundam. 1982,  
21, 186 188.

(32) Gmehling J.; Rasmussen P. Ind. Eng. Chem. Res. 1987,  
26, 159 161.



**X APENDICE**

A) CRITERIOS DE EQUILIBRIO.

B) DESCRIPCION DEL PROGRAMA PARA EL DISEÑO DE COLUMNAS DE DESTILACION.

C) PROGRAMAS PARA EL CALCULO DE PARAMETROS UNIQVAC (PUNIQVAC) Y PARA EL CALCULO DE LOS SEGUNDOS COEFICIENTES VIRIALES (COEFVIR).

D) LISTADO DE RESULTADOS.

D.1) SIMULACION COLUMNA.

D.2) CALCULO PUNIQVAC.

D.3) CALCULO SVIR.

**APENDICE A**

**TERMODINAMICA DEL EQUILIBRIO  
DE FASES**

### a.1) Termodinámica del Equilibrio de Fases.

El equilibrio implica una situación en la cual no se producen cambios macroscópicos respecto al tiempo, esto significa en la termodinámica, que no existe cambio en las propiedades del material con el tiempo. Se dice que un verdadero estado de equilibrio probablemente nunca se alcance debido a las continuas variaciones en los alrededores y a resistencias retardantes. El equilibrio requiere de un balance de todos los potenciales que pueden causar un cambio, sin embargo, la rapidez de aproximación al equilibrio, es proporcional a la diferencia de potencial entre el estado real y el estado de equilibrio, por lo que la rapidez de cambio se hace muy lenta cuando el sistema se aproxima al equilibrio. El equilibrio en estudios científicos es considerado cuando los cambios no pueden ser detectados con los aparatos de medición disponibles.

Los criterios que deben satisfacerse para que exista un estado de equilibrio para sistemas de multifases y multicomponentes fueron deducidas por Gibbs y son los siguientes:

" Para un sistema cerrado el estado de equilibrio es aquel en el cual la energía libre de Gibbs total es un mínimo respecto a todos los cambios posibles a las  $T$  y  $P$  dadas".

$$(dG^t)_{T,P} \leq 0 \text{ -----(a.1.1)}$$

donde:

$G^t$  = Energía libre de Gibbs total

T = Temperatura

P = Presión del sistema

Este criterio de equilibrio proporciona un método general para determinar los estados de equilibrio.

En un estado de equilibrio pueden presentarse variaciones diferenciales en el sistema a una T y P constantes, sin producir ningún cambio de  $G^t$  y este corresponde al significado de la igualdad de la ecuación (a.1.1), por lo tanto otro criterio general para que un sistema este en equilibrio es:

$$(dG^t)_{T,P} = 0 \text{ -----(a.1.2)}$$

Para aplicar este criterio se desarrolla una expresión para  $dG$  como función de los moles de los componentes en las diversas fases y se hacen igual a cero. Primero se parte de la siguiente ecuación:

$$d(nG) = -(nS)dT + (nV)dP + \sum(\mu_i dn_i) \text{ -----(a.1.3)}$$

ahora con la ecuación anterior pero escrita para cada fase:

$$d(nS)^{\alpha} = -(nS)^{\alpha}dT + (nV)^{\alpha}dP + \sum(\mu_i^{\alpha} dn_i^{\alpha}) \text{ ----- (a.1.4)}$$

$$d(nS)^{\beta} = -(nS)^{\beta}dT + (nV)^{\beta}dP + \sum(\mu_i^{\beta} dn_i^{\beta}) \text{ ----- (a.1.5)}$$

donde  $\alpha$ ,  $\beta$  denotan ambas fases.

La suma de las ecuaciones (a.1.4) y (a.1.5) proporciona el  $dG_t$  y queda de la siguiente manera a  $T$  y  $P$  constantes:

$$(dG_t)_{T,P} = \sum(\mu_i^{\alpha} dn_i^{\alpha}) + \sum(\mu_i^{\beta} dn_i^{\beta}) = 0 \text{ ----- (a.1.6)}$$

y si el sistema es cerrado y sin reacción química, los balances de materia requerirán que:

$$dn_i^{\alpha} = - dn_i^{\beta} \text{ ----- (a.1.7)}$$

y como resultado se obtiene:

$$\sum(\mu_i^{\alpha} - \mu_i^{\beta}) dn_i^{\alpha} = 0 \text{ ----- (a.1.8)}$$

donde para cumplir esta igualdad es necesario que cada término sea separadamente cero, esto es:

$$\mu_i^{\alpha} = \mu_i^{\beta} \text{ ----- (a.1.9)}$$

puediéndose esto generalizar para sistemas de más de dos fases:

$$\mu_i^a = \mu_i^b = \dots = \mu_i^N \text{-----(a.1.10)}$$

$$(i = 1, 2, \dots, N)$$

La ecuación (a.1.10) es un criterio general para el equilibrio de fases y establece que para un sistema de múltiples fases que se encuentran a la misma T y P se satisface la condición de equilibrio cuando el potencial químico ( $\mu_i$ ) de cada especie química es el mismo en todas sus fases.

Otro criterio igualmente general para el equilibrio de fases, se deriva de la siguiente ecuación:

$$dG_i = RT d \ln f_i \text{-----(a.1.11)}$$

a T constante y como  $\mu_i = G$ , puede escribirse de la siguiente forma:

$$d\mu_i = R T d \ln f_i \text{-----(a.1.12)}$$

donde:

R = Constante de la ley de los gases.

$f_i$  = Fugacidad del componente i.

Integrando la ecuación (1.2.12) se tiene que:

$$\mu_i = RT \ln f_i + C \text{ -----(a.1.13)}$$

donde C es una constante que solo depende de la temperatura y como todas las fases están a la misma, la ecuación precedente para las  $\mu_i$  de la ecuación (a.1.10) nos conduce a:

$$f_i^{\alpha} = f_i^{\beta} = \dots = f_i$$

Este último criterio de equilibrio requiere que para un sistema de múltiples fases a la misma T y P, la fugacidad de cada componente debe ser la misma para todas las fases.

En resumen, los criterios de equilibrio de fase los podemos sintetizar con las siguientes condiciones del sistema que a continuación se muestran con el esquema:

Fase vapor
Fase liquido I
Fase liquido II

Sistema cerrado



Un sistema en equilibrio no cambia sus propiedades macroscópicas con el tiempo:

$$T_v = T_L = T_{LII}$$

$$P_v = P_L = P_{LII}$$

$$f_{iv} = f_{iL} = f_{iLII}$$

Lo explicado en esta sección es de suma importancia para conocer el comportamiento de las fases vapor y líquido en las siguientes secciones.

## a.2) Fase Vapor

Existen relaciones rigurosas entre la fugacidad ( $f_1^V$ ) de un componente en fase vapor y las propiedades volumétricas de esta fase; estas propiedades están convenientemente expresadas en la forma de una ecuación de estado. Hay dos tipos comunes de ecuaciones de estado: una de esas expresa el volúmen como una función de la temperatura, presión y número de moles (ecuación con volúmen explícito); la otra expresa la presión como una función de la temperatura, volúmen y número de moles (ecuación con presión explícita). La última forma es más común ya que la presión es preferible como variable independiente, esto es más conveniente para usar una ecuación de estado con volúmen explícito. Una ecuación de estado sencilla es la ecuación virial truncada después del segundo término:

$$Z = P V / R T = 1 + B P / R T \text{ -----(a.2.1)}$$

donde  $V$  es el volúmen molar,  $P$  es la presión total,  $T$  es la temperatura absoluta y  $R$  es la constante de los gases;  $B$  es el segundo coeficiente virial, el cual es función de la temperatura y la composición pero es independiente de la presión o densidad. Para un sistema conteniendo  $m$

componentes, la dependencia de la composición sobre B es dado por:

$$B = \sum_{i=1} y_i \sum_{j=1} y_j B_{ij} \text{ -----(a.2.2)}$$

donde  $y$  es la fracción mol y  $B_{ij} = B_{ji}$ . Para el caso de una mezcla binaria:

$$B = y_1^2 B_{11} + 2 y_1 y_2 B_{12} + y_2^2 B_{22} \text{ -----(a.2.3)}$$

donde  $B_{ij}$  depende solamente de la temperatura y de los componentes  $i$  y  $j$ .

El coeficiente de fugacidad es encontrado de la relación termodinámica siguiente:

$$\ln \Phi_i = \int_0^P \left( \frac{\bar{Z}_i}{P} - 1 \right) dP \text{ -----(a.2.4)}$$

donde:

$$\bar{Z}_i = P \bar{V}_i / R T \text{ -----(a.2.5)}$$

y el volumen molar parcial  $\bar{V}_i$  es definido por:

$$\bar{V}_i = \left( \frac{\partial V_i}{\partial n_i} \right)_{T,P,n_j} \text{ -----(a.2.6)}$$

En la ecuación (a.2.6), V es el volúmen total conteniendo  $n_1$  moles del componente 1,  $n_j$  moles del componente j, etc. La diferencia es llevada a cabo manteniendo la temperatura, presión y número de moles totales ( excepto  $n_1$  ) constantes.

Cuando las ecuaciones (a.2.1) y (a.2.2) son sustituidos en la ecuación (a.2.4), se obtiene:

$$\ln \phi_i = ( 2 \sum_j y_j B_{ij} - B ) P / R T \text{ -----(a.2.7)}$$

La ecuación (a.2.7) es aplicable a presiones bajas o moderadas. La única limitación es que cuando la fase vapor contiene un componente fuertemente dimerizado como son los ácidos carboxílicos no puede ser utilizada y se tiene que hacer uso para el cálculo del coeficiente de fugacidad de la Teoría Química, la cual es discutida en las referencias (12) y (21).

La ecuación para el cálculo del coeficiente de actividad derivada de la ecuación virial en la forma de presión explícita es la siguiente:

$$\ln \phi_i = 2 / V ( \sum_j y_j B_{ij} ) - \ln Z \text{ -----(a.2.8)}$$

$$Z = 1 + B / V \text{ -----(a.2.9)}$$

donde (a.2.9) es la ecuación virial en la forma de presión explícita.

A presiones bajas no hay mucha diferencia entre los valores de  $\Phi_i$  calculadas de (a.2.7) y (a.2.8). A presiones hasta de 10 atmosferas la diferencia entre los valores obtenidos usando una y otra ecuación es aproximadamente menor a 1.5 %.

En forma breve describiremos los efectos de las variables independientes (P,T y composición) sobre la No-Idealidad de la fase vapor, pero primero diremos que el coeficiente de fugacidad ( $\Phi_i$ ) es una medida de la No-Idealidad y por lo tanto un alejamiento de la unidad, cuyo valor indica que no existe ninguna desviación del comportamiento ideal. El  $\Phi_i$  depende de la presión, temperatura y composición del vapor; esta dependencia en la región de presión moderada que es cubierto por la ecuación virial truncada y es usualmente como sigue:

- a) A temperatura y composición constante, un incremento en la presión causa que  $\Phi_i$  se desvíe de la unidad, usualmente en la dirección de  $\Phi_i < 1.0$
  
- b) A presión y composición constante, un incremento en la temperatura causa que  $\Phi_i$  se aproxime a la unidad, es decir, se comporta como ideal.

c) A presión y temperatura constante, los efectos de la composición sobre  $\phi_i$  son fuertes cuando  $y_i$  es pequeña. Si  $y_i$  es cercana a la unidad, el cambio en la composición tiene relativamente poco efecto sobre  $\phi_i$ .

A P, T, y (composición) constante, los efectos de una molécula  $j$  sobre  $\phi_i$  es más pronunciada cuando  $j$  es químicamente muy diferente de  $i$ . En mezclas polares, donde interacciones específicas con el hidrógeno tienden a ocurrir, los efectos de composición pueden ser muy grandes. un ejemplo bien conocido es el sistema eterdietil- cloroformo, donde el hidrógeno se enlaza entre moléculas diferentes pero no entre moléculas similares.

A veces las correcciones en la fase vapor pueden ser pequeñas para moléculas no-polares a bajas presiones, tales correcciones son generalmente no despreciables para mezclas conteniendo moléculas polares. Correcciones en la fase vapor son sumamente importantes para mezclas conteniendo uno o más ácidos carboxílicos.

### a.3) Fase Líquida.

Para predecir el equilibrio líquido-vapor y líquido-líquido en sistemas multicomponentes, se requiere de un método para calcular la fugacidad del componente  $i$  ( $f_{iL}$ ) en una mezcla líquida. A una presión ( $P$ ) y temperatura en un sistema, la fugacidad es escrita como un producto de tres términos para el componente  $i$  en una solución líquida:

$$f_{iL} = \Gamma_i x_i f_i^* \text{----- (a.3.1)}$$

$$i = 1, 2, \dots, M$$

donde  $f_i^*$  es la fugacidad de  $i$  a un estado estándar arbitrariamente seleccionado. El estado estándar es definido como el componente puro  $i$  a una temperatura y presión en el sistema. Esta fugacidad de referencia ( $f_i^*$ ) está relacionada a la fugacidad en la presión de vapor de  $i$  a la temperatura ( $T$ ) por la siguiente ecuación (22) :

$$f_i^* = f_i^s \exp \int_{p_s}^P V_i \, dP/R T = f_i^s * POY \text{----- (a.3.2)}$$

donde para el líquido puro  $i$ ,  $P_i^s$ , es la presión de saturación,  $f_i^s$ , la fugacidad de saturación y  $V_i$  es el volumen molar del líquido, todo a una temperatura ( $T$ ).

La fugacidad de saturación ( $f_i^s$ ) se define como:

$$f_i^s = \phi_i^s P_i^s \text{ -----(a.3.3)}$$

Donde  $\phi_i^s$  es el coeficiente de fugacidad de saturación del componente  $i$  y es calculado a partir de las propiedades de presión ( $P$ ), volumen ( $V$ ) y temperatura ( $T$ ) en la fase vapor, pudiéndose usar los segundos coeficientes viriales para su cálculo, tal como se muestra en la sección (1.3).

El volumen molar líquido,  $V_i$ , es obtenido usando la correlación de Yen y Woods (23). Este método reproduce los datos de la literatura para densidades en líquidos con un 2% de desviación, el cual es satisfactorio para calcular el factor de corrección de Poynting, POY. Por lo que a bajas presiones se considera despreciable la dependencia de la presión en el volumen, por lo que se puede escribir como sigue:

$$POY = \exp((P - P_i^s) V_i / RT) \text{ -----(a.2.4)}$$

En los Capítulos III y IV se discuten los diferentes modelos basados en el "concepto de composición local" para el cálculo



del coeficiente de actividad  $\gamma$  como una función de la composición del componente líquido  $i$  ( $x_i$ ). Estos modelos contienen parámetros los cuales pueden ser calculados usando datos experimentales de equilibrio de fase.

**APENDICE B**

**DESCRIPCION DEL PROGRAMA  
DISEÑO DE COLUMNAS DE  
DESTILACION.**

## **Apéndice B.**

Este apéndice lista el Programa principal y las subrutinas utilizadas para el Diseño de Columnas de Ventilación referidas en el Capítulo V. El apéndice contiene:

B.1 Especificaciones de entrada para el programa principal.

B.2. Lista de símbolos utilizados en el programa.

B.3 Listado del programa principal y de las subrutinas.

B.4 Descripción de subrutinas que integran el programa.

**B. DESCRIPCION DEL PROGRAMA DE DESTILACION.**

**B.1 ESPECIFICACIONES DE ENTRADA PARA EL PROGRAMA PRINCIPAL..**

**a) NK**

NK es el número de componentes.

**b) NOAC, NOFUG, NODIM, NOEX Y NDIM.**

**NDIM :** Es el número del componente dimerizado. Si una variable control es cero o negativa, la no idealidad es excluida.

**NOAC :** Coeficientes de Actividad.

**NOFUG:** Coeficientes de Fugacidad.

**NODIM:** Dimerización en fase vapor.

**NOEX :** Entalpía de exceso (por medio de los parámetros UNIQUAC en el inciso d).

c) NOMBRE DEL PROGRAMA.

Descripcion del problema o sistema a resolver con el programa.

d) Entrada para el cálculo de No-idealidades (PARIN).

d.1.- Parámetro UNIOUAC. Solamente si NOAC es mayor que (CERO). Los datos son obtenidos como datos de salida del programa el cual calcula los parámetros UNIOUAC de UNIFAC.

La entrada es:

$q_k$ ,  $r_k$  y  $l_{k,1}$ .

La matriz  $A(J,I)$  (también como  $A^{(0)}_{j,i}$   $I=1,NK$ ;  $j=1,NK$ )

La matriz  $B(J,I)$  (también como  $A^{(1)}_{j,i}$   $I=1,NK$ ;  $j=1,NK$ )

$T_{j,i} = A^{(0)}_{j,i} = A^{(1)}_{j,i} * T$

d.2.- Segundo Coeficiente Virial (solamente si NOFUG es mayor que cero). Para  $i = 1, NK$  :

$B_{i,j}(T1), j = 1, NK$  .

$B_{i,j}(T2), j = 1, NK$  .

Los segundos coeficientes viriales pueden ser basados en datos experimentales o pueden ser estimados de la correlación de Hayden O'Connell.

d3.- T1 (es la temperatura a la cual  $B_{i,j}(T1)$ 's son calculados) y T2 (similarmente para  $B_{i,j}(T2)$ ).

T1 y T2 son en °K.

d.4.- A, B en la ecuación de dimerización (solamente si NODIM es mayor que cero).

e) ANT(K,J). K = 1,3.

ANT (K,J), son las tres constantes de Antoine para el componente J. Una línea por cada componente.

f) ENP(J,K), K = 1,4.

ENP(J,K), da la entalpia para el componente puro J. La entalpia es definida por una ecuación linearizada así es que la entalpia para  $t = 100^\circ\text{C}$  sea como:

$$h = h_0 + C_1 * t$$

Para el vapor es definido como:

$$H = H_0 + C_v * t$$

K = 1 corresponde a  $h_0$

K = 2 corresponde a  $C_1$

K = 3 corresponde a  $H_0$

K = 4 corresponde a  $C_v$

La temperatura es denotada aquí por  $t$ , la cual esta referida a alguna temperatura estandard. En la lectura de estos parámetros, uno puede referirse a alguna temperatura estandard. Si  $C_1$ ,  $C_v$  y  $H^*$  (el calor de evaporación en la temperatura estandard) son conocidos, los parámetros son definidos como siguen:

$$h_0 = - C_1 * t_0$$

$$H_o = H^* - C_p \cdot t_o$$

donde  $t_o$  es la temperatura estandard, las unidades pueden ser unidades de energia/moles °C.

Una línea por cada componente.

g) NST, NFEED, NSL, NSV, NCON.

donde:

NST : Número de etapas, incluyendo el reboiler y condensador.

NFEED: Número de platos alimentados.

NSL : Número de corrientes laterales líquidas.

NSV : Número de corrientes laterales vapor.

NCON : Si NCON es cero, los cálculos paran.

h) DEST, RFLX, P, TT, TB.

DEST : Cantidad de destilado, moles/hora.

RFLX : Razón de reflujo.



P : Presión, atmósferas.

TT : Temperatura supuesta en el tope de la columna, °C.

TB : Temperatura supuesta en el fondo de la columna, °C.

i) KMU.

KMU = 0 < 0 : Una eficiencia de etapa Murphree es leída para cada componente.

KMU > 0 : Una eficiencia constante es leída.

j) Eficiencias de etapa Murphree, MUS o MU(I). FORMATO LIBRE.

j.1.- Si KMU es mayor o igual a cero, solamente una línea es leída (la eficiencia de etapa es constante).

j.2.- Si KMU es menor que 1.0, una línea puede ser leída para cada etapa (incluyendo el reboiler y condensador).

k) NF: Número del plato de alimentación.

l)  $TF(NF)$ ,  $FKV(NF)$ ,  $(FSTR(NF,J))$ ,  $J=1,NKI$ .

$TF(NF)$  es la temperatura de la alimentación en el plato  $NF$ .

$FKV(NF)$  es la fracción de alimentación en el plato  $NF$ , el cual aparece como vapor (la especificación más importante de estas dos especificaciones).

$FSTR(NF,J)$ ,  $J=1,NK$  es la alimentación de cada componente sobre el plato  $NF$ .

Los incisos  $k$  y  $l$  son repetidos  $NFEED$  veces.

m)  $NF$  : Número del plato de la corriente lateral de líquido.

n)  $SL(NF)$ : Líquido total en la corriente lateral (moles /hora) en el plato  $NF$ .

Los incisos  $m$  y  $n$  son repetidos  $NSL$  veces.

o)  $NF$  : Número de plato de la corriente lateral de vapor.

p) SV(NF): Vapor total de la corriente lateral (moles/hora)  
en el plato NF.

Los incisos o y p son repetidos NSV veces.

El programa después del cálculo de la columna, regresa a las etapas del inciso g): NST. NFEED...

Todas las corrientes tienen las unidades de moles/hora, la temperatura en °C y las unidades de los parámetros para Antoine son en mm de Hg° y °C.

## B.2 LISTA DE VARIABLES USADAS EN EL PROGRAMA.

### a) PROGRAMA PRINCIPAL:

TMAX : Limite para correcciones de temperatura.

NK : Número de componentes.

NOAC : Si NOAC < 1.0, el coeficiente de Actividad es igual a 1.0.

NOFUG : Si NOFUG < 1.0, el Coeficiente de Fugacidad es igual a 1.0.

NODIM : Si NODIM < 1.0, la fase de no dimerización es incluida.

NOEX : Si NOEX < 1.0, la entalpía de exceso es igual a cero (0).

NKO : Es igual a NK (número de componentes).

NAVN : Aquí se puede escribir algún texto en el programa.

ANT(K,J) : Constantes de Antoine para el componente J.

ENP(K,J) : Parámetros de entalpía para el componente J.

NST : Número de etapas.

NFEED : Número de etapas alimentadas.

NSL : Número de corrientes laterales en fase líquida.

NSV : Número de corrientes laterales en fase vapor.

DEST : Cantidad de destilado.

RFLX : Razón de reflujo.

P : Presión total.

TT : Temperatura supuesta en el tope de la columna.

TB : Temperatura supuesta en el fondo de la columna.

KMU : Si KMU es mayor que cero, la eficiencia de etapa es asumida constante.

MU(I) : Eficiencia de etapa sobre la etapa I.

MUS : Eficiencia de etapa constante.

SV(I) : Corriente lateral de vapor sobre la etapa I.

SL(I) : Corriente lateral de líquido sobre la etapa I.

FKV(I) : Fracción de alimentación de vapor sobre la etapa I.

FSTR(I) : Alimentación total sobre la etapa I.

HF(I) : Entalpía de alimentación.

NF : Número de etapa alimentada (es también usada para otros propósitos.

TF(NF) : Temperatura de alimentación.

FSTR(I,J) : Alimentación del componente J sobre la etapa I.

FV(I) : Flujo total de vapor en la etapa I.

FL(I) : Flujo total de líquido en la etapa I.

FEED(J) : Alimentación total del componente J.

FEED(NK1) : Alimentación total.

BU : Productos en el fondo.

XDEST : Cantidad total de productos en corrientes laterales.

FVMAX : Límite para corrección de flujo de vapor.

FLMAX : Límite para corrección de flujo de líquido.

T(I) : Temperaturas sobre la etapa I.

FVV(I,J) : Flujo de vapor del componente J sobre la etapa I.

FLL(I,J) : Flujo de líquido del componente J sobre la etapa I.

XKF(I,J) : Factor de separación para el componente J sobre la etapa I.

DFK(I,J,K) : DFAC (I,J,K) de la subrutina KFAC.

D(I,J) : Función Discrepancia para el componente J sobre la etapa I ó correcciones para éstas.

BMAT(I,J,K) : B-matrices.

AMAT(I,J,K) : A-matrices.

CM(J,K) : Una matriz usada en GAUSL.

QQ : Limitación sobre variables.

RES : Suma de cuadrados de la Función Discrepancia.

PROD(1,J,K) : Corrientes de producto como líquido del componente J sobre la etapa I.

PROD(2,J,K) : Corrientes de producto como vapor del componente J sobre la etapa I.

FINM(1,I,J) : Fracción mol de líquido del componente J sobre la etapa I.

**FINM(2,I,J)** : Fracción mol de vapor del componente J sobre la etapa I.

**b) SUBROUTINAS:**

**EXCES:**

**HE(I)** : Contribución para hE a partir del componente I.

**TE(I)** : Temperatura de la etapa I.

**X(J)** : Fracción Mol del componente J.

**Q(I)** : Parámetro UNIQUAC del componente puro.

**EXCOR:**

**DEX(I,J)** : Calcula las Derivadas con respecto al flujo del componente líquido o de la temperatura.

**MQUAC:**

**R(I), Q(I), XL(I), THETA(I), PARAM(I,J,K), PAR(J), THS(I)** son parámetros UNIQUAC.

**GAM(J)** : Coeficientes de actividad del componente J.



FUG:

BI1(I,J) : Segundo coeficiente virial a la temperatura T1.

BI2(I,J) : Segundo coeficiente virial a la temperatura T2.

BI(I,J) : Segundo coeficiente virial a la temperatura T.

BMIX : Segundo coeficiente virial de mezcla.

FI(J) : Coeficiente de fugacidad del componente J.

ZND : Corrección de la fase vapor para componentes no dimerizados.

ZDIM : Corrección de la fase vapor para componentes dimerizados.

ONEDI:

ZDI : Factor de corrección para los componentes dimerizados.

ZNDT : Factor de corrección para los componentes no dimerizados.

KFAC:

PAR(J) : Presión parcial del componente.

YY(J)=Y(J) : Fracción mol del componente J en la fase vapor.

XX(J) : Fracción mol del componente J en la fase líquida.

XKF(I<J) : Relación de equilibrio del componente J en la etapa I.

DFAC(I,J,K): Derivadas del factor K con respecto a las razones de flujo líquido y vapor así como con la temperatura.

ENT:

HL(I) : Entalpía de la fase líquida en la etapa I.

HV(I) : Entalpía de la fase vapor en la etapa I.

HVV(I,J) : Entalpía de la fase vapor del componente J en la etapa I.

HLL(I,J) : Entalpía de la fase líquida del componente J en la etapa I.

CV(I),CL(I) : Derivadas de la entalpía con respecto a la temperatura.

**PARIN:**

**A :** A en la expresión  $-\log_{10}KA = A-B/T$

**BX :** B en la misma expresión anterior.

YY(J)=Y(J) : Fracción mol del componente J en la fase vapor.

XX(J) : Fracción mol del componente J en la fase líquida.

XKF(I<J) : Relación de equilibrio del componente J en la etapa I.

DFAC(I,J,K): Derivadas del factor K con respecto a las razones de flujo líquido y vapor así como con la temperatura.

ENT:

HL(I) : Entalpía de la fase líquida en la etapa I.

HV(I) : Entalpía de la fase vapor en la etapa I.

HVV(I,J) : Entalpía de la fase vapor del componente J en la etapa I.

HLL(I,J) : Entalpía de la fase líquida del componente J en la etapa I.

CV(I),CL(I) : Derivadas de la entalpía con respecto a la temperatura.

B.3 LISTADO DEL PROGRAMA PRINCIPAL PARA EL CALCULO DE COLUMNAS  
 DE DESTILACION Y DE LAS SUBROUTINAS UTILIZADAS.

HEI

```

1  $CONTROL USLINIT,FILE=05,FILE=07
2  PROGRAM HAPHTALI
3  IMPLICIT REAL*4
4  DIMENSION FLMAX(5),FVMAX(5)
5  DIMENSION PFOD(2,30,5)
6  DIMENSION FEED(6),FL(30),FV(30),XFK(30,5),FLL(30,5),T(30)
7  DIMENSION FVV(30,5),HVC(30),HLC(30),CV(30),CL(30),HVV(30,5),HLL(30,5)
8  ,HF(30),TF(30)
9  DIMENSION AMAT(11,11),BMAT(30,11,11),D(30,11)
10 DOUBLE PRECISION CM(11,22)
11 DIMENSION SL(30),SV(30),FKV(30),FSTR(30,6),DFK(30,5,11)
12 DIMENSION ANT(3,5),NAVN(20)
13 DIMENSION MU(30)
14 DIMENSION HHE(30),DEXH(30,6)
15 DIMENSION FINH(2,30,5)
16 DIMENSION ANTH(2,5)
17 COMMON/HAPH/NDIM,HOAC,NOFUG,NOEX,NK,0(5),R(5),XL(5),PARAM(5,5,2),E
18 ,NH(5,4),BI(5,5),BI2(5,5),T1,T2,A,BX,NDIM
19 C   TMAX ES LA MAXIMA VARIACION DE TEMPERATURA ENTRE LAS ITERACIONES
20   TMAX=10.
21   READ(5,*)NK
22 C   SI LAS CONSTANTES DE ABAJO SON MAS GRANDES QUE CERO, RESPECTIVAMEN
23   TE LOS COEFICIENTES DE ACTIVIDAD, LOS COEFICIENTES DE FUGACIDAD, LA
24   DIMERIZACION EN FASE VAPOR, Y LA ENTALPIA DE EXCESO SERA CALCULADA
25 C   NDIM ES EL NUMERO DE COMPONENTES DIMERIZANTES
26   READ(5,*)HOAC,NOFUG,NDIM,NOEX,NDIM
27   NK0=NK
28   NK1=NK+1
29   NK2=2 * NK + 1
30   NK11=NK1+1
31   NK21=NK2-1
32 C   LEE LOS PARAMETROS UNIGUAC
33   CALL PARIH(NAVN)
34   WRITE(7,12)NAVN
35   12  FORMAT(1H1,20A3)
36   IF (NOAC.GT.0) WRITE(7,801)
37   FORMAT(//," INCLUYENDO COEFICIENTES DE ACTIVIDAD      ")
38   IF(NOFUG.GT.0) WRITE(7,802)
39   FORMAT(//," INCLUYENDO COEFICIENTES DE FUGACIDAD      ")
40   IF(NDIM.GT.0) WRITE(7,803)
41   803  FORMAT(//," INCLUYENDO DIMERIZACION              ")
42   IF(NOEX.GT.0) WRITE(7,804)
43   804  FORMAT(//," INCLUYENDO EXCESOS DE ENTALPIA        ")
44   DO 17 J=1,NK
45   17  READ(5,*) (AHT(K,J),K=1,3)
46   DO 19 J=1,NK
47   19  ANTH(1,J)=ANT(1,J)
48   ANTH(1,J)=2.302585*(ANT(1,J)-2.880814)
49   ANTH(2,J)=ANT(2,J)
50   ANTH(2,J)=2.302585*ANT(2,J)
51   DO 1 J=1,NK
52   1  READ(5,*) (ENP(J,K),K=1,4)
53 C   LEE ESPECIFICACIONES DE LA COLUMNA
54   333 READ(5,*) NST,NFEED,NSL,NSV,HCON
55   IF(HCON.EQ.0) GO TO 555
56   READ(5,*) DEST,PFLX,P,TT,TE
57   READ(5,*) KMU

```

```

58      IF(KNU) 1001,1001,1002
59      1001 CONTINUE
60      DO 1000 I=2,NST
61      1000 READ(5,*) MUX(I)
62      GO TO 1004
63      1002 READ(5,*) MUS
64      DO 1005 I=2,NST
65      1005 MUX(I)=MUS
66      1004 CONTINUE
67      MUX(I)=1.
68      DO 200 I=1,NST
69      SL(I)=0.
70      SV(I)=0.
71      FKV(I)=0.
72      FSTR(I,NK1)=0.
73      DO 200 J=1,NK
74      200  FSTR(I,J)=0.
75      DO 1010 I=1,NST
76      1010 HF(I)=0.
77      DO 201 I=1,NFEED
78      READ(5,*) NF
79      READ(3,*)TF(NF),FKV(NF),(FSTR(NF,J),J=1,NK)
80      DO 201 J=1,NK
81      HF(NF)=HF(NF)+FSTR(NF,J)*(FKV(NF)*(ENP(J,3)+ENP(J,4)+TF(NF)))+(1.-F
82      *KV(NF))*(ENP(J,1)+ENP(J,2)+TF(NF))
83      201  FSTR(NF,NK1)=FSTR(NF,NK1)+FSTR(NF,J)
84      IF(NSL.EQ.0) GO TO 203
85      DO 202 I=1,NSL
86      READ(5,*) NF
87      202  READ(5,*) SL(NF)
88      203  IF(NSV.EQ.0) GO TO 204
89      DO 205 I=1,NSV
90      READ(5,*) NF
91      205  READ(5,*) SV(NF)
92      C    EL FLUJO TOTAL ES ESTIMADO POR LA SUPOSICION DE FLUJO CONSTANTE
93      C    DE ESTADO A ESTADO EN CADA SECCION DE LA COLUMNA.
94      204  FV(NST)=DEST
95      FL(NST)=DEST+RFLX
96      FV(NST-1)=FL(NST)-FSTR(NST,NK1)+SV(NST)+SL(NST)+DEST
97      DO 210 I=3,NST
98      IF(NST.LE.2)GO TO 210
99      I=NST-2-1)
100     FL(I)=FL(I+1)-SL(I)+(1.-FKV(I))*FSTR(I,NK1)
101     FV(I-1)=FV(I)+SV(I)-FKV(I)*FSTR(I,NK1)
102     210  CONTINUE
103     FL(1)=FL(2)-SL(1)+(1.-FKV(1))*FSTR(1,NK1)
104     FL(1)=FL(1)-FV(1)
105     DO 211 J=1,NK1
106     FEED(J)=0.
107     DO 211 I=1,NST
108     211  FEED(J)=FEED(J)+FSTR(I,J)
109     BU=0.
110     DO 212 J=1,NKD
111     BU=BU+FEED(J)
112     XDEST=0.
113     DO 213 I=1,NST
114     213  XDEST=XDEST+SV(I)+SL(I)

```

```

115      BU=BU-DEST-XDEST
116      WRITE(7,18)
117      18  FORMAT(,"COMPOSICION DE ALIMENTACION Y PARAMETROS DE ANTINE",//)
118      WRITE(7,23) (J,FEED(J),ANTM(1,J),ANTM(2,J),ANT(3,J),J=1,NK)
119      23  FORMAT(I3,F12.3,5X,3F12.3)
120      DO 24 J=1,NK
121          FVMAX(J)=FEED(J)*RFLX
122      24  FLMAX(J)=FEED(J)*RFLX
123      WRITE(7,16)NST,DEST,RFLX,P
124      16  FORMAT(," NUMERO DE ETAPAS ",I9,," DESTILADO ",F12.3,," RELACIO
125      #N DE REFLUJO ",F15.6,," PRESION TOTAL ",F12.3//)
126      WRITE(7,215)
127      215  FORMAT(//," CONFIGURACION DE FLUJO ",//," I          FL          FV
128      # SL          SV          FKV          CORRIENTES DE ALIMENTACION",//)
129      DO 216 I=1,NST
130      216  WRITE(7,217) I,FL(I),FV(I),SL(I),SV(I),FKV(I),FSTR(I,J),J=1,NK)
131      217  FORMAT(I3,3X,10F8.1)
132      DO 26 I=1,NST
133      26  T(I)=TB+(I-1)*(TT-TB)/NST
134      DO 3 I=1,NST
135      DO 3 J=1,NK
136          FVV(I,J)=FEED(J)/FEED(NK1)+FV(I)
137      3  FLL(I,J)=FEED(J)/FEED(NK1)+FL(I)
138      500 CALL KFAC(NST,NKO,T,ANT,P,FLL,FVV,XFK,DFK)
139          CALL ENT(NST,T,FLL,FVV,HLL,HVV,HL,HV,CL,CV)
140          CALL EXCESC(NST,T,FLL,HHE)
141          CALL EXCOR(NST,T,FLL,DEXH)
142      DO 30 I=1,NST
143      DO 31 J=1,NKO
144          D(I,J)=FVV(I,J)*(1.+SV(I))/FV(I)+FLL(I,J)*(1.+SL(I))/FL(I)-FSTR(I,
145      #J)
146          IF(I.GT.1)D(I,J)=D(I,J)-FVV(I-1,J)
147          IF(I.LT.NST)D(I,J)=D(I,J)-FLL(I+1,J)
148      31  CONTINUE
149      DO 32 J=NK1,NK2
150          K=J-NKO
151          D(I,J)=MU(I)*XFK(I,K)+FV(I)+FLL(I,K)/FL(I)-FVV(I,K)
152          IF(I.GT.1)D(I,J)=D(I,J)+(1.-MU(I))*FVV(I-1,K)+FV(I)/FV(I-1)
153      32  CONTINUE
154          IF(I.EQ.1)GO TO 27
155          IF(I.EQ.NST)GO TO 28
156          D(I,NK2)=(1.+SV(I))/FV(I)+HV(I)+(1.+SL(I))/FL(I)+HL(I)-HF(I)-HV(I-
157      #1)-HL(I+1)+(FL(I)+SL(I))*HHE(I)-FL(I+1)*HHE(I+1)
158      GO TO 29
159      27  D(I,NK2)=BU
160      DO 101 J=1,NKO
161      101  D(I,NK2)=D(I,NK2)-FLL(I,J)
162      GO TO 29
163      28  D(I,NK2)=RFLX*DEST
164      DO 102 J=1,NKO
165      102  D(I,NK2)=D(I,NK2)-FLL(NST,J)
166      GO TO 29
167      29  CONTINUE
168      30  CONTINUE
169      DO 40 I=1,NST
170      DO 41 J=1,NKO
171      DO 42 K=1,NKO

```

```

172 42  BMAT(I, J, K)=-FLL(I, J)+SL(I)/FL(I)**2)
173  BMAT(I, J, J)=BMAT(I, J, J)+FL(I)+SL(I))/FL(I)
174  BMAT(I, J, NK1)=0.
175  DO 43 KK=HK1, NK2
176  K=KK-NK1
177 43  BMAT(I, J, KK)=-FVV(I, J)+SV(I)/(FV(I)**2)
178  BMAT(I, J, J+NK1)=BMAT(I, J, J+NK1)+<1.+SV(I)/FV(I)>
179 41  CONTINUE
180  DO 44 JJ=HK1, NK2I
181  J=JJ-NKO
182  DO 45 K=1, NK0
183 45  BMAT(I, JJ, K)=MUC(I)+FV(I)*FLL(I, J)/FL(I)*(DFK(I, J, K)-XFK(I, J)/FL(I)
184  *)
185  BMAT(I, J+NKO, J)=BMAT(I, J+NKO, J)+MUC(I)+FV(I)*XFK(I, J)/FL(I)
186  BMAT(I, JJ, NK1)=MUC(I)+FV(I)*FLL(I, J)+DFK(I, J, NK1)/FL(I)
187  DO 46 KK=NK1I, HK2
188  K=KK-NK1
189  BMAT(I, JJ, KK)=MUC(I)*FLL(I, J)*(XFK(I, J)+DFK(I, J, KK)*FV(I))/FL(I)
190 46  IF(I.EQ.1) BMAT(I, JJ, KK)=BMAT(I, JJ, KK)+<1.-MUC(I)+FVV(I-1, J)/FV(I-
191  *)
192  BMAT(I, J+NKO, J+NK1)=BMAT(I, J+NKO, J+NK1)-1.
193 44  CONTINUE
194  IF(I.EQ.1) GO TO 103
195  IF(I.EQ.NST) GO TO 103
196  DO 47 K=1, NK0
197 47  BMAT(I, NK2, K)=-HL(I)*SL(I)/FL(I)**2)+<1.+SL(I)/FL(I)*HLL(I, K)+HH
198  *E(I)+FL(I)+SL(I)*DEXH(I, K)
199  BMAT(I, NK2, NK1)=CV(I)*<1.+SV(I)/FV(I)+CL(I)*<1.+SL(I)/FL(I)+FLC
200  *I)+SL(I)*DEXH(I, NK1)
201  DO 48 KK=NK1I, NK2
202  K=KK-NK1
203 48  BMAT(I, NK2, KK)=-HV(I)*SV(I)/FV(I)**2)+<1.+SV(I)/FV(I)*HVV(I, K)
204  GO TO 104
205 103  DO 105 K=1, NK2
206 105  BMAT(I, NK2, K)=0.
207  DO 106 K=1, NK0
208 106  BMAT(I, NK2, K)=-1.
209 104  CONTINUE
210 40  CONTINUE
211  DO 74 J=1, HK2
212  DO 74 K=1, NK2
213 74  AMAT(J, K)=0.
214  DO 70 J=1, NK0
215 70  AMAT(J, J+NK1)=-1.
216  AMAT(NK2, NK1)=-CV(1)
217  YX=(1-MUC(2))*FV(2)/FV(1)**2)
218  DO 71 JJ=NK1, NK2I
219  J=JJ-NKO
220  DO 72 KK=NK1I, NK2
221  K=KK-NK1
222 72  AMAT(JJ, KK)=-YX+FVV(1, J)
223 71  AMAT(J+NKO, J+NK1)=AMAT(J+NKO, J+NK1)+YX+FV(1)
224  DO 73 KK=NK1I, NK2
225  K=KK-NK1
226 73  AMAT(NK2, KK)=-HVV(1, K)
227  DO 57 I=1, NST
228  DO 57 J=1, NK2

```



```

229 57 D(I,J)=-D(I,J)
230 DO 50 I=2,NST
231 DO 51 J=1,NK2
232 DO 51 K=1,NK2
233 51 CM(J,K)=BMAT(I-1,K,J)
234 DO 52 K=1,NK2
235 KK=K+NK2
236 DO 59 J=1,NK2
237 59 CM(J,KK)=AMAT(K,J)
238 52 CONTINUE
239 DO 84 J=1,NK2
240 DO 84 K=1,NK2
241 84 AMAT(J,K)=0.
242 IF(I.EQ.NST) GO TO 85
243 DO 80 J=1,NK0
244 80 AMAT(J,J+NK1)=-1.
245 DO 81 JJ=HK1,NK21
246 J=JJ-NK0
247 DO 82 KK=HK11,NK2
248 K=KK-NK1
249 X=(1.-MUC(I+1))*FV(I+1)/(FV(I)+2)
250 82 AMAT(JJ,KK)=-X+FVV(I,J)
251 81 AMAT(J+NK0,J+NK1)=AMAT(J+NK0,J+NK1)+X=FV(I)
252 IF(I.EQ.NST-1) GO TO 85
253 AMAT(HK2,NK1)=-CV(I)
254 DO 83 KK=HK11,NK2
255 K=KK-NK1
256 83 AMAT(HK2,KK)=-HVV(I,K)
257 85 CONTINUE
258 CALL GAUSL(11,22,NK2,NK2,CM)
259 DO 53 J=1,NK2
260 DO 53 K=1,NK2
261 KK=HK2+K
262 CM(K,J)=CM(J,KK)
263 53 CONTINUE
264 DO 54 J=1,NK2
265 DO 54 K=1,NK0
266 IF(I.EQ.2) BMAT(I,J,K)=BMAT(I,J,K)+CM(J,K)
267 IF(I.EQ.2) GO TO 58
268 BMAT(I,J,K)=BMAT(I,J,K)+CM(J,K)+CM(J,NK2)*(HLL(I,K)+HHE(I)+FL(I)+D
269 #EXHC(I,K))
270 58 CONTINUE
271 54 CONTINUE
272 IF(I.EQ.2) GO TO 150
273 DO 55 J=1,NK2
274 55 BMAT(I,J,NK1)=BMAT(I,J,NK1)+CM(J,NK2)*(CL(I)+FL(I)+DEXHC(I,NK1))
275 150 CONTINUE
276 DO 56 J=1,NK2
277 DO 56 K=1,NK2
278 56 D(I,J)=D(I,J)-CM(J,K)*D(I-1,K)
279 50 CONTINUE
280 DO 60 KK=1,NST
281 I=NST+1-KK
282 DO 61 J=1,NK2
283 CM(J,NK2+1)=D(I,J)
284 DO 61 K=1,NK2
285 61 CM(J,K)=BMAT(I,J,K)

```

```

286      IF( I-NST) 62,63,63
287      DO 64 J=1,NK0
18      64      CM(J,NK2+1)=CM(J,NK2+1)+D(I+1,J)
289      IF( I.E0.1) GO TO 63
290      DO 65 J=1,NK0
291      65      CM(NK2,NK2+1)=CM(NK2,NK2+1)+D(I+1,J)+(CLL(I+1,J)+HHE(I+1)+FL(I+1)+
292      *DEXH(I+1,J))
293      CM(NK2,NK2+1)=CM(NK2,NK2+1)+D(I+1,NK1)+(CL(I+1)+FL(I+1)+DEXH(I+1,N
294      *K1))
295      63      CALL GAUSL(11,22,NK2,1,CM)
296      DO 66 J=1,NK2
297      66      D(I,J)=CM(J,NK2+1)
298      DO 67 J=1,NK0
299      DO=1.
300      IF(ABS(D(I,J))-FLMAX(J)) 222,222,223
301      GO=FLMAX(J)/ABS(D(I,J))
302      222      CONTINUE
303      67      FLL(I,J)=FLL(I,J)+GO*D(I,J)
304      GO=1.
305      IF(ABS(D(I,NK1))-TMAX) 233,233,234
306      234      GO=TMAX/ABS(D(I,NK1))
307      233      CONTINUE
308      T(I)=T(I)+D(I,NK1)*GO
309      DO 68 J=NK1+1,NK2
310      J=J-NK1
311      GO=1.
312      IF(ABS(D(I,J))-FVMAX(J)) 243,243,244
313      244      GO=FVMAX(J)/ABS(D(I,J))
314      243      CONTINUE
315      68      FV(I,J)=FV(I,J)+D(I,J)*GO
316      DO 1121 J=1,NK0
317      IF(FLL(I,J)) 121,121,122
318      121      FLL(I,J)=0.0001
319      122      CONTINUE
320      IF(FV(I,J)) 131,131,132
321      131      FV(I,J)=0.0001
322      132      CONTINUE
323      1121      CONTINUE
324      60      CONTINUE
325      DO 90 I=1,NST
326      FL(I)=0.
327      FV(I)=0.
328      DO 90 J=1,NK0
329      FL(I)=FL(I)+FLL(I,J)
330      90      FV(I)=FV(I)+FV(I,J)
331      WRITE(7,21)
332      21      FORMAT(//," ETAPA TEMP. FLUJO TOTAL FLUJO POR COMPONENTE
333      * TODOS SON LIQUIDOS",//)
334      DO 1021 I=1,NST
335      WRITE(7,22) I,T(I),FL(I),(FLL(I,J),J=1,NK0)
336      1021      CONTINUE
337      22      FORMAT(14,F9.2,F12.2,5X,5F12.3)
338      WRITE(7,323)
339      323      FORMAT(//," ETAPA TEMP. FLUJO TOTAL FLUJO POR COMPONENTE
340      * OS SON VAPOR",//)
341      DO 1022 I=1,NST
342      WRITE(7,324) I,T(I),FV(I),(FV(I,J),J=1,NK0)

```

```

343 1022 CONTINUE
344 324 FORMAT(I4,F9.2,F12.2,5X,5F12.3)
345 RES=0.
346 DO 501 I=1,NST
347 DO 501 J=1,NK2
348 501 RES=RES+D(I,J)**2
349 WRITE(7,502) RES
350 502 FORMAT(//, " RESIDUO = ",E12.3)
351 IF(CABS(RES)-.1) 600,600,500
352 600 DO 612 I=1,NST
353 DO 612 J=1,NK
354 PROD(1,I,J)=FLL(I,J)*SL(I)/FL(I)
355 612 PROD(2,I,J)=FVV(I,J)*SV(I)/FV(I)
356 DO 611 J=1,NK0
357 PROD(1,I,J)=FLL(I,J)
358 611 PROD(2,NST,J)=FVV(NST,J)
359 DO 613 K=1,2
360 IF(K.EQ.1) WRITE(7,614)
361 IF(K.EQ.2) WRITE(7,615)
362 614 FORMAT(//, " FLUJO DE PRODUCTO,FASE LIQUIDA",//)
363 615 FORMAT(//, " FLUJO DE PRODUCTO,FASE VAPOR",//)
364 DO 613 I=1,NST
365 613 WRITE(7,605) I,(PROD(K,I,J),J=1,NK0)
366 605 FORMAT(I4,7X,BF10.3)
367 WRITE(7,603)
368 603 FORMAT(////, " PERFIL DEL FACTOR K EN LA COLUMNA ",//)
369 DO 604 I=1,NST
370 604 WRITE(7,605) I,(XFK(I,J),J=1,NK0)
371 DO 720 I=1,NST
372 XT=0.
373 YT=0.
374 DO 721 J=1,NK
375 XT=XT+FLL(I,J)
376 721 YT=YT+FVV(I,J)
377 DO 720 J=1,NK
378 FINN(1,I,J)=FLL(I,J)/XT
379 720 FINN(2,I,J)=FVV(I,J)/YT
380 DO 722 K=1,2
381 IF(K.EQ.1) WRITE(7,723)
382 IF(K.EQ.2) WRITE(7,724)
383 723 FORMAT(//, " PERFIL DE FRACCION MOL EN LA COLUMNA(FASE LIQUIDA)",//)
384 724 FORMAT(//, " PERFIL DE FRACCION MOL EN LA COLUMNA(FASE VAPOR)",//)
385 DO 722 I=1,NST
386 722 WRITE(7,605) I,(FINN(K,I,J),J=1,NK)
387 CALL ENT(NST,T,FLL,FVV,HL,HSV,HL,HSV,CL,CV)
388 QC=HV(NST-1)-HL(NST)-HV(NST)
389 QR=HV(1)+HL(1)-HL(2)
390 WRITE(7,725) QR
391 WRITE(7,726) QC
392 725 FORMAT(//, " EL CALOR A SER ALIMENTADO AL REBOILER ES ",E12.4,"(CAL
393 #/HR)",//)
394 726 FORMAT(//, " EL CALOR A SER REMOVIDO POR EL CONDENSADOR ES ",E12.4,
395 # "(CAL/HR)",//)
396 CONTINUE
397 555 STOP
398 END
399 SUBROUTINE MDUARC(TEMP,X,GAM)

```

```

400      DIMENSION X(5),GAM(5),THETA(5),PHI(5),THS(5),PAR(5,5)
401      COMMON/NAPH/NDIM,NOAC,NOFUG,NOEX,NK,Q(5),R(5),XL(5),PARAM(5,5,2),E
402      #N(5,4),BI1(5,5),BI2(5,5),T1,T2,A,BX,NODIM
403      IF(NOAC.LT.1) GO TO 5
404      THETS=0.
405      PHS=0.
406      XLS=0.
407      DO 6 I=1,NK
408      THETS=THETS+Q(I)*X(I)
409      PHS=PHS+R(I)*X(I)
410      6    XLS=XLS+XL(I)*X(I)
411      DO 7 I=1,NK
412      THETA(I)=Q(I)*X(I)/THETS
413      7    PHI(I)=X(I)*R(I)/PHS
414      DO 8 I=1,NK
415      THS(I)=0.
416      DO 8 J=1,NK
417      PAR(J,I)=PARAM(J,I,1)+TEMP*PARAM(J,I,2)
418      8    THS(I)=THS(I)+THETA(J)*PAR(J,I)
419      DO 10 I=1,NK
420      GA=ALOG(R(I)/PHS)+5.*Q(I)*ALOG(Q(I)/R(I))*PHS/THETS)
421      GA=GA+XL(I)-R(I)/PHS*XLS
422      GB=1.-ALOG(THS(I))
423      DO 11 J=1,NK
424      11  GB=GB-THETA(J)*PAR(I,J)/THS(J)
425      10  GAM(I)=EXP(GA+Q(I)*GB)
426      GO TO 4
427      5    DO 3 J=1,NK
428      28  3    GAM(J)=1.
429      4    CONTINUE
430      RETURN
431      END
432      SUBROUTINE PARIN(NAME)
433      DIMENSION NAME(20)
434      COMMON/NAPH/NDIM,NOAC,NOFUG,NOEX,NK,Q(5),R(5),XL(5),PARAM(5,5,2),E
435      #N(5,4),BI1(5,5),BI2(5,5),T1,T2,A,BX,NODIM
436      READ(5,1)NAME
437      1    FORMAT(20A3)
438      IF(NOAC.LT.1) GO TO 4
439      DO 5 I=1,NK
440      5    READ(5,*) Q(I),R(I),XL(I)
441      DO 10 K=1,2
442      DO 10 I=1,NK
443      10  READ(5,*) (PARAM(I,J,K),J=1,NK)
444      4    CONTINUE
445      IF(NOFG.LT.1) GO TO 6
446      DO 7 I=1,NK
447      READ(5,*) (BI1(I,J),J=1,NK)
448      7    READ(5,*) (BI2(I,J),J=1,NK)
449      READ(5,*) T1,T2
450      6    CONTINUE
451      IF(NODIM.LT.1) GO TO 9
452      READ(5,*) A,BX
453      9    CONTINUE
454      RETURN
455      END
456      SUBROUTINE EXCOR(NST,TEM,FLL,DEX)

```

```

457     DIMENSION FLN(30,5),FLL(30,5),TEM(30),HE(30),HEX(30),TEMK(30),DEX
458     #30,6)
459     COMMON/NAPH/NDIM,NOAC,NOFUG,NOEX,NK,DC(5),R(5),XL(5),PARAM(5,5,2),E
460     #NP(5,4),BI1(5,5),BI2(5,5),T1,T2,A,BX,NODIM
461     NK1=NK+1
462     IF(NDEX.LT.1) GO TO 5
463     CALL EXCES(NST,TEM,FLL,HE)
464     DO 1 J=1,NK
465     DO 2 I=1,NST
466     DO 8 K=1,NK
467     8   FLN(I,K)=FLL(I,K)
468     2   FLN(I,J)=FLL(I,J)+1.
469     CALL EXCES(NST,TEM,FLN,HEX)
470     DO 1 I=1,NST
471     1   DEX(I,J)=HEX(I)-HE(I)
472     DO 3 I=1,NST
473     3   TEMK(I)=TEM(I)+20.
474     CALL EXCES(NST,TEMK,FLL,HEX)
475     DO 4 I=1,NST
476     4   DEX(I,NK+1)=(HEX(I)-HE(I))/20.
477     GO TO 7
478     DO 6 I=1,NST
479     DO 6 J=1,NK1
480     6   DEX(I,J)=0.
481     7   CONTINUE
482     RETURN
483     END
484     SUBROUTINE ENT(NST,T,FLL,FVV,HLL,HVV,HL,HV,CL,CV)
485     DIMENSION T(30),FLL(30,5),FVV(30,5),HLL(30,5),HVV(30,5),HL(30),HV
486     #30),CL(30),CV(30)
487     COMMON/NAPH/NDIM,NOAC,NOFUG,NOEX,NK,DC(5),R(5),XL(5),PARAM(5,5,2),E
488     #NP(5,4),BI1(5,5),BI2(5,5),T1,T2,A,BX,NODIM
489     DO 3 I=1,NST
490     HLC(I)=0.
491     HVC(I)=0.
492     CLC(I)=0.
493     CVI(I)=0.
494     DO 3 J=1,NK
495     HLL(I,J)=ENP(J,1)+ENP(J,2)+T(I)
496     HVV(I,J)=ENP(J,3)+ENP(J,4)+T(I)
497     HLC(I)=HL(I)+HLL(I,J)+FLL(I,J)
498     HVC(I)=HV(I)+HVV(I,J)+FVV(I,J)
499     CLC(I)=CL(I)+ENP(J,2)+FLL(I,J)
500     CVI(I)=CV(I)+ENP(J,4)+FVV(I,J)
501     3   RETURN
502     END
503     SUBROUTINE EXCES(NST,ATE,FLL,HE)
504     DIMENSION TE(30),X(5),THETA(5),HFAC(5),MHFAC(5),HE(30),FLL(30,5),MH
505     #(30),ATE(30)
506     COMMON/NAPH/NDIM,NOAC,NOFUG,NOEX,NK,DC(5),R(5),XL(5),PARAM(5,5,2),E
507     #NP(5,4),BI1(5,5),BI2(5,5),T1,T2,A,BX,NODIM
508     IF(NDEX.LT.1) GO TO 7
509     DO 11 I=1,NST
510     HE(I)=0.
511     11  TE(I)=ATE(I)+273.16
512     DO 10 K=1,NST
513     XT=0.

```

```

514      DO 5 J=1,NK
515      5  XT=XT+FLCK(J)
516      DO 6 J=1,NK
517      6  X(J)=FLCK(J)/XT
518      THETS=0.
519      DO 1 I=1,NK
520      1  THETS=THETS+Q(I)*X(I)
521      DO 2 J=1,NK
522      2  THETA(J)=Q(J)*X(J)/THETS
523      DO 3 I=1,NK
524      HFAC(I)=0.
525      HHFAC(I)=0.
526      DO 3 J=1,NK
527      HFAC(I)=HFAC(I)+THETA(J)*(PARAM(J,I,1)+PARAM(J,I,2)+TE(K))+ALOG(PA
528      *RAM(J,I,1)+PARAM(J,I,2)+TE(K))
529      3  HHFAC(I)=HHFAC(I)+THETA(J)*(PARAM(J,I,1)+PARAM(J,I,2)+TE(K))
530      DO 4 I=1,NK
531      4  HM(I)=Q(I)*X(I)+HFAC(I)/HHFAC(I)
532      DO 12 I=1,NK
533      12 HE(K)=HE(K)-1.9872*TE(K)+HM(I)
534      10 CONTINUE
535      GO TO 9
536      DO 8 I=1,NST
537      8  HE(I)=0.
538      9  CONTINUE
539      RETURN
540      END
541      SUBROUTINE ONEDI(P,ATEM,Y,AKA,ZDI,ZHODI)
542      COMMON/NAPH/NDIM,NOAC,NOFUG,NOEX,NK,Q(5),R(5),XL(5),PARAM(5,5,2),E
543      *NP(5,4),B1(5,5),B2(5,5),T1,T2,A,BX,NODIM
544      IF(Y=0.0001) 1,1,2
545      2  AKA=EXP((2.880814-A+BX/ATEM)*2.302585)
546      AKOR=4.*AKA+P+Y*(2.-Y)
547      ZDI=(SQRT(1.+AKOR)-1.)*2./AKOR
548      ZHODI=2.*(1.-Y+SQRT(1.+AKOR))/(2.-Y)/(1.+SQRT(1.+AKOR))
549      GO TO 3
550      1  ZDI=1.
551      ZHODI=1.
552      3  CONTINUE
553      RETURN
554      END
555      SUBROUTINE FUG(TT,P,Y,FI,PAR)
556      DIMENSION Y(5),FIFAC(5),FIC(5),B(5,5),PAR(5)
557      COMMON/NAPH/NDIM,NOAC,NOFUG,NOEX,NK,Q(5),R(5),XL(5),PARAM(5,5,2),E
558      *NP(5,4),B1(5,5),B2(5,5),T1,T2,A,BX,NODIM
559      IF(NOFGU.LT.1) GO TO 7
560      DO 4 I=1,NK
561      DO 4 J=1,NK
562      4  B(I,J)=B1(I,J)+(B2(I,J)-B1(I,J))/(T2-T1)+(TT-T1)
563      BMIX=0.
564      DO 1 I=1,NK
565      DO 1 J=1,NK
566      1  BMIX=BMIX+Y(I)+Y(J)+B(I,J)
567      DO 2 J=1,NK
568      FIFAC(J)=0.
569      DO 3 J=1,NK
570      DO 3 K=1,NK

```

```

571      3      FIFAC(J)=FIFAC(J)+Y(K)*B(J,K)
572      DO 10 J=1,NK
573      10      FIC(J)=EXP((2.*FIFAC(J)-B(IK))*P/82.05/TT-B(J,J)+PAR(J)+P/82.05/TT)
574      IF(NODIM.LT.1) GO TO 6
575      GO TO 8
576      7      DO 9 J=1,NK
577      9      FIC(J)=1.
578      IF(NODIM.LT.1) GO TO 6
579      8      CONTINUE
580      IF(NODIM.GT.0) CALL ONEDI(P,TT,Y(NDIM),AK,ZDIM,ZMOD)
581      DO 5 J=1,NK
582      5      FIC(J)=FIC(J)+ZMOD
583      FIC(NDIM)=ZDIM
584      6      CONTINUE
585      RETURN
586      END
587      SUBROUTINE KFAC(NST,NKD,T,ANT,P,FLL,FVV,XKF,DFAC)
588      DIMENSION XKF(30,5),DFAC(30,5,1)
589      DIMENSION T(30),ANT(3,5),FLL(30,5),PAR(5),XX(5),GAM(5),GAMX(5)
590      DIMENSION FVV(30,5),YY(5),Y(5),FI(5),FIX(5),FIXX(5)
591      COMMON/HAPH/NDIM,HOAC,HOFUG,NOEX,NK,D(5),R(5),XL(5),PARAM(5,5,2) E
592      *NP(5,4),BI(5,5),BI2(5,5),T1,T2,A,BX,NODIM
593      NK1=NKO+1
594      DO 10 I=1,NST
595      XT=0.
596      YT=0.
597      DO 11 J=1,NKO
598      11      YT=YT+FVV(I,J)
599      XT=XT+FLL(I,J)
600      11      PAR(J)=EXP(ANT(1,J)-ANT(2,J)/(T1)+ANT(3,J))/P
601      DO 12 J=1,NKO
602      12      YY(J)=FVV(I,J)/YT
603      Y(J)=YY(J)
604      XX(J)=FLL(I,J)/XT
605      CALL MQUACT(I)+273.16,XX,GAM)
606      IF(NODIM.GT.0) CALL ONEDI(P,T(1)+273.16,Y(NDIM),AKA,ZDIM,ZMOD)
607      IF(NODIM.GT.0) PAR(NDIM)=(SORT(1.+4.*AKA+PAR(NDIM))*P)-1./2.*AKH*P
608      CALL FUGCT(I)+273.16,P,YY,FI,PAR)
609      DO 13 J=1,NKO
610      13      XKF(I,J)=PAR(J)+GAM(J)/FIC(J)
611      IF(HOAC.LT.1) GO TO 1
612      DO 14 K=1,NK
613      14      DO 15 J=1,NKO
614      15      XX(K)=FLL(I,J)/(XT+1.)
615      XX(K)=(FLL(I,K)+1.)/(XT+1.)
616      CALL MQUACT(I)+273.16,XX,GAMX)
617      DO 14 J=1,NKO
618      14      DFAC(I,J,K)=PAR(J)+GAMX(J)/FIC(J)-XKF(I,J)
619      GO TO 40
620      1      DO 3 J=1,NKD
621      3      DO 3 K=1,NK
622      3      DFAC(I,J,K)=0.
623      40      CONTINUE
624      IF(HOFUG.LT.1) GO TO 41
625      DO 16 F=1,HK
626      16      DO 17 J=1,NK
627      17      YY(J)=FVV(I,J)/(YT+1.)

```

```

629      YY(K)=(FVVC(I,K)+1.)/CYT+1.)
629      CALL FUG(T(I)+273.16,P,YY,FXN,PAR)
        DO 16 J=1,NK
631      16 DFAC(I,J,K+1+NK)=PAR(J)+GAM(J)/FIX(J)-XKF(I,J)
632      GO TO 42
633      41 DO 43 J=1,NKO
634      DO 43 K=1,NKO
635      43 DFAC(I,J,K+NKO+1)=0.
636      42 CONTINUE
637      DO 19 J=1,NKO
638      19 DFAC(I,J,NKO+1)=XKF(I,J)+ANT(2,J)/(T(I)+ANT(3,J))*2
639      IF(NODIM.GT.0) CALL OHEDI(P,T(I)+273.16,Y(NDIM),AKAS,ZDIMH,ZNO)
640      IF(NODIM.GT.0) PAR(NDIM)=EXP(ANT(1,NDIM)-ANT(2,NDIM)/(T(I)+5.+ANT
641      #3,NDIM))
642      IF(NODIM.GT.0) PAR(NDIM)=(SQRT(1.+4.*AKAS*PAR(NDIM))-1.)/2./AKAS/P
643      IF(NODIM.GT.0) CALL FUG(T(I)+273.16,P,Y,FXN,PAR)
644      IF(NODIM.GT.0) DFAC(I,NDIM,NK1)=(PAR(NDIM)+GAM(NDIM)/FIX(NDIM)-XK
645      #F(I,NDIM))/5.
646      10 CONTINUE
647      RETURN
648      END
649      SUBROUTINE GAUSL(ND,NCOL,N,HS,A)
650      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
651      DIMENSION A(ND,NCOL)
652      NI=N+1
653      HT=N+NS
654      IF(H.EQ.1) GO TO 50
655      DO 10 I=2,N
656      IP=I-1
657      II=IP
658      X=DABS(A(II,II))
659      DO 11 J=1,N
660      IF(DABS(A(J,II)).LT.X) GO TO 11
661      X=DABS(A(J,II))
662      IP=J
663      11 CONTINUE
664      IF(IP.EQ.II) GO TO 13
665      DO 12 J=II,NT
666      X=A(II,J)
667      A(II,J)=A(IP,J)
668      A(IP,J)=X
669      12 DO 10 J=I,N
670      X=A(J,II)/A(II,II)
671      DO 10 K=I,NT
672      A(J,K)=A(J,K)-X*A(II,K)
673      10 DO 20 IP=1,N
674      I=NI-IP
675      DO 20 K=NI,HT
676      A(I,K)=A(I,K)/A(I,I)
677      IF(I.EQ.1) GO TO 20
678      II=I-1
679      DO 25 J=1,II
680      25 A(J,K)=A(J,K)-A(I,K)*A(J,I)
681      20 CONTINUE
682      RETURN
683      END

```



#### B.4 DESCRIPCION DE SUBRUTINAS DEL PROGRAMA DE DESTILACION.

A continuación se describen las subrutinas utilizadas en el programa Naphtali-Shaldon.

##### MQUAC.

Calcula los coeficientes de actividad en la fase líquida de acuerdo al modelo UNIQUAC.

##### PARIN.

Sirve para la entrada a las SUBRUTINAS MQUAC, FUG y QNEDI.

##### EXCOR.

Esta SUBRUTINA calcula las derivadas parciales de la entalpia de exceso con respecto al flujo del componente en fase líquida y de la temperatura. Ambas son calculadas numéricamente.

#### ENT.

Esta SUBROUTINA calcula:

- La entalpia del componente puro.
- La entalpia total de una fase.
- Las derivadas parciales de la entalpia total con respecto a la temperatura.

#### EXCES.

Esta SUBROUTINA calcula la entalpia de exceso de una mezcla liquida. La entalpia de una mezcla es definida como la entalpia ideal mas la entalpia de exceso. Los cálculos están basados en los parámetros UNIQUAC (R, Q y L).

#### ONEDI.

Esta subrutina calcula las correcciones de Dimerización (ZDI) en la fase vapor donde no mas de un componente dimeriza. Para el componente dimerizado, el coeficiente de fugacidad es modificado por el factor ZDI. Para los otros componentes el coeficiente de fugacidad es modificado por el factor ZNODI.

#### FUG.

Esta SUBROUTINA calcula los coeficientes de fugacidad en la fase vapor; la dimerización es incluida en el cálculo. Los coeficientes de fugacidad son evaluados por medio de la ecuación virial.

#### KFAC.

La SUBROUTINA KFAC, calcula el factor de separación y las derivadas parciales de éste factor con respecto al flujo del componente en la fase vapor y en la fase líquida, así como con respecto a la temperatura. Excepto para la temperatura, todas las derivadas son calculadas numéricamente.

En el cálculo de las derivadas, se supone que la dependencia de la temperatura con la actividad (fase líquida) y la fugacidad (fase vapor), puede ser despreciada, excepto en el caso de dimerización, donde la derivada de la fugacidad en la fase vapor con respecto a la temperatura es calculada numéricamente.

#### GAUSL.

La SUBROUTINA GAUSL resuelve N ecuaciones algebraicas lineales por eliminación de GAUSS con pivoteo.

**APENDICE C**

**PROGRAMA PUNIQUEAC  
CALCULO DE PARAMETROS UNIQUEAC**

**PROGRAMA COEFVIR  
CALCULO DE SEGUNDOS  
COEFICIENTES VIRIALES**

## APENDICE C.

El apéndice C describe los programas principales y las subrutinas utilizadas para el Cálculo de los Parámetros UNIQAC (PUNIQAC) y para el Cálculo de los Segundos Coeficientes Viriales, y se encuentran ordenados de la siguiente manera:

- c.1 Descripción del Programa PUNIQAC y COEFVIR.
- c.2 Listado del Programa PUNIQAC y subrutinas.
- c.3 Listado del Programa COEFVIR y subrutinas.

c.1 DESCRIPCION DEL PROGRAMA PUNIQAC (Parámetros UNIQAC) Y  
COEFVIR (Segundos Coeficientes Viriales).

Descripción de subrutinas utilizadas en PUNIQAC (Cálculo de Parámetros UNIQAC ) y COEFVIR (Cálculo de Coeficientes Viriales).

SVIR.

Calcula el segundo coeficiente virial para componentes puros y mezclas binarias.

PHIB.

Calcula el Coeficiente de Fugacidad para componentes puros y binarios.

YENWO.

Calcula los volúmenes molares de líquidos saturados.

**GAUSL.**

Resuelve un conjunto de N ecuaciones lineales.

**MLMEN.**

Calcula los términos polinomiales de Legendre.

**BIJ.**

Programa principal para el calculo de segundos coeficientes viriales (mezclas multicomponentes).

**DNIFA.**

Calcula el coeficiente de actividad para determinada temperatura y composición.

**GCOMB.**

Calcula el coeficiente de actividad combinatorial de acuerdo a la ecuación ( 4.5 ).

**GRES.**

Calcula el coeficiente de actividad residual de acuerdo a la ecuación ( 4.2 ).

**SYSTEM.**

Esta subrutina es utilizada para extraer de las tablas ( 4.1 ) y ( 4.2 ) los parámetros necesarios para resolver un problema dado.

**HCON.**

Contiene un procedimiento de prueba y error para calcular los parámetros UNIQAC a partir de los coeficientes de actividad a dilución infinita predichos por el método UNIFAC.

**GREE.**

Calcula el Coeficiente de Actividad Residual de referencia.



## C.2 LISTADO DEL PROGRAMA PUNIQUEAC Y SUBROUTINAS.

D) HEL

```

1  #CONTROL USLINIT,FILE#05,FILE#07
2  PROGRAM PAUNIO
3  C  PARAMETROS UNIQUEAC A PARTIR DE UNIFAC
4  DIMENSION PAPA(8,8),PARB(8,8),HENRY(5,5),TEMP(3)
5  DIMENSION ITAB(5,56),NTEXT(40),CC(5,5),DD(5,5,2),GAMC(5,5)
6  COMMON HY(5,8),R(8),Q(8),RS(5),QS(5),XL(5),NR
7  CHARACTER*72 NTEXT
8  86  FORMAT(2(140))
9  87  FORMAT(//)
10  88  FORMAT(2(A40))
11  NR=0
12  NT=56
13  READ(5,* ) NTEXT
14  READ(5,* ) TEMP(1),TEMP(2)
15  READ(5,* ) NK,NG,NMOD
16  DO 22 I=1,NK
17  22  READ(5,86 ) (ITAB(I,J),J=1,NT)
18  CALL SYSTH(PARA,NK,NG,ITAB)
19  DO 30 KK=1,2
20  TT=TEMP(KK)
21  CALL HCON(PARA,PAPB,TT,HENRY,GAMC,NK,NG)
22  WRITE(7,87)
23  WRITE(7,88) NTEXT
24  WRITE(7,12) TT
25  12  FORMAT(//, " ***** T = ",F10.2," K",//)
26  WRITE(7,13)
27  13  FORMAT(" COEFICIENTES DE ACTIVIDAD A DILUCION INFINITA//")
28  DO 1 I=1,NK
29  DO 1 J=1,NK
30  1  HENRY(I,J)=HENRY(I,J)+GAMC(I,J)
31  DO 10 I=1,NK
32  10  WRITE (7,3) I,(HENRY(I,J),J=1,NK)
33  3  FORMAT(" COMPONENTE",I2," ES SOLVENTE",SE12.4)
34  IF(NMOD.NE.1) GO TO 2
35  WRITE(7,23)
36  23  FORMAT(//, " LAMBDA(I,J) = (C(J)/V(I))*EXP(-DELTA(LAMBDA)/RT)",//)
37  DO 4 I=1,NK
38  XL(I)=0.
39  RS(I)=1.
40  4  QS(I)=1.
41  GO TO 21
42  2  WRITE(7,15)
43  15  FORMAT(//, " TAU(J,I)=EXP(-DELTA(U)/RT) ",//)
44  DO 5 I=1,NK
45  DO 5 J=1,NK
46  5  HENRY(I,J)=HENRY(I,J)/GAMC(I,J)
47  21  NK1=NK-1
48  DO 30 I=1,NK1
49  I1=I+1
50  DO 30 J=I1,NK
51  B1=1.-ALOG(HENRY(I,J))/QS(J)
52  B2=1.-ALOG(HENRY(I,I))/QS(I)
53  A=.001
54  IF(ABS(B1+B2-2.)*-1.E-5)201.202.202
55  201  A=1.
56  GO TO 36
57  202  IF(A=1.)35.35.203

```

```

58 203 IF(B2-1.)35,35,204
59 204 IF(EXP(B2-1.)>.LT.B1) A=EXP(B1)
  35 S=EXP(B2-A)
61 F=ALOG(A)+S-B1
62 DF=S-1./A
63 DA=F/DF
64 A=A+DA
65 IF(ABS(DA)-1.E-4) 36,36,35
66 36 CC(I,J)=A
67 30 CC(J,I)=B1-ALOG(A)
68 DO 60 I=1,NK
69 CC(I,I)=1.
70 60 WRITE(7,85) (CC(I,J),J=1,NK)
71 85 FORMAT(5E15.7)
72 DO 70 I=1,NK
73 DO 70 J=1,NK
74 70 DD(I,J,KK)=CC(I,J)
75 50 CONTINUE
76 DO 80 I=1,NK
77 DO 80 J=1,NK
78 ALF=(DD(I,J,2)-DD(I,J,1))/(TEMP(2)-TEMP(1))
79 DD(I,J,1)=DD(I,J,1)-TEMP(1)*ALF
80 80 DD(I,J,2)=ALF
81 WRITE(7,14)
82 14 FORMAT(//," LA SALIDA CONSISTE DE ")
83 WRITE(7,16)
84 16 FORMAT(" NUMERO DE COMPONENTES ,Q,R,Y L PARA CADA COMPONENTE(U
  35 *NICAMENTE UNIUQAC) ")
86 WRITE(7,17)
87 17 FORMAT(" COMPONENTE NUMERO,KK,TEMP1,TEMP2,Y A(I,J) O B(I,J),J=
88 *1,2,...,N")
89 WRITE(7,18)
90 18 FORMAT(" ES A(I,J) SI KK=1, Y ES B(I,J) SI KK=2,TAU=A+B+T")
91 IF(NMOD(EQ,1) GO TO 97
92 WRITE(7,19)
93 19 FORMAT(," COMP Q R L "/)
94 DO 95 I=1,NK
95 WRITE(7,91) I, QS(I), RS(I), XL(I)
96 WRITE(7,91) I, QS(I), RS(I), XL(I)
97 95 CONTINUE
98 97 WRITE(7,20)
99 20 FORMAT(," I KK TEMP1 TEMP2 A(I,J) OR B(I,J) -----"/)
100 91 FORMAT(15,3F15.5)
101 DO 96 KK=1,2
102 DO 96 I=1,NK
103 WRITE(7,92) I, KK, TEMP(1), TEMP(2), (DD(I,J,KK), J=1, NK)
104 WRITE(7,92) I, KK, TEMP(1), TEMP(2), (DD(I,J,KK), J=1, NK)
105 92 FORHAT(2I2,2F0.1,5E12.5)
106 96 CONTINUE
107 STOP
108 END
109 SUBROUTINE HCON(PARA,PARB,T,HENRY,GAMC,NK,NG)
110 DIMENSION PARA(8,8),PARB(8,8),HENRY(5,5),X(5),GAM(5),GAMX(5)
  1 DIMENSION GAMC(5,5),CGAM(5)
  12 DO 10 I=1,NG
  13 DO 10 J=1,NG
114 10 PARB(I,J)=EXP(-PARA(I,J)/T)

```

```

115      DO 20 I=1,NK
116      DO 21 J=1,NK
117      .7      21      XC(J)=0.
118      XC(I)=1.
119      CALL GCOMB(X,CGAM,NK,NG)
120      CALL GRES(PARB,X,GAMX,NK,NG)
121      GAM(I)=GAMX(I)
122      DO 20 J=1,NK
123      GAMC(I,J)=CGAM(J)
124      20      HENRY(I,J)=GAMX(J)
125      DO 25 I=1,NK
126      DO 25 J=1,NK
127      25      HENRY(I,J)=HENRY(I,J)/GAM(J)
128      RETURN
129      END
130      SUBROUTINE GCOMB(X,GAMMA,NK,NG)
131      DIMENSION X(5),GAMMA(5)
132      COMMON NY(5,B),P(8),Q(8),RS(5),QS(5),XL(5),NR
133      QSS=0.
134      RSS=0.
135      XLS=0.
136      DO 10 I=1,NK
137      QSS=QSS+QS(I)+X(I)
138      RSS=RSS+RS(I)+X(I)
139      10      XLS=XLS+XL(I)+X(I)
140      DO 20 I=1,NK
141      A=5.*QS(I)+ALOG(QS(I)/QSS+RSS/RS(I))+XL(I)-RS(I)/RSS+XLS
142      20      GAMMA(I)=RS(I)/RSS*EXP(A)
143      RETURN
144      END
145      SUBROUTINE GRES(P,X,GAM,NK,NG)
146      DIMENSION P(8,B),GAM(5),S1(8),XG(8),S4(8),TH(8),GAML(8),X(5)
147      COMMON NY(5,B),P(8),Q(8),RS(5),QS(5),XL(5),NR
148      S3=0.
149      S2=0.
150      DO 10 K=1,NG
151      S1(K)=0.
152      DO 11 I=1,NK
153      11      S1(K)=S1(K)+NY(I,K)*X(I)
154      10      S2=S2+S1(K)
155      DO 13 K=1,NG
156      XG(K)=S1(K)/S2
157      13      S3=S3+Q(K)*XG(K)
158      DO 15 K=1,NG
159      S4(K)=0.
160      15      TH(K)=Q(K)*XG(K)/S3
161      DO 16 K=1,NG
162      DO 16 I=1,NG
163      16      S4(K)=TH(I)+P(I,K)+S4(K)
164      DO 20 I=1,NG
165      G=1.-ALOG(S4(K))
166      DO 21 I=1,NG
167      21      G=G-TH(I)+P(K,I)/S4(I)
168      20      GAML(K)=Q(K)*G
169      DO 30 I=1,NK
170      G=0.
171      DO 31 J=1,NG

```

```

172 31 G=NY(I,J)*GAML(J)+G
173 30 GAM(I)=EXP(G)
174 RETURN
175 END
176 SUBROUTINE SYSTM(PARA,HK,NG,ITAB)
177 DIMENSION ARR(25,25)
178 DIMENSION ITAB(5,56),RR(56),O(56),PARA(8,8),KTAB(8),NKTAB(56)
179 DIMENSION AA1(25),AA2(25),AA3(25),AA4(25),AA5(25),AA6(25),AA7(25)
180 *,AA8(25),AA9(25),AA10(25),AA11(25),AA12(25),AA13(25),AA14(25),AA
181 *A15(25),AA16(25),AA17(25),AA18(25),AA19(25),AA20(25),AA21(25),AA
182 *22(25),AA23(25),AA24(25),AA25(25)
183 COMMON NY(5,8),R(8),O(8),RS(5),OS(5),XL(5),NR
184 DATA HKTAB/4*1.4+2.2+3.3+4.5+5.6+7.6+2*9.10,2*11.4+12.3+13.3+14.15
185 *2*16.2+17.3+18.3+19.2+20.21,22.3+23.24,25/
186 *1.9011,6744,4469,2195,1.3454,1.1167,8986,1.1173,5313
187 *,3652,1.2663,1.0396,8121,1.8780,1.6513,2.1055,1.6513,1.4311,92,
188 *,8952,1.6724,1.4457,998,1.9031,1.6764,1.1450,9183,6908,9183,1.
189 *5959,1.3692,1.1417,1.4337,1.2070,9795,1.0600,1.8701,1.6434,1.3013
190 *1.528,1.4654,1.2380,791,2.2564,2.0606,1.8016,2.8700,2.6401,3.390
191 *1.1562,2.0086,1.7818,1.5544,1.4199,2.057/
192 DATA O0/848,540,228,000,1.176,867,676,988,400,120,969,6
193 *6,348,1.664,1.66,1.352,1.972,1.352,1.432,1.4,68,1.488,1.18,948
194 *1.728,1.420,1.088,780,468,1.100,1.544,1.236,924,1.244,936,624
195 *816,1.724,1.416,1.224,1.532,1.264,1.952,0.724,1.989,1.684,1.448,2
196 *410,2.184,2.91,844,1.868,1.56,1.248,1.104,1.65/
197 DATA AA1/0,200,0,61,1300,76,500,737,50,697,20,1318
198 *0,2789,0,476,40,677,0,232,10,251,50,391,50,255,70,1245,0,612,0,0
199 *663,50,35,930,53,760,24,900,104,30,321,50,661,50,543,0,114,10/
200 DATA AA2/2520,0,0,340,70,4102,0,535,20,1509,0,599,6
201 *0,000,00,524,50,000,00,000,00,289,30,396,00,277,60,000,00,370,90,7
202 *30,40,99,610,337,10,4583,00,5831,0,000,00,542,10,2*000,00/
203 DATA AA3/-11,12,-94,78,0,167,00,477,00,637,40,903,8
204 *0,1397,0,25,770,000,00,5,9940,32,140,161,70,122,80,668,20,212,50,5
205 *37,40,-18,81,000,00,-231,9,3,000,00,538,20,168,10,194,9,97,53/
206 DATA AA4/-69,70,-269,7,-146,8,0,469,00,603,30,5695,0
207 *00,726,30,-52,10,000,00,5688,0,213,10,000,00,-49,29,612,50,6096,0,
208 *603,80,-114,1,000,00,-12,14,-141,3,000,00,3629,0,000,00,000,0/
209 DATA AA5/-87,93,121,50,-64,13,-99,38,0,127,40,285,4
210 *0,257,30,48,160,000,00,76,200,70,000,110,80,188,30,412,00,000,00,7
211 *7,610,-38,23,-185,9,-170,9,-98,66,290,00,000,00,000,00,73,520/
212 DATA AA6/16,510,-52,39,-50,00,-44,50,-80,78,0,-181,1
213 *0,000,00,23,390,000,00,-10,72,-180,6,359,30,266,0,000,00,45,540,00
214 *0,0,-38,32,-102,5,-139,4,-67,80,000,00,75,140,000,00,-31,09/
215 DATA AA7/580,60,511,70,362,30,377,60,-148,5,289,60,0
216 *00,00,442,00,-280,8,649,1,-455,4,-400,6,357,50,287,00,213,00,112,6
217 *0,225,40,325,40,370,40,353,70,497,50,678,20,-19,44,399,50,887,10/
218 DATA AA8/311,00,000,00,2043,0,6245,0,-455,4,000,00,-
219 *540,6,0,000,00,000,00,-713,2,9*000,00,4894,0,4*000,00/
220 DATA AA9/26,760,-82,92,140,10,365,80,129,20,109,70,6
221 *05,60,000,00,0,-37,36,-213,7,5,202,00,00,000,00,000,00,428,50,6
222 *69,40,-191,7,-284,0,-354,6,-39,20,000,00,137,50,000,00,162,3/
223 DATA AA10/505,70,000,00,000,00,000,00,000,00,000,00,000,00,000,00,
224 *-155,7,000,00,128,00,0,15*000,00/
225 DATA AA11/114,80,000,00,85,840,-170,0,109,90,249,60,
226 *1135,0,853,60,372,20,000,00,0,-235,7,000,00,-73,50,000,00,533,60,
227 *660,20,000,00,108,90,-209,7,54,470,3*000,00,162,7/
228 DATA AA12/83,360,76,440,52,130,65,620,42,000,339,70,

```

```

229      *634.20,000.00,52.380,000.00,461.30,0.,000.00,141.70,020.00,000.00
230      *664.60,301.10,137.80,-154.3,000.00,000.00,95.180,000.00,151.1
231      DATA      AA13/-30.48,79.400,-44.85,000.00,-217.2,-481.7,
232      *+507.1,5*000.00,0.,63.720,7*000.00,68.810,3*0.00/
233      DATA      AA14/65.330,-41.32,-22.31,223.00,-243.3,-500.4,
234      *+547.7,000.00,000.00,000.00,136.00,-49.30,108.80,0.,6*000.00,71.23
235      *0.4350,0.3*0.00/
236      DATA      AA15/5339.0,000.00,650.40,3399.0,-245.0,000.00,
237      *+339.5,7*000.00,0.,5*000.00,8455.0,2*000.00,-62.73,000.00/
238      DATA      AA16/35.760,26.090,-22.97,-138.4,000.00,168.90,
239      *+242.80,000.00,-275.1,000.00,-297.3,4*000.00,0.,3*000.00,-15.62,-54
240      *+.86,4*000.00/
241      DATA      AA17/315.30,349.20,62.320,268.20,-17.59,000.00,
242      *+292.0,000.00,-297.8,000.00,-256.3,-338.5,4*000.00,0.,44.420,-167
243      *+4.000.00,217.70,000.00,3*0.00/
244      DATA      AA18/91.460,-24.36,4.6800,122.90,369.60,529.00,
245      *+698.20,000.00,286.30,000.00,000.00,225.40,4*000.00,326.40,0.,108.3
246      *0.249.20,62.420,4*000.00/
247      DATA      AA19/34.010,-52.71,000.00,000.00,601.60,669.90,
248      *+709.70,000.00,423.20,000.00,-132.9,-197.7,000.00,000.00,000.00,000
249      *+.00,1821.0,-84.53,0.,000.00,56.330,4*000.00/
250      DATA      AA20/36.700,-185.1,288.50,33.610,491.10,649.10,
251      *+926.80,000.00,552.10,000.00,176.50,-20.93,000.00,000.00,000.00,74.
252      *+040,000.00,-157.1,000.00,0.,-30.100,3*000.00,256.5/
253      DATA      AA21/-78.45,-293.7,-4.700,124.76,570.70,260.10,
254      *+1201.0,1616.0,372.00,000.00,129.50,000.00,000.00,91.130,1302.0,482
255      *+.00,689.00,11.800,17.970,51.900,0.,475.80,490.9,534.7,132.2/
256      DATA      AA22/-141.3,000.00,-237.7,0.,134.1,0.,920.4,5*0
257      *+.00,203.50,-108.40,6*000.00,-225.4,0.,-154.5,2*0.00/
258      DATA      AA23/-32.69,-49.92,10.380,-97.05,000.00,252.60
259      *+614.20,000.00,-142.6,000.00,000.00,-94.49,8*000.00,-34.65,794.4,0.
260      *+.2*0.0/
261      DATA      AA24/5541.0,000.00,1825.0,3*000.00,360.7,7*000.
262      *+00,5250.0,5*000.00,514.6,4*000.00/
263      DATA      AA25/11.460,000.00,-18.99,000.00,442.80,914.20,
264      *+1091.0,000.00,298.70,000.00,233.70,79.790,7*000.00,-125.8,-60.71,4
265      *+000.00/
266      DO 99 J=1,25
267      ARR(1,J)=AA1(J)
268      ARR(2,J)=AA2(J)
269      ARR(3,J)=AA3(J)
270      ARR(4,J)=AA4(J)
271      ARR(5,J)=AA5(J)
272      ARR(6,J)=AA6(J)
273      ARR(7,J)=AA7(J)
274      ARR(8,J)=AA8(J)
275      ARR(9,J)=AA9(J)
276      ARR(10,J)=AA10(J)
277      ARR(11,J)=AA11(J)
278      ARR(12,J)=AA12(J)
279      ARR(13,J)=AA13(J)
280      ARR(14,J)=AA14(J)
281      ARR(15,J)=AA15(J)
282      ARR(16,J)=AA16(J)
283      ARR(17,J)=AA17(J)
284      ARR(18,J)=AA18(J)
285      ARR(19,J)=AA19(J)

```

```

286      ARR(20,J)=AA20(J)
287      ARR(21,J)=AA21(J)
288      ARR(22,J)=AA22(J)
289      ARR(23,J)=AA23(J)
290      ARR(24,J)=AA24(J)
291      ARR(25,J)=AA25(J)
292  99  CONTINUE
293      NT=56
294      NM=25
295      M=0
296      DO 15 J=1,NT
297          JJ=0
298          DO 16 I=1,NK
299              JJ=JJ+ITAB(I,J)
300              IF (JJ) 15,15,17
301          17  M=M+1
302              KTAB(M)=J
303          15  CONTINUE
304              NG=M
305              DO 20 J=1,NG
306                  JJ=KTAB(J)
307                  R(J)=RR(JJ)
308                  Q(J)=QQ(JJ)
309                  DO 20 I=1,NK
310                      20  HY(I,J)=ITAB(I,JJ)
311                      DO 30 I=1,NH
312                          DO 35 J=1,NG
313                              J1=KTAB(J)
314                              JI=NKTAB(J1)
315                              IF (JI-I) 35,36,35
316                          36  DO 37 L=1,NG
317                              L1=KTAB(L)
318                              LI=NKTAB(L1)
319                              PARA(J,L)=ARR(I,L1)
320                          35  CONTINUE
321                      30  CONTINUE
322                          DO 40 I=1,NK
323                              RS(I)=0.
324                              QS(I)=0.
325                              DO 41 J=1,NG
326                                  RS(I)=RS(I)+HY(I,J)*R(JJ)
327                                  QS(I)=QS(I)+NY(I,J)*Q(JJ)
328                              40  XL(I)=5.*(RS(I)-QS(I))-RS(I)+1.
329                                  IF (NR) 34,34,39
330                              34  WRITE(6,80)
331                              80  FORMAT (//, ' GROUP CONSTANTS AND INTERACTION PARAMETERS (R,Q, AND
332                                  *ND A(I,J)) '//)
333                                  DO 81 I=1,NG
334                                      81  WRITE (6,82) R(I),Q(I),(PARA(I,J),J=1,NG)
335                                  82  FORMAT (2F10.4,8F10.2)
336                                  WRITE (6,83)
337                                  63  FORMAT (//,/, 3X, 'MOLECULAR FUNCTIONAL GROUPS'//)
338                                  DO 84 I=1,NK
339                                      84  WRITE (6,85) I,(NY(I,J),J=1,NG)
340                                  85  FORMAT (2I5,10I3)
341                                  39  CONTINUE
342                                  RETURN

```

343

END

```

1  #CONTROL USLINIT,FILE=05,FILE=07
1.1 C  PROGRAMA PARA CALC. SEGUNDOS COEF. VIRIALES
1.2  PROGRAM CSCV
2    DIMENSION NHC(10),PPC(10),RRD(10),DDMU(10),EETA(10),TTC(10),ETH(10
3    #,10),B(10,10),TC(10),NTEXT(40),BB(3),BF(3),ZZC(10)
4    COMMON/VIRDAT/NHC(2),PC(2),RD(2),DMUC(2),ETA(3),TC(2),ZC(2)
5    WRITE(7,21)
6    21  FORMAT(1H1,"  CALCULO DEL COEF. VIRIAL B(I,J)  "/)
7    DO 1 I=1,5
8    READ(5,20)NTEXT
9    20  FORMAT(40A2)
10   WRITE(7,20)NTEXT
11   CONTINUE
12   READ(5,* )NH,NT
13   DO 17 I=1,NH
14   17  READ(5,* )NHC(I),PPC(I),TTC(I),RRD(I),DDMU(I),EETA(I),ZZC(I)
15   WRITE(7,24)
16   24  FORMAT(/1H0," COMPONENTE PC EN ATM RD EN A DMU EN DEB.  ETA  T
17   #C  EN K")
18   WRITE(7,25)(NHC(I),PPC(I),RRD(I),DDMU(I),EETA(I),TTC(I),I=1,NH)
19   25  FORMAT(5X,I2,3X,5F10.3)
20   IN=NH-1
21   DO 2 I=1,IN
22   2  I=I+1
23   2  READ(5,* )(ETH(I,J),J=1,IN)
24   WRITE(7,27)
25   27  FORMAT(/1H0,"  PARAMETROS DE SOLVATACION")
26   IN=NH-1
27   DO 11 I=1,IN
28   11  I=I+1
29   DO 12 J=1,IN
30   12  ETH(I,J)=ETH(I,J)
31   DO 13 I=1,IN
32   13  ETH(I,1)=EETA(I)
33   WRITE(7,28)(NHC(I),I=1,IN)
34   28  FORMAT(10X,I2,9(8X,I2))
35   DO 14 I=1,IN
36   14  WRITE(7,29)NHC(I),(ETH(I,J),J=1,IN)
37   29  FORMAT(2X,I2,10F10.3)
38   READ(5,* )(T(I),I=1,NT)
39   N=2
40   WRITE(7,40)
41   40  FORMAT(/1H0," COEFICIENTES VIRIALES")
42   DO 650 KK=1,NT
43   TEMP=T(KK)
44   WRITE(7,41) TEMP
45   41  FORMAT(/10X,"TEMPERATURA= ",F10.3)
46   IN=NH-1
47   DO 32 I=1,IN
48   32  I=I+1
49   DO 32 J=1,IN
50   32  J=1,IN
51   K=1
52   M=1
53   33  NHC(K)=NHC(M)
54   PPC(K)=PPC(M)
55   RRD(K)=RRD(M)
56   DDMU(K)=DDMU(M)

```



```

59      ETAK(N)=EETA(N)
60      TC(K)=TTC(N)
61      ZC(K)=ZCC(N)
62      IF(K.EQ.2) GO TO 34
63      K=2
64      M=J
65      GO TO 33
66 34     ETAK(3)=ETM(I,J)
67      CALL SVIR(N,TEMP,BF,BB)
68      B(I,1)=BB(1)
69      B(J,1)=BB(2)
70      B(I,J)=BB(3)
71 32     B(J,1)=B(I,J)
72      WRITE(7,28) (NHCC(I),I=1,NN)
73      DO 19 I=1,NN
74 19     WRITE(7,29)NHCC(I),B(I,J),J=1,NN)
75 650    CONTINUE
76      STOP
77      END
78      SUBROUTINE SVIR(N,TEMP,BF,BB)
79      DIMENSION BF(3),BB(3),W(3),EPSI(3),SIGM3(3),RDMU(3),RDMH(3),A(3),D
80      *ELH(3),D(3),B(3)
81      COMMON/VIRDAT/NCC(2),PC(2),RD(2),DMU(2),ETA(3),TC(2),ZC(2)
82      DO 101 I=1,N
83      W(I)=0.006+RD(I)+0.02087*RD(I)**2-0.00136*RD(I)**3
84      EPSI(I)=TC(I)+0.748+0.91*W(I)-0.4*ETA(I)/(2.+20.*W(I))
85      SIGM3(I)=(2.44-W(I))**3+TC(I)/PC(I)
86      IF(DMU(I)-1.45) 101,101,103
87 103     PH=16.+400.*W(I)
88      C=2.982-1.882*W(I)/(0.03+W(I))
89      XI=DMU(I)**4/(C+EPSI(I))*(SIGM3(I)**2)+TC(I)*5.723E-8)
90      PPH=PH/(PH-6.)
91      EPSI(I)=EPSI(I)+(1.-XI)*PPH+PPH*(PPH+1.)*(XI**2)/2.)
92      SIGM3(I)=SIGM3(I)+(1.+3.*XI)/(PH-6.)
93 101     RDMU(I)=(DMU(I)**2)*7243.8/(EPSI(I)*SIGM3(I))
94      IF(N=1) 300,300,400
95 300     J=1
96      GO TO 301
97 400     J=3
98      GO TO 401
99 401     EPSI(3)=0.7*SQRT(EPSI(1)*EPSI(2))+0.60/(1./EPSI(1)+1./EPSI(2))
100      SIGM3(3)=SQRT(SIGM3(1)*SIGM3(2))
101      W(3)=0.5*(W(1)+W(2))
102      IF(DMU(1)+DMU(2))500,501,500
103      IF(DMU(1)+DMU(2)-2.)500,500,19
104 19     XI38=(DMU(1)**2*(EPSI(2)**2+SIGM3(2)))+(1./3.)*SIGM3(2)+DMU(2)**2*
105      *(EPSI(1)**2+SIGM3(1))+(1./3.)*SIGM3(1))/(EPSI(3)*SIGM3(3)**2)
106      PH=16.+400.*W(3)
107      EPSI(3)=EPSI(3)+(1.+XI38*PH/(PH-6.))
108      SIGM3(3)=SIGM3(3)+(1.-3.*XI38)/(PH-6.))
109 500     RDMU(3)=7243.8*DMU(1)*DMU(2)/(EPSI(3)*SIGM3(3))
110      DO 600 I=1,J
111      IF(RDMU(I)-0.04)14,15,15
112 14     RDMH(I)=RDMU(I)
113      GO TO 600
114 15     IF(RDMU(I)-0.25)16,17,17
115 16     RDMH(I)=0.

```

```

116          GO TO 600
117      17   RDHM(I)=PDMU(I)-0.25
118          CONTINUE
119      600   DO 609 I=1,J
120          B0(I)=1.2618*SIGM3(I)
121          A(I)=-0.3-0.05*RDHM(I)
122          DELH(I)=1.99+0.2*RDHM(I)**2
123          IF(ETA(I)-4.)604,604,605
124      604   D(I)=650./<EPSI(I)+300.)
125          GO TO 609
126      605   D(I)=42800./<EPSI(I)+22400.)
127      609   CONTINUE
128          DO 651 I=1,J
129          TSTR=EPSI(I)/TEMP-1.6*W(I)
130          BFN=0.94-1.47*TSTR-0.85*TSTR**2+1.015*TSTR**3
131          BFP=(0.75-3.*TSTR+2.1*TSTR**2+2.1*TSTR**3)*PDMH(I)
132          BF(I)=(BFN-BFP)*B0(I)
133          BB(I)=BF(I)+B0(I)+A(I)*EXP(DELH(I)*EPSI(I)/TEMP)
134          IF(ETA(I))651,651,653
135      653   BCHEM=B0(I)*EXP(ETA(I)*(D(I)-4.27))*(1.-EXP(1500.*ETA(I)/TEMP))
136          BB(I)=BB(I)+BCHEM
137      651   CONTINUE
138          RETURN
139      END

```

## APENDICE D.

En este apéndice se listan los resultados obtenidos de las corridas computacionales de los dos ejemplos de aplicación descritos en el Capítulo VI, asimismo, las corridas para calcular los parámetros UNIQAC y los Segundos Coeficientes Viriales. El orden que corresponde es el siguiente:

D.1 Resultados de la Corridas Computacionales para el Diseño de las Columnas de Destilación de los ejemplos de aplicación.

D.2 Resultados de la Corridas Computacionales para Calcular los Parámetros UNIQAC.

D.3 Resultados de la Corridas Computacionales para el Cálculo de los Segundos Coeficientes Viriales.

**APENDICE D**

**LISTADO DE RESULTADOS**

TAJLA D.1

MUESTRA DE SALIDA PARA EL CALCULO DE PARAMETROS UNIQAC

CONSTANTES DE GRUPOS Y PARAMETROS DE INTERACCION (R, Q Y A(I,J))

0.9011	0.8480	0.0000	61.1300	76.5000	737.5000	476.4000	35.9300
0.5313	0.4000	-11.1200	0.0000	107.0000	477.0000	25.7700	-16.9100
1.2953	0.9680	-69.7000	-146.8000	0.0000	469.0000	52.1000	114.1000
1.8708	1.6040	-87.9300	-64.1300	-99.3800	0.0000	49.1600	30.2300
1.6724	1.4880	26.7600	140.1000	365.8000	129.2000	0.0000	191.7800
1.4654	1.2640	91.4600	4.6800	152.9000	383.6000	186.3000	0.0000

GRUPOS MOLECULARES FUNCIONALES

1	0	0	0	0	0	2
2	1	0	0	1	0	0
3	0	5	1	0	0	0
4	1	0	0	0	1	0

S I S T E M A:

1,2 DICHLOROETANO (1) N-PROPANOL (2) TOLUENO (3) ACETONA (4)

\*\*\*\* T = 340.0 K

COEFICIENTES DE ACTIVIDAD A DILUCION INFINITA

COMP. 1 ES SOLVENTE	0.1000E 01	0.4443E 01	0.9949E 00	0.9309E 00
COMP. 2 ES SOLVENTE	0.2932E 01	0.1000E 01	0.3554E 01	0.1833E 01
COMP. 3 ES SOLVENTE	0.9935E 00	0.4597E 01	0.1000E 01	0.1411E 01
COMP. 4 ES SOLVENTE	0.9155E 00	0.2112E 01	0.1825E 01	0.1000E 01

TAU(J,I) = EXP (-DELTA(U)/RT)

0.1000000E 01	0.5244893E 00	0.1528933E 01	0.5625155E 00
0.1056402E 01	0.1000000E 01	0.1198831E 01	0.9212975E 00
0.0062148E 00	0.4592944E 00	0.1000000E 01	0.1276591E 01
0.1608894E 01	0.7481847E 00	0.6532245E 00	0.1000000E 01

1,2 DICHLOROETANO (1) N-PROPANOL (2) TOLUENO (3) ACETONA (4)

\*\*\*\*\* T = 360.0 K

COEFICIENTES DE ACTIVIDAD A DILUCION INFINITA

COMP. 1 ES SOLVENTE	0.1000E 01	0.4000E 01	0.9900E 00	0.9400E 00
COMP. 2 ES SOLVENTE	0.2786E 01	0.1000E 01	0.3410E 01	0.1774E 01
COMP. 3 ES SOLVENTE	0.9972E 00	0.4530E 01	0.1000E 01	0.1391E 01
COMP. 4 ES SOLVENTE	0.9272E 00	0.2019E 01	0.1761E 01	0.1000E 01

TAU(J,1) = EXP (-DELTA(U)/RT)

0.1000000E 01	0.5486530E 00	0.1511588E 01	0.5835495E 00
0.1052296E 01	0.1000000E 01	0.1179046E 01	0.9926152E 00
0.6159329E 00	0.4832428E 00	0.1000000E 01	0.1262265E 01
0.1567512E 01	0.7607085E 00	0.6706786E 00	0.1000000E 01

LA SALIDA CONSISTE DE:

NO. DE COMPONENTE. Q, R Y L PARA CADA COMPONENTE (UNICAMENTE UNICAC)  
 No. DE COMPONENTE, KK, TEMP1, TEMP2 Y A(I,J) o B(I,J), J=1,2,...,N  
 ES DENTRO: A(I,J) SI KK=1 Y B(I,J) SI KK=2 TAU= A + B\*T

COMP	Q	R	L				
1	2.528	2.9308	0.0832				
2	2.512	2.7799	-0.4404				
3	2.968	3.9228	1.8512				
4	2.336	2.5735	-0.386				
I	KK	TEMP1	TEMP2	A(I,J)	o B(I,J)	-----	
1	1	340	360	0.10000E 01	0.11371E 00	0.18238E 01	0.20493E 00
2	1	340	360	0.11262E 01	0.10000E 01	0.13917E 01	0.96890E 00
3	1	340	360	0.44101E 00	0.52172E-01	0.10000E 01	0.15201E 01
4	1	340	360	0.23124E 00	0.53528E 00	0.35831E 00	0.10000E 01
1	2	340	360	0.0	0.12082E-02	-0.86722E 00	0.10517E-02
2	2	340	360	-0.20533E-03	0.0	-0.59075E-03	0.65881E-04
3	2	340	360	0.48590E-03	0.11974E-03	0.0	-0.71630E-04
4	2	340	360	-0.20691E-02	0.62619E-03	0.86770E-03	0.0

TARSA D.2

RESUMEN DE SALIDA PARA EL CALCULO DE PARAMETROS UNIQAC

S I S T E M A :

ETANOL (1) AGUA (2) N-PROPANOL (3) AC. ACETICO (4)

LA SALIDA CONSISTE DE:

NO. DE COMPONENTE, Q, R Y L PARA CADA COMPONENTE (UNICAMENTE UNIQAC)  
 NO. DE COMPONENTE, KK, TEMP1, TEMP2 Y A(1,J) o B(1,J), J=1,2,...,N  
 ES DECIR: A(1,J) SI KK=1 Y B(1,J) SI KK=2 TAU= A + B\*T

COMP	Q	R	L
1	1.87199	2.1055	-0.043199
2	2.51200	2.7799	-0.44039
3	1.40000	0.9200	-2.32000
4	2.07200	2.2024	-0.55039

1	KK	TEMP1	TEMP2	A(1,J) o B(1,J)-----
1	1	340	360	0.10000E 01 0.12273E 01 0.19283E 00 -0.21691E 00
2	1	340	360	0.77161E 00 0.10000E 01 0.67732E 01 -0.35463E 01
3	1	340	360	0.18128E 01 0.20593E 00 0.10000E 01 -0.67430E 01
4	1	340	360	0.41135E 01 0.27263E 01 0.75816E 01 0.10000E 01
1	2	340	360	0.0 -0.2033 E-03 0.90827E-03 0.13950E 02
2	2	340	360	0.13147E 01 0.0 -0.24844E-03 0.11243E 02
3	2	340	360	-0.11735E 02 0.96916E-03 0.0 0.13632E 02
4	2	340	360	-0.4068 E-02 -0.25139E-02 -0.37084E 02 0.0

TABLA D.3 RESULTADOS COMPUTACIONALES DEL SISTEMA 1.  
 TA OL AG A- P OP NO -A . CE IC

INCLUYENDO COEFICIENTES DE ACTIVIDAD

INCLUYENDO COEFICIENTES DE FUGACIDAD

INCLUYENDO DIMERIZACION

INCLUYENDO EXCESOS DE ENTALPIA

COMPOSICION DE ALIMENTACION Y PARAMETROS DE ANTOINE

1	25.000	8.045	1554.300	222.650
2	25.000	7.997	1569.700	209.500
3	25.000	7.967	1668.200	228.000
4	25.000	7.188	1416.700	211.000

NUMERO DE ETAPAS 30  
 DESTILADO 40.000  
 RELACION DE REFLUJO 2.000000  
 PRESION TOTAL 1.000

CONFIGURACION DE FLUJO

I	FL	FV	SL	SV	FKV	CORRIENTES DE ALIMENTACION			
1	40.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
2	110.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
3	110.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
4	110.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
5	110.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
6	110.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
7	110.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
8	60.0	70.0	0	0	0	12.5	12.5	25.0	0
9	60.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
10	60.0	70.0	20.0	0	0	0	0	0	0
11	80.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
12	80.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
13	80.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
14	80.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
15	80.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
16	80.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
17	80.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
18	80.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
19	80.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
20	80.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
21	80.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
22	80.0	70.0	0	0	0	0	0	0	0
23	80.0	120.0	0	0	1.0	25.0	12.5	12.5	0
24	80.0	120.0	0	0	0	0	0	0	0
25	80.0	120.0	0	0	0	0	0	0	0
26	80.0	120.0	0	0	0	0	0	0	0
27	80.0	120.0	0	0	0	0	0	0	0
28	80.0	120.0	0	0	0	0	0	0	0
29	80.0	120.0	0	0	0	0	0	0	0
30	80.0	40.0	0	0	0	0	0	0	0

- 193 -

ETAPA TEMP. FLUJO TOTAL FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON LIQUIDOS)



1	90.00	46.73	.000	12.710	3.945	30.073
2	90.67	124.43	2.650	40.094	30.339	51.351
3	91.33	122.51	6.644	38.493	32.336	45.033
4	92.00	121.23	8.865	37.372	33.081	41.913
5	92.67	120.58	10.115	36.697	33.369	40.395
6	93.33	120.22	10.753	36.324	33.493	39.650
	94.00	119.94	10.969	36.141	33.562	39.273
8	92.33	67.99	10.327	23.178	20.624	13.856
9	90.64	67.09	11.897	23.554	20.771	10.865
10	89.36	66.34	13.268	23.593	20.672	8.806
11	88.52	85.80	18.483	30.780	26.774	9.765
12	87.89	85.44	19.570	30.572	26.464	8.831
13	87.37	85.19	20.502	30.357	26.136	8.190
14	86.94	85.00	21.327	30.153	25.803	7.714
15	86.57	84.85	22.083	29.963	25.469	7.330
16	86.23	84.72	22.800	29.785	25.132	6.999
17	85.92	84.60	23.505	29.614	24.784	6.695
18	85.63	84.49	24.225	29.443	24.417	6.404
19	85.35	84.38	24.989	29.260	24.018	6.117
20	85.08	84.28	25.831	29.054	23.567	5.829
21	84.81	84.18	26.795	28.808	23.043	5.534
22	84.52	84.08	27.938	28.501	22.412	5.230
23	84.67	83.99	29.340	28.105	21.635	4.914
24	85.33	85.22	29.876	29.039	24.030	2.277
25	86.00	84.47	30.278	28.897	25.164	.131
26	86.67	85.68	30.821	28.468	26.395	.000
27	87.33	87.07	31.688	27.628	27.750	.000
28	88.00	88.53	33.228	26.117	29.182	.000
29	88.67	90.13	36.205	23.445	30.478	.000
30	89.33	91.96	42.309	18.638	31.015	.000

E. A TEMP. FLUJO TOTAL FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON VAPOR)

1	90.00	84.43	9.377	27.384	26.394	21.279
2	90.67	82.51	13.372	25.783	28.391	14.960
3	91.33	81.23	15.593	24.662	29.136	11.840
4	92.00	80.58	16.842	23.987	29.425	10.322
5	92.67	80.22	17.481	23.614	29.548	9.577
6	93.33	79.94	17.696	23.430	29.617	9.201
7	94.00	77.99	17.055	22.968	29.180	8.783
8	92.33	77.09	18.624	23.343	29.326	5.792
9	90.64	76.34	19.995	23.382	29.227	3.733
10	89.36	75.80	21.316	23.234	28.966	2.286
11	88.52	75.44	22.403	23.026	28.657	1.351
12	87.89	75.19	23.335	22.811	28.329	.710
13	87.37	75.00	24.161	22.607	27.996	.234
14	86.94	75.00	24.917	22.417	27.662	.000
15	86.57	75.20	25.634	22.239	27.324	.000
16	86.23	75.38	26.338	22.068	26.977	.000
17	85.92	75.56	27.058	21.896	26.610	.000
18	85.63	75.75	27.822	21.714	26.210	.000
19	85.35	75.93	28.665	21.507	25.759	.000
20	85.08	76.13	29.629	21.262	25.235	.000
21	84.81	76.33	30.772	20.954	24.605	.000
22	84.52	76.56	32.173	20.559	23.828	.000
23	84.67	130.43	57.709	33.993	38.723	.000
24	85.33	131.82	58.111	33.851	39.856	.000
25	86.00	133.16	58.654	33.422	41.088	.000
26	86.67	134.55	59.521	32.582	42.443	.000
27	87.33	136.01	61.061	31.071	43.874	.000
28	88.00	137.61	64.038	28.399	45.171	.000
29	88.67	139.44	70.143	23.592	45.708	.000
30	89.33	47.48	27.833	4.954	14.692	.000

RESIDUO = 521E-05

ETAPA	TEMP	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON LIQUIDOS)			
1	100.00	40.00	.432	11.422	3.566	24.590
2	100.67	121.78	1.352	42.206	18.205	60.019
3	98.11	117.25	1.874	42.364	24.755	48.253
4	96.15	114.06	2.600	41.699	29.101	40.662
5	95.00	112.16	3.160	40.953	31.953	36.098
6	94.35	111.04	3.503	40.310	33.835	33.396
7	93.99	110.38	3.653	39.815	35.114	31.797
8	89.20	58.34	3.546	26.326	22.778	5.693
9	87.49	57.39	4.253	26.823	24.346	1.970
10	86.53	56.84	4.939	26.416	25.358	1.133
11	86.15	76.86	7.841	34.561	34.456	0.000
12	85.93	77.01	8.768	33.672	34.573	0.000
13	85.78	77.03	9.843	32.829	34.356	0.000
14	85.64	77.00	11.094	32.024	33.882	0.000
15	85.50	76.98	12.512	31.243	33.222	0.000
16	85.34	76.98	14.083	30.470	32.429	0.000
17	85.16	77.00	15.810	29.681	31.512	0.000
18	84.97	77.03	17.687	28.861	30.484	0.000
19	84.76	77.07	19.706	28.006	29.356	0.000
20	84.54	77.11	21.856	27.115	28.137	0.000
21	84.30	77.15	24.125	26.190	26.837	0.000
22	84.06	77.20	26.497	25.236	25.465	0.000
23	83.88	77.26	28.956	24.265	24.039	0.000
24	83.87	79.76	29.072	22.873	27.812	0.000
25	83.93	79.80	29.297	21.229	29.277	0.000
26	84.00	79.80	29.661	19.666	30.470	0.000
27	84.07	79.81	30.386	18.137	31.295	0.000
28	84.14	79.83	31.782	16.530	31.523	0.000
29	84.15	79.89	34.328	14.658	30.901	0.000
30	84.08	80.00	38.651	12.263	29.096	0.000

ETAPA	TEMP	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON VAPOR)			
1	100.00	81.78	.920	30.784	14.639	35.439
2	100.67	77.25	1.443	30.942	21.190	23.672
3	98.11	74.06	2.168	30.277	25.535	16.082
4	96.15	72.16	2.728	29.531	28.367	11.518
5	95.00	71.04	3.071	28.888	30.269	8.616
6	94.35	70.38	3.221	28.393	31.548	7.217
7	93.99	68.34	3.114	27.404	31.712	6.113
8	89.20	67.39	3.821	27.900	33.281	2.390
9	87.49	66.84	4.507	27.494	34.292	552
10	86.53	66.86	5.347	26.657	34.854	0.000
11	86.15	67.01	6.275	25.768	34.970	0.000
12	85.93	67.03	7.349	24.925	34.754	0.000
13	85.78	67.00	8.600	24.120	34.280	0.000
14	85.64	66.98	10.019	23.339	33.619	0.000
15	85.50	66.98	11.590	22.566	32.826	0.000
16	85.34	67.00	13.317	21.776	31.910	0.000
17	85.16	67.03	15.194	20.957	30.882	0.000
18	84.97	67.07	17.213	20.102	29.754	0.000
19	84.76	67.11	19.363	19.211	28.534	0.000
20	84.54	67.15	21.632	18.286	27.234	0.000
21	84.30	67.20	24.004	17.332	25.862	0.000
22	84.06	67.26	26.463	16.361	24.436	0.000
23	83.88	119.76	51.579	27.469	40.709	0.000
24	83.87	119.80	51.803	25.825	42.174	0.000
25	83.93	119.80	52.168	24.261	43.367	0.000
26	84.00	119.81	52.693	22.733	44.192	0.000
27	84.07	119.64	54.289	21.126	44.420	0.000

28	84.14	119.89	56.835	19.254	43.798	600
29	84.15	120.00	61.158	16.859	41.983	600
30	84.08	40.00	22.507	4.596	12.897	600

RESIDUO = 104E+05

E	A	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON LIQUIDOS)		
1		106.60	40.00	253	11.145	3.895	24.707
2		101.18	121.55	1.384	41.706	19.922	58.536
3		98.56	117.44	1.667	42.434	24.931	48.413
4		96.64	114.36	1.911	42.099	29.111	41.255
5		95.36	112.42	2.121	41.352	32.311	36.635
6		94.57	111.25	2.302	40.569	34.571	33.806
7		94.09	110.56	2.457	39.897	36.075	32.131
8		88.81	58.60	2.544	26.246	23.792	6.014
9		87.16	57.79	3.556	26.301	25.419	2.513
10		86.33	57.31	4.729	25.572	26.179	.833
11		86.00	77.13	7.801	33.538	35.376	.412
12		85.81	77.06	9.233	32.679	35.003	150
13		85.67	77.05	10.705	31.899	34.395	.055
14		85.54	77.06	12.231	31.151	33.658	020
15		85.40	77.08	13.826	30.406	32.837	.007
16		85.25	77.10	15.496	29.645	31.953	003
17		85.09	77.12	17.248	28.860	31.012	001
18		84.92	77.15	19.083	28.046	30.019	000
19		84.72	77.18	21.000	27.204	28.974	000
20		84.52	77.21	22.994	26.337	27.880	000
21		84.30	77.25	25.056	25.449	26.743	000
22		84.07	77.29	27.168	24.549	25.570	000
23		83.83	77.33	29.312	23.647	24.370	000
24		83.76	79.79	29.459	22.072	28.257	000
25		83.66	79.78	29.796	20.607	29.378	000
26		83.53	79.79	30.455	19.306	30.025	000
27		83.37	79.80	31.599	18.030	30.173	000
28		83.12	79.84	33.446	16.622	29.769	000
29		82.76	79.90	36.287	14.901	28.710	000
30		82.23	80.00	40.466	12.695	26.840	000

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON VAPOR)		
1	106.60	81.55	1.131	30.561	16.027	33.828
2	101.18	77.44	1.414	31.289	21.036	22.705
3	98.56	74.36	1.658	30.944	25.216	16.547
4	96.64	72.42	1.869	30.208	28.416	11.928
5	95.36	71.25	2.049	29.424	30.676	9.096
6	94.57	70.56	2.204	28.753	32.180	7.423
7	94.09	68.60	2.291	27.601	32.397	6.307
8	88.81	67.79	3.303	27.656	34.024	2.806
9	87.16	67.31	4.476	26.927	34.784	1.125
10	86.33	67.13	5.898	25.972	34.844	.412
11	86.00	67.06	7.330	25.113	34.471	150
12	85.81	67.05	8.802	24.333	33.863	.055
13	85.67	67.06	10.329	23.586	33.126	020
14	85.54	67.08	11.923	22.840	32.305	.007
15	85.40	67.10	13.594	22.080	31.421	003
16	85.25	67.12	15.345	21.294	30.480	.001
17	85.09	67.15	17.180	20.481	29.487	000
18	84.92	67.18	19.099	19.639	28.442	000
19	84.72	67.21	21.092	18.771	27.348	000
20	84.52	67.25	23.153	17.883	26.211	000
21	84.30	67.29	25.266	16.983	25.036	000
22	84.07	67.33	27.409	16.082	23.838	000
23	83.83	119.79	52.557	27.006	40.225	000

24	83.70	119.78	52.893	25.541	41.346	000
25	83.66	119.79	53.552	24.240	41.993	000
26	83.53	119.80	54.697	22.965	42.141	000
27	83.37	119.84	56.544	21.856	41.737	000
28	83.12	119.90	59.384	19.835	40.678	000
29	82.76	120.00	63.533	17.629	38.808	000
30	82.23	40.00	23.097	4.934	11.968	000

RESIDUO = 253E+03

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON LIQUIDOS)			
1	106.00	40.00	2.265	11.139	3.887	24.708
2	100.99	121.37	1.322	41.701	20.385	57.958
3	98.41	117.25	1.606	42.338	25.360	47.943
4	96.54	114.24	1.850	41.976	29.468	40.947
5	95.31	112.35	2.060	41.252	32.587	36.455
6	94.54	111.22	2.241	40.494	34.775	33.709
7	94.08	110.55	2.401	39.848	34.220	32.081
8	88.79	58.60	2.496	26.220	27.891	5.992
9	87.15	57.79	3.518	24.299	25.475	2.502
10	86.32	57.32	4.700	25.589	26.196	836
11	85.99	77.14	7.766	33.572	35.382	419
12	85.81	77.08	9.201	32.717	35.004	153
13	85.66	77.06	10.675	31.933	34.400	956
14	85.53	77.07	12.206	31.180	33.665	920
15	85.39	77.09	13.804	30.430	32.845	907
16	85.25	77.11	15.479	29.666	31.960	903
17	85.09	77.13	17.235	28.878	31.018	901
18	84.91	77.16	19.075	28.061	30.022	900
19	84.72	77.19	20.998	27.217	28.975	900
20	84.51	77.22	22.997	26.347	27.880	900
21	84.29	77.26	25.063	25.457	26.740	900
22	84.06	77.30	27.181	24.555	25.564	900
23	83.83	77.34	29.330	23.651	24.361	900
24	83.75	79.80	29.493	22.073	28.234	900
25	83.64	79.79	29.852	20.602	29.338	900
26	83.51	79.80	30.537	19.292	29.969	900
27	83.33	79.81	31.704	18.007	30.104	900
28	83.07	79.85	33.563	16.591	29.692	900
29	82.69	79.90	36.392	14.876	28.637	900
30	82.14	80.00	40.522	12.685	26.793	900

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON VAPOR)			
1	106.00	81.37	1.057	30.562	16.498	33.250
2	100.99	77.25	1.341	31.199	21.473	23.234
3	98.41	74.24	1.582	30.837	25.581	16.239
4	96.54	72.35	1.795	30.113	28.700	11.747
5	95.31	71.22	1.976	29.354	30.887	9.000
6	94.54	70.55	2.136	28.709	32.333	7.373
7	94.08	68.60	2.231	27.581	32.503	6.283
8	88.79	67.79	3.253	27.460	34.085	2.794
9	87.15	67.32	4.435	26.950	34.209	1.127
10	86.32	67.14	5.861	26.005	34.855	419
11	85.99	67.08	7.296	25.149	34.477	153
12	85.81	67.06	8.770	24.365	33.872	956
13	85.66	67.07	10.301	23.612	33.137	920
14	85.53	67.09	11.899	22.863	32.317	907
15	85.39	67.11	13.574	22.098	31.432	903
16	85.25	67.13	15.330	21.310	30.490	901
17	85.09	67.16	17.170	20.494	29.495	900
18	84.91	67.19	19.093	19.649	28.447	900
19	84.72	67.22	21.092	18.779	27.352	900

20	34 51	67.26	23.158	17.889	26.213	000
21	84.29	67.30	25.276	16.987	25.037	000
22	84.06	67.34	27.425	16.083	23.834	000
23	83.83	119.60	52.588	27.006	40.206	000
24	83.75	119.79	52.947	25.535	41.310	000
25	83.64	119.83	53.632	24.225	41.941	000
26	83.51	119.81	54.799	22.939	42.076	000
	83.33	119.85	56.658	21.524	41.664	000
28	83.07	119.90	59.427	19.828	40.609	000
29	82.69	120.00	63.617	17.617	38.765	000
30	82.14	40.00	23.095	4.932	11.972	000

RESIDUO = 355E+01

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON LIQUIDOS)			
1	106.01	40.00	.265	11.138	3.888	24.708
2	101.00	121.38	1.321	41.706	20.372	57.977
3	98.42	117.25	1.605	42.348	25.344	47.957
4	96.55	114.25	1.850	41.988	29.453	40.955
5	95.31	112.36	2.060	41.263	32.575	36.458
6	94.54	111.22	2.241	40.503	34.766	33.709
7	94.08	110.55	2.401	39.855	36.215	32.081
8	88.79	58.60	2.496	26.225	23.887	5.991
9	87.15	57.79	3.518	26.302	25.473	2.502
10	86.32	57.32	4.700	25.591	26.195	.835
11	85.99	77.14	7.766	33.573	35.382	.419
12	85.81	77.08	9.201	32.717	35.005	.153
13	85.66	77.06	10.675	31.933	34.400	.056
14	85.53	77.07	12.205	31.180	33.665	.020
15	85.39	77.09	13.804	30.430	32.846	.007
	85.25	77.11	15.479	29.666	31.961	.003
	85.09	77.13	17.235	28.878	31.019	.001
18	84.91	77.16	19.075	28.061	30.023	.000
19	84.72	77.19	20.997	27.217	28.976	.000
20	84.51	77.22	22.997	26.347	27.880	.000
21	84.29	77.26	25.063	25.457	26.741	.000
22	84.05	77.30	27.181	24.554	25.565	.000
23	83.83	77.34	29.330	23.651	24.362	.000
24	83.75	79.80	29.492	22.073	28.235	.000
25	83.64	79.79	29.851	20.602	29.339	.000
26	83.51	79.80	30.536	19.292	29.970	.000
27	83.33	79.81	31.703	18.007	30.105	.000
28	83.07	79.85	33.563	16.592	29.693	.000
29	82.69	79.90	36.391	14.876	28.638	.000
30	82.13	80.00	40.521	12.685	26.794	.000

ETAPA	TEMP	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON VAPOR)			
1	106.01	81.38	1.056	30.568	16.484	33.269
2	101.00	77.25	1.340	31.209	21.456	23.249
3	98.42	74.25	1.585	30.850	25.565	16.246
4	96.55	72.36	1.794	30.125	28.687	11.750
5	95.31	71.22	1.975	29.364	30.878	9.000
6	94.54	70.55	2.136	28.716	32.327	7.372
7	94.08	68.60	2.231	27.586	32.499	6.283
8	88.79	67.79	3.253	27.663	34.085	2.793
9	87.15	67.32	4.435	26.952	34.807	1.127
10	86.32	67.14	5.861	26.006	34.854	.419
11	85.99	67.08	7.296	25.150	34.477	.153
12	85.81	67.06	8.770	24.365	33.872	.056
13	85.66	67.07	10.300	23.613	33.138	.020
14	85.53	67.09	11.899	22.863	32.318	.007
15	85.39	67.11	13.574	22.098	31.433	.003

16	85.25	67.13	15.330	21.310	30.491	.000
17	85.09	67.16	17.170	20.494	29.495	.000
18	84.91	67.19	19.092	19.650	28.448	.000
19	84.72	67.22	21.092	18.779	27.352	.000
20	84.51	67.25	23.158	17.889	26.213	.000
21	84.29	67.30	25.276	16.987	25.037	.000
22	84.06	67.34	27.424	16.083	23.834	.000
	83.83	119.80	52.587	27.006	40.207	.000
24	83.75	119.79	52.946	25.535	41.311	.000
25	83.64	119.80	53.631	24.225	41.942	.000
26	83.51	119.81	54.798	22.939	42.077	.000
27	83.33	119.85	56.658	21.524	41.665	.000
28	83.07	119.90	59.486	19.809	40.610	.000
29	82.69	120.00	63.616	17.618	38.766	.000
30	82.13	40.00	23.095	4.933	11.972	.000

RESIDUO = .473E-02

FLUJO DE PRODUCTO,FASE LIQUIDA

1	265	11.138	3.888	24.708
2	.000	.000	.000	.000
3	.000	.000	.000	.000
4	.000	.000	.000	.000
5	.000	.000	.000	.000
6	.000	.000	.000	.000
7	.000	.000	.000	.000
8	.000	.000	.000	.000
9	.000	.000	.000	.000
10	1.640	8.923	9.140	29.1
11	.000	.000	.000	.000
12	.000	.000	.000	.000
13	.000	.000	.000	.000
14	.000	.000	.000	.000
15	.000	.000	.000	.000
16	.000	.000	.000	.000
17	.000	.000	.000	.000
18	.000	.000	.000	.000
19	.000	.000	.000	.000
20	.000	.000	.000	.000
21	.000	.000	.000	.000
22	.000	.000	.000	.000
23	.000	.000	.000	.000
24	.000	.000	.000	.000
25	.000	.000	.000	.000
26	.000	.000	.000	.000
27	.000	.000	.000	.000
28	.000	.000	.000	.000
29	.000	.000	.000	.000
30	.000	.000	.000	.000

FLUJO DE PRODUCTO,FASE VAPOR

1	.000	.000	.000	.000
2	.000	.000	.000	.000
3	.000	.000	.000	.000
4	.000	.000	.000	.000
5	.000	.000	.000	.000
6	.000	.000	.000	.000
7	.000	.000	.000	.000
8	.000	.000	.000	.000
9	.000	.000	.000	.000
10	.000	.000	.000	.000
11	.000	.000	.000	.000

12	000	000	000	000
13	000	000	000	000
14	000	000	000	000
15	000	000	000	000
16	000	000	000	000
17	000	000	000	000
18	000	000	000	000
20	000	000	000	000
21	000	000	000	000
22	000	000	000	000
23	000	000	000	000
24	000	000	000	000
25	000	000	000	000
26	000	000	000	000
27	000	000	000	000
28	000	000	000	000
29	000	000	000	000
30	23.095	4.933	11.972	000

PERFIL DEL FACTOR K EN LA COLUMNA

1	1.957	1.349	2.084	662
2	1.764	1.211	1.846	533
3	1.684	1.164	1.725	449
4	1.623	1.134	1.624	385
5	1.582	1.118	1.550	342
6	1.557	1.112	1.499	314
7	1.542	1.110	1.466	297
8	1.282	918	1.264	192
9	1.208	873	1.187	145
10	1.177	855	1.138	119
11	1.172	849	1.116	108
12	1.174	844	1.104	104
13	1.179	838	1.096	102
14	1.184	830	1.091	102
15	1.189	822	1.086	101
16	1.193	812	1.081	102
17	1.197	801	1.076	102
18	1.199	789	1.071	101
19	1.200	776	1.065	101
20	1.200	763	1.059	101
21	1.199	748	1.053	100
22	1.197	734	1.047	100
23	1.193	718	1.041	099
24	1.190	702	0986	099
25	1.203	765	959	098
26	1.206	773	936	098
27	1.207	774	919	098
28	1.204	765	900	097
29	1.196	746	883	096
30	1.190	714	863	094

PERFIL DE FRACCION MOL EN LA COLUMNA (FASE LIQUIDA)

1	007	278	037	618
2	011	344	162	478
3	014	361	216	409
4	016	369	258	358
5	018	367	290	324
6	020	364	313	303

7	022	361	328	290
8	043	448	402	102
9	061	455	441	043
10	082	446	457	015
11	101	435	459	005
12	119	424	454	002
13	139	414	446	001
	158	405	437	000
15	179	395	426	000
16	201	385	414	000
17	223	374	402	000
18	247	364	389	000
19	272	353	375	000
20	298	341	361	000
21	324	329	346	000
22	352	318	331	000
23	379	306	315	000
24	370	277	354	000
25	374	258	368	000
26	383	242	376	000
27	397	226	377	000
28	420	208	372	000
29	455	186	358	000
30	507	159	335	000

PERFIL DE FRACCIÓN MOL EN LA COLUMNA(FASE VAPOR)

1	013	376	203	409
2	017	404	278	301
3	021	416	344	219
4	025	416	396	162
	028	412	434	126
	030	407	458	104
7	033	402	474	092
8	048	408	503	041
9	066	400	517	017
10	087	387	519	006
11	109	375	514	002
12	131	363	505	001
13	154	352	494	000
14	177	341	482	000
15	202	329	468	000
16	228	317	454	000
17	256	305	439	000
18	284	292	423	000
19	314	279	407	000
20	344	266	390	000
21	376	252	372	000
22	407	239	354	000
23	439	225	336	000
24	442	213	345	000
25	448	202	350	000
26	457	191	351	000
27	473	180	348	000
28	496	165	339	000
29	530	147	323	000
30	577	123	299	000

EL CALOR A SER ALIMENTADO AL REBOILER ES 6659E+06(CAL/HR)

EL CALOR A SER REMOVIDO POR EL CONDENSADOR ES 7706E+06(CAL/HR)



TABLA D.4 RESULTADOS COMPUTACIONALES DEL SISTEMA 2.  
 -2 DI LO OE AN -N PR PA OL TO UE O- CE ON

INCLUYENDO COEFICIENTES DE ACTIVIDAD

INCLUYENDO COEFICIENTES DE FUGACIDAD

INCLUYENDO DIMERIZACION

INCLUYENDO EXCESOS DE ENTALPIA

COMPOSICION DE ALIMENTACION Y PARAMETROS DE ANTOINE

1	25.000	6 803	949 620	239 000
2	25 000	7 797	1569 700	209 500
3	25.000	7 024	1161 000	224 000
4	25 000	7 183	1416 700	211 000

NUMERO DE ETAPAS 30  
 DESTILADO 40.000  
 RELACION DE PEFLUJO 2.000000  
 PRESION TOTAL 1.000

CONFIGURACION DE FLUJO

I	FL	FV	SL	SV	FKV	CORRIENTES DE ALIMENTACION				
1	40 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	110 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
3	110 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	110 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
5	110 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
6	110 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
7	110 0	70 0	0	0	0	0	12 5	12 5	25 0	0
8	60 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
9	60 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	60 0	70 0	20	0	0	0	0	0	0	0
11	80 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
12	80 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
13	80 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
14	80 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
15	80 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
16	80 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
17	80 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
18	80 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
19	80 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
20	80 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
21	80 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
22	80 0	70 0	0	0	0	0	0	0	0	0
23	80 0	120 0	0	0	1 0	25 0	12 5	12 5	0	0
24	80 0	120 0	0	0	0	0	0	0	0	0
25	80 0	120 0	0	0	0	0	0	0	0	0
26	80 0	120 0	0	0	0	0	0	0	0	0
27	80 0	120 0	0	0	0	0	0	0	0	0
28	80 0	120 0	0	0	0	0	0	0	0	0
29	80 0	120 0	0	0	0	0	0	0	0	0
30	80 0	40 0	0	0	0	0	0	0	0	0

- 202 -

ETAPA TEMP FLUJO TOTAL FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON LIQUIDOS)

1	70 00	55 52	000	27 564	000	27 960
2	72 00	133 02	000	67 785	16 359	48 877
3	74 00	126 68	000	60 714	22 138	43 829
4	76 00	120 93	000	56 152	24 303	40 474
5	78 00	116 50	000	53 346	24 732	38 426
6	77 15	113 20	000	51 723	24 255	37 223
7	76 62	110 88	000	50 968	23 325	36 583
8	73 56	59 78	000	38 507	9 866	11 405
9	72 22	58 87	000	38 566	10 161	10 139
10	71 69	58 82	990	38 126	10 490	9 212
11	70 56	78 83	2 564	50 260	14 399	11 610
12	72 00	78 76	3 578	49 554	14 624	11 004
13	74 00	78 69	4 465	48 984	14 751	10 491
14	76 00	76 61	5 245	48 519	14 806	10 045
15	78 00	78 54	5 935	48 138	14 810	9 654
16	80 00	78 46	6 549	47 826	14 777	9 305
17	82 00	78 38	7 101	47 573	14 717	8 989
18	84 00	78 30	7 601	47 369	14 635	8 699
19	86 00	78 23	8 061	47 207	14 551	8 429
20	88 00	78 15	8 499	47 082	14 493	8 177
21	90 00	78 04	8 941	46 981	14 483	7 936
22	92 00	77 96	9 539	46 889	13 817	7 716
23	94 00	76 93	10 075	46 676	12 805	7 429
24	96 00	81 50	11 117	47 293	14 275	8 619
25	98 00	81 23	11 291	47 457	14 095	8 392
26	100 00	81 06	11 478	47 664	13 954	7 967
27	102 00	80 90	11 663	47 546	13 895	7 499
28	104 00	80 78	11 935	47 749	14 191	6 905
29	106 00	80 82	13 037	46 027	15 925	5 837
30	108 00	80 00	19 979	35 020	22 605	2 396

E. PA TEMP. FLUJO TOTAL FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON VAPOR)

1	70 00	78 21	000	40 221	17 068	20 917
2	72 00	71 87	000	33 149	22 847	15 869
3	74 00	69 69	3 572	28 588	25 012	12 514
4	76 00	69 32	7 634	25 782	25 442	10 466
5	78 00	68 89	10 497	24 159	24 964	9 263
6	77 15	66 42	12 363	23 403	24 035	8 624
7	76 62	69 67	13 703	23 443	23 075	8 446
8	73 56	68 83	14 782	23 501	23 371	7 179
9	72 22	68 82	15 805	23 062	23 699	6 252
10	71 09	68 83	16 950	22 368	24 013	5 481
11	70 56	68 76	17 965	21 583	24 238	4 875
12	72 00	68 69	18 852	21 113	24 366	4 362
13	74 00	68 61	19 631	20 647	24 420	3 916
14	76 00	68 54	20 321	20 266	24 424	3 525
15	78 00	68 46	20 935	19 955	24 391	3 176
16	80 00	68 38	21 487	19 701	24 331	2 860
17	82 00	68 30	21 987	19 497	24 250	2 570
18	84 00	68 23	22 447	19 336	24 145	2 300
19	86 00	68 15	22 885	19 211	24 067	2 048
20	88 00	68 04	23 327	19 110	23 997	1 807
21	90 00	67 96	23 925	19 018	23 431	1 587
22	92 00	66 98	24 461	18 805	22 419	1 300
23	94 00	121 50	50 503	31 921	36 390	2 690
24	96 00	121 23	50 677	32 095	36 207	2 263
25	98 00	121 06	50 864	32 293	36 068	1 839
26	100 00	120 90	51 049	32 474	36 009	1 370
27	102 00	120 78	51 321	32 378	36 305	776
28	104 00	121 12	52 422	30 656	38 039	600
29	106 00	123 73	59 365	19 649	44 719	000
30	108 00	61 50	39 366	900	22 114	000

RESIDUO = 809E+05

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON LIQUIDOS)			
1	80.00	40.72	0.00	20.533	0.00	20.184
2	82.00	93.70	0.00	42.692	0.00	51.003
3	84.00	91.80	0.00	45.246	0.00	46.556
4	86.00	91.74	0.00	46.943	2.009	42.785
5	88.00	91.93	0.00	47.964	3.832	40.138
6	87.15	92.23	0.00	48.515	5.286	38.431
7	86.62	92.59	0.06	48.330	7.154	37.095
8	83.56	46.15	0.00	35.135	0.00	11.018
9	82.22	47.55	0.00	37.457	0.00	10.096
10	81.09	49.23	0.00	39.719	0.00	9.514
11	80.56	71.93	0.00	59.127	0.00	12.800
12	82.00	71.29	0.00	59.737	0.00	11.555
13	84.00	70.36	0.00	60.109	0.00	10.253
14	86.00	69.37	0.00	60.342	0.00	9.029
15	88.00	68.32	0.00	60.394	0.00	7.930
16	89.75	67.26	0.00	60.292	0.00	6.964
17	88.91	66.20	0.00	60.067	0.00	6.129
18	88.22	65.15	0.00	59.741	0.00	5.404
19	87.65	64.42	0.00	59.319	0.331	4.771
20	87.13	64.47	0.00	58.781	1.475	4.212
21	86.53	64.40	0.00	58.038	2.661	3.699
22	85.54	63.93	0.00	56.878	3.856	3.198
23	84.00	63.20	2.118	54.231	4.253	2.602
24	86.00	67.90	2.029	56.367	5.491	4.026
25	88.00	67.97	2.479	54.771	6.242	4.479
26	90.00	68.29	2.936	53.576	6.985	4.795
27	92.00	68.67	3.459	52.230	7.954	5.023
28	94.00	69.38	4.355	49.919	9.945	5.160
29	96.00	71.03	6.796	44.116	15.312	4.202
30	98.00	80.00	19.585	26.509	30.871	3.035

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON VAPOR)			
1	80.00	52.98	0.00	22.159	0.00	30.819
2	82.00	51.75	0.00	24.713	0.669	26.372
3	84.00	51.74	0.00	26.410	2.726	22.601
4	86.00	51.93	0.00	27.431	4.549	19.954
5	88.00	52.23	0.00	27.982	6.003	18.246
6	87.15	52.59	0.06	27.797	7.973	16.911
7	86.62	52.39	0.00	27.101	9.453	15.833
8	83.56	50.99	0.00	29.424	6.658	14.911
9	82.22	50.76	0.00	31.686	4.740	14.329
10	81.09	51.11	0.00	33.431	4.305	13.376
11	80.56	51.70	0.00	34.041	5.522	12.131
12	82.00	52.36	0.00	34.413	7.119	10.829
13	84.00	52.94	0.00	34.646	8.691	9.606
14	86.00	53.40	0.00	34.698	10.193	8.507
15	88.00	53.74	0.00	34.596	11.599	7.542
16	89.75	53.98	0.00	34.371	12.907	6.706
17	88.91	54.15	0.00	34.045	14.127	5.980
18	88.22	54.26	0.00	33.624	15.287	5.348
19	87.65	54.30	0.00	33.085	16.431	4.738
20	87.13	54.24	0.00	32.342	17.617	4.275
21	86.53	53.98	1.113	31.182	18.912	3.775
22	85.54	53.20	2.291	28.825	19.209	3.178
23	84.00	107.90	27.192	43.171	32.937	4.603
24	86.00	107.97	27.642	41.075	33.697	5.002
25	88.00	100.29	28.190	40.380	34.441	5.371
26	90.00	108.67	28.623	39.034	35.415	5.606
27	92.00	109.38	29.518	36.723	37.400	5.736

28	94.00	111.00	31.360	10.000	42.108	5.079
29	96.00	120.00	44.748	13.313	58.327	3.612
30	98.00	53.20	35.163	0.000	27.426	577

RESIDUO = .413E+05

E	A	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON LIQUIDOS)	
1		90.00	40.00	0.00	16.548	3.595
2		91.68	91.77	0.00	40.679	8.173
3		90.96	91.42	0.00	41.133	7.862
4		90.01	91.37	0.00	41.554	8.416
5		89.22	91.68	0.00	41.812	9.810
6		88.49	92.16	0.00	42.045	11.756
7		87.56	92.69	0.00	42.166	13.969
8		88.73	42.44	0.00	29.259	3.848
9		89.35	42.28	0.00	30.480	3.667
10		90.02	42.18	0.00	31.442	3.430
11		90.42	62.02	0.00	47.358	4.368
12		90.13	61.55	0.00	47.905	3.651
13		89.83	61.17	0.00	48.371	3.043
14		89.70	60.89	0.00	48.750	2.577
15		89.66	60.70	0.00	48.955	2.224
16		89.63	60.59	0.00	43.993	1.985
17		89.35	60.58	0.00	48.648	1.907
18		88.90	60.60	0.00	48.151	1.902
19		88.40	60.74	0.00	47.440	2.158
20		88.45	61.11	0.03	46.696	2.834
21		88.45	61.34	0.30	46.540	3.483
22		86.54	61.26	2.63	46.707	4.166
23		76.84	60.28	2.293	45.110	4.905
24		79.85	65.80	2.062	45.485	6.424
25		80.04	65.82	2.349	43.362	7.411
26		80.07	65.46	2.715	41.459	8.698
27		82.00	67.37	3.214	39.049	10.741
28		84.00	69.04	4.155	35.223	15.040
29		86.00	72.84	6.944	27.817	24.988
30		88.00	80.00	18.303	11.843	41.419

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON VAPOR)	
1	90.00	51.77	0.00	24.131	4.577
2	91.68	51.42	0.00	24.585	4.267
3	90.96	51.37	0.00	25.006	4.821
4	90.01	51.68	0.00	25.264	6.214
5	89.22	52.16	0.00	25.497	8.160
6	88.49	52.69	0.00	25.617	10.373
7	87.56	52.44	0.00	25.210	12.753
8	88.73	52.28	0.00	26.432	12.571
9	89.35	52.18	0.00	27.394	12.335
10	90.02	52.02	0.00	28.227	11.979
11	90.42	51.55	0.00	28.774	11.162
12	90.13	51.17	0.00	29.239	10.554
13	89.83	50.89	0.00	29.618	10.087
14	89.70	50.70	0.00	29.853	9.735
15	89.66	50.59	0.00	29.862	9.496
16	89.63	50.58	0.00	29.516	9.418
17	89.35	50.60	0.00	29.019	9.413
18	88.90	50.74	0.00	28.309	9.369
19	88.40	51.11	0.03	27.564	10.345
20	88.45	51.34	0.30	27.409	10.994
21	88.45	51.26	2.63	27.576	11.676
22	86.54	50.23	2.293	25.978	12.415
23	76.84	105.80	27.062	38.853	26.435

24	79.85	105.82	27.349	36.730	27.422	14.315
25	80.04	106.46	27.715	34.227	28.708	15.214
26	80.05	107.37	28.214	32.417	30.752	15.989
27	82.00	109.04	29.155	28.591	35.050	16.245
28	84.00	112.84	31.944	21.186	44.999	14.715
29	86.00	120.00	43.303	5.211	61.429	10.056
30	88.00	46.63	25.000	0.000	20.011	1.621

RESIDUO = .984E+04

ETAPA	TEMP	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON LIQUIDOS)		
1	90.24	40.00	.000	15.592	3.034	21.374
2	89.98	89.44	.000	40.185	7.527	41.731
3	89.58	89.76	.000	40.155	8.732	40.869
4	89.13	90.05	.000	40.265	9.956	39.829
5	88.59	90.36	.000	40.368	11.262	38.729
6	87.94	90.70	.000	40.405	12.714	37.586
7	87.18	91.10	.000	40.359	14.356	36.385
8	87.85	40.61	.000	27.274	3.481	9.857
9	88.04	40.42	.000	28.004	3.251	9.154
10	88.25	40.31	.000	28.513	3.077	8.718
11	88.32	60.20	.000	43.046	4.398	12.752
12	88.24	60.10	.000	43.178	4.214	12.711
13	88.12	60.05	.000	43.141	4.081	12.830
14	87.95	60.03	.000	42.958	3.997	13.080
15	87.74	60.05	.000	42.642	3.965	13.441
16	87.51	60.10	.000	42.216	4.006	13.876
17	87.32	60.19	.000	41.750	4.140	14.298
18	87.18	60.28	.000	41.414	4.321	14.544
19	87.17	60.38	.002	41.275	4.570	14.534
20	87.23	60.47	.011	41.394	4.846	14.214
21	86.77	60.45	.069	41.648	5.133	13.603
22	84.33	60.28	.434	41.485	5.656	12.704
23	73.78	59.05	2.575	39.387	6.170	10.919
24	77.52	65.09	2.196	39.510	7.820	15.566
25	77.46	64.47	2.191	38.900	8.107	15.276
26	76.81	64.61	2.196	38.933	8.812	14.667
27	75.19	65.20	2.291	38.589	10.871	13.445
28	74.00	66.85	2.755	36.718	16.497	10.884
29	76.00	71.26	5.148	30.219	29.943	5.950
30	78.00	80.00	17.235	12.215	50.131	.419

ETAPA	TEMP	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON VAPOR)		
1	90.24	49.44	.000	24.593	4.493	20.357
2	89.98	49.76	.000	24.562	5.698	19.495
3	89.58	50.05	.000	24.673	6.922	18.455
4	89.13	50.36	.000	24.776	8.228	17.355
5	88.59	50.70	.000	24.813	9.680	16.212
6	87.94	51.10	.000	24.767	11.322	15.011
7	87.18	50.61	.000	24.182	12.947	13.483
8	87.85	50.42	.000	24.912	12.717	12.790
9	88.04	50.31	.000	25.421	12.543	12.344
10	88.25	50.20	.000	25.772	12.332	12.091
11	88.32	50.10	.000	25.904	12.149	12.050
12	88.24	50.05	.000	25.867	12.016	12.158
13	88.12	50.03	.000	25.694	11.932	12.419
14	87.95	50.05	.000	25.369	11.900	12.780
15	87.74	50.10	.000	24.943	11.941	13.215
16	87.51	50.19	.000	24.476	12.075	13.637
17	87.32	50.28	.000	24.140	12.256	13.883
18	87.18	50.38	.002	24.302	12.504	13.873
19	87.17	50.46	.011	24.131	12.790	13.553

20	87 53	50 46	969	27 377	13 966	12 942
21	86 77	50 28	434	24 211	13 531	12 047
22	84 33	49 05	2 575	22 113	14 105	10 258
23	73 78	105 09	27 196	34 737	28 255	14 905
24	77 52	104 47	27 151	34 127	28 542	14 615
25	77 46	104 61	27 196	34 159	29 247	14 006
26	76 81	105 20	27 291	33 916	31 308	12 784
	75 19	106 85	27 755	31 945	32 332	10 223
28	74 00	111 26	30 148	25 445	50 377	5 289
29	76 00	120 24	42 235	7 441	70 565	000
30	78 00	45 43	25 000	000	20 435	000

RESIDUO = 374E+04

ETAPA	TEMP	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON LIQUIDOS)			
1	90 02	40 00	000	14 992	3 515	21 493
2	89 57	80 76	000	35 519	8 045	37 196
3	89 12	81 08	000	25 371	9 255	36 426
4	88 63	81 37	000	35 380	10 417	35 571
5	88 08	81 65	000	35 209	11 594	34 559
6	87 47	81 95	000	35 379	12 818	33 748
7	86 77	82 25	000	35 305	14 102	32 247
8	87 56	31 65	000	22 225	2 693	6 728
9	87 81	31 41	000	23 044	2 395	5 974
10	88 02	31 27	000	23 683	2 162	5 400
11	88 08	51 13	000	39 138	3 434	8 500
12	88 14	51 06	000	39 494	3 342	8 529
13	88 16	51 02	000	39 742	3 252	7 986
14	88 15	51 00	000	39 910	3 274	7 511
15	88 12	50 99	000	40 012	3 279	7 037
	88 06	50 99	000	40 052	3 253	7 644
	87 99	51 00	000	40 030	3 307	7 660
18	87 91	51 01	000	39 949	3 321	7 740
19	87 81	51 02	001	39 834	3 345	7 842
20	87 63	51 04	008	39 702	3 422	7 905
21	87 01	51 06	051	39 532	3 644	7 836
22	84 41	50 95	342	39 065	4 071	7 475
23	72 78	49 84	2 140	36 942	4 406	6 349
24	76 55	55 67	1 831	37 884	5 915	10 042
25	75 90	55 27	1 847	36 564	6 706	10 155
26	74 01	55 86	1 897	35 648	8 619	9 694
27	62 98	57 32	2 021	33 890	13 464	7 941
28	64 00	61 25	2 489	29 449	25 218	4 099
29	66 00	71 63	4 549	19 065	48 613	000
30	68 00	80 98	14 286	1 371	65 321	000

ETAPA	TEMP	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON VAPORES)			
1	90 02	40 76	000	20 527	4 531	15 703
2	99 57	41 06	000	20 379	5 740	14 963
3	89 12	41 37	000	20 385	6 902	14 078
4	88 63	41 65	000	20 437	8 075	13 165
5	88 08	41 95	000	20 387	9 203	12 255
6	87 47	42 25	000	20 313	10 587	11 354
7	86 77	41 65	000	19 733	11 676	10 235
	87 56	41 41	000	20 522	11 320	9 491
9	87 81	41 27	000	21 101	11 168	8 907
10	88 02	41 13	000	21 721	10 994	8 417
11	88 08	41 06	000	22 077	10 908	8 086
12	88 14	41 02	000	22 325	10 652	7 943
13	88 16	41 00	000	22 493	10 624	7 609
14	88 15	40 99	000	22 574	10 528	7 554
15	88 12	40 99	000	22 635	10 853	7 511

16	88.00	41.00	000	22.613	10.267	7.517
17	87.99	41.01	000	22.532	10.880	7.597
18	87.91	41.02	001	22.417	10.905	7.699
19	87.81	41.04	008	22.285	10.987	7.762
20	87.63	41.06	051	22.115	11.204	7.694
21	87.01	40.95	342	21.648	11.631	7.332
22	84.41	39.84	2 140	19.525	11.966	6.207
	72.78	95.67	26 831	32.967	25.975	9.900
24	76.55	95.27	26 847	31.647	26.765	10.012
25	75.90	95.86	26 897	30.731	28.679	9.551
26	74.01	97.32	27 021	28.973	33.524	7.798
27	68.98	101.25	27 489	24.532	45.277	3.956
28	64.00	111.77	29 549	14.148	68.072	0.000
29	66.00	124.67	39.286	000	85.380	0.000
30	68.00	45.06	25.000	000	20.060	0.000

RESIDUO = .575E+04

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON LIQUIDOS)		
1	89.72	40.00	000	13.943	4.153	21.905
2	89.14	75.54	000	32.033	8.692	34.819
3	88.64	75.87	000	31.801	9.297	34.172
4	88.13	76.14	000	31.751	10.988	33.401
5	87.59	76.39	000	31.724	12.031	32.637
6	87.03	76.64	000	31.674	13.050	31.913
7	86.45	76.88	000	31.592	14.054	31.275
8	87.28	26.20	000	19.545	2.271	5.386
9	87.56	26.00	000	19.269	2.003	4.725
10	87.86	25.85	000	19.889	1.790	4.173
11	88.01	45.71	000	35.822	2.871	6.913
12	88.15	45.61	000	36.254	2.529	6.528
	88.27	45.54	000	36.589	2.719	6.229
14	88.36	45.48	000	36.855	2.632	5.990
15	88.43	45.43	000	37.069	2.561	5.798
16	88.47	45.39	000	37.241	2.506	5.644
17	88.50	45.36	000	37.374	2.466	5.521
18	88.49	45.34	000	37.472	2.445	5.424
19	88.43	45.33	001	37.531	2.454	5.345
20	88.22	45.33	005	37.540	2.520	5.269
21	87.50	45.35	037	37.441	2.713	5.154
22	84.62	45.27	273	36.957	3.149	4.887
23	71.78	44.31	1.849	34.764	3.588	4.103
24	74.65	50.11	1.606	36.286	5.560	6.655
25	70.82	50.48	1.735	33.573	8.722	6.348
26	64.01	53.24	2.009	29.838	17.289	4.106
27	58.98	62.33	2.495	21.435	38.396	0.000
28	54.00	84.27	2.732	7.088	74.451	0.000
29	56.00	99.07	2.089	000	96.979	0.000
30	58.00	89.05	8.543	000	80.511	0.000

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON VAPOR)		
1	89.72	35.54	000	18.090	4.539	12.915
2	89.14	35.87	000	17.858	5.744	12.267
3	88.64	36.14	000	17.808	6.935	11.496
	88.13	36.39	000	17.781	7.878	10.733
5	87.59	36.64	000	17.731	8.898	10.009
6	87.03	36.88	000	17.650	9.901	9.330
7	86.45	36.20	000	17.103	10.618	8.481
8	87.28	36.00	000	17.326	10.350	7.820
9	87.56	35.85	000	18.445	10.137	7.269
10	87.86	35.71	000	19.034	9.932	6.740
11	88.01	35.61	000	19.466	9.789	6.356

12	88.15	35.54	.000	19.801	9.680	6.056
13	88.27	35.48	.000	20.067	9.592	5.817
14	98.36	35.43	.000	20.291	9.522	5.626
15	88.43	35.39	.000	20.452	9.466	5.471
16	88.47	35.36	.000	20.586	9.426	5.348
17	88.50	35.34	.000	20.683	9.405	5.251
18	98.49	35.33	.001	20.743	9.415	5.173
	88.43	35.33	.005	20.752	9.481	5.096
20	88.22	35.35	.037	20.652	9.674	4.982
21	87.50	35.27	.273	20.169	10.109	4.714
22	84.62	34.31	1.849	17.976	10.549	3.931
23	71.78	90.11	26.606	31.998	25.021	6.483
24	74.65	90.48	26.735	29.385	28.183	6.175
25	70.82	93.24	27.009	25.549	36.750	3.934
26	64.01	102.50	27.495	17.147	57.856	.000
27	58.98	124.44	27.732	2.800	93.912	.000
28	54.00	143.53	27.089	.000	116.440	.000
29	56.00	133.52	33.543	.000	99.972	.000
30	58.00	44.46	25.000	.000	19.461	.000

RESIDUO = .180E+05

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON LIQUIDOS)		
1	89.66	40.00	.000	14.074	4.120	21.807
2	89.08	76.10	.000	32.446	8.616	35.036
3	88.59	76.42	.000	32.209	9.815	34.397
4	88.08	76.69	.000	32.162	10.901	33.627
5	87.56	76.94	.000	32.143	11.943	32.856
6	87.01	77.19	.000	32.103	12.973	32.115
7	86.44	77.44	.000	32.031	14.003	31.409
	87.22	26.78	.000	18.990	2.271	5.519
	87.53	26.58	.000	19.727	-2.003	4.846
	87.86	26.43	.000	20.362	1.788	4.278
10	87.86	46.29	.000	36.387	2.937	6.963
11	88.08	46.18	.000	36.857	2.786	6.540
12	88.26	46.10	.000	37.232	2.669	6.201
13	88.42	46.04	.000	37.543	2.575	5.918
14	88.55	46.04	.000	37.806	2.497	5.676
15	88.66	45.98	.000	38.034	2.433	5.465
16	88.76	45.93	.000	38.233	2.383	5.276
17	88.83	45.88	.000	38.402	2.354	5.102
18	88.85	45.86	.001	38.534	2.369	4.933
19	88.77	45.84	.005	38.593	2.495	4.745
20	88.38	45.84	.039	38.457	2.902	4.480
21	87.05	45.91	.291	37.688	3.949	3.981
22	82.45	45.28	1.990	34.641	5.768	2.881
23	66.20	53.72	2.053	32.681	15.743	3.242
24	64.65	64.73	2.933	20.019	41.777	.000
25	60.82	71.00	3.715	.000	67.289	.000
26	54.01	89.49	1.092	.000	88.396	.000
27	48.98	124.45	.000	.000	124.451	.000
28	46.14	106.88	.153	.000	106.731	.000
29	47.76	92.35	5.661	.000	86.690	.000
30	48.00					

ETAPA	TEMP	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON VAPOR)		
1	89.66	36.10	.000	18.372	4.497	13.229
2	89.08	36.42	.000	18.135	5.695	12.591
3	88.59	36.69	.000	18.089	6.781	11.821
4	88.08	36.94	.000	18.065	7.824	11.050
5	87.56	37.19	.000	18.029	8.854	10.309
6	87.01	37.44	.000	17.957	9.883	9.602
7	86.44	36.78	.000	17.416	10.651	8.713



8	87.22	36.58	000	18.153	10.353	5.039
9	87.53	36.43	000	18.788	10.168	7.471
10	87.85	36.29	000	19.403	9.965	6.919
11	88.08	36.18	000	19.873	9.814	6.496
12	88.26	36.10	000	20.248	9.697	6.157
13	88.42	36.04	000	20.559	9.603	5.874
14	88.55	35.98	000	20.822	9.525	5.632
	88.66	35.93	000	21.050	9.461	5.421
1e	88.76	35.89	000	21.249	9.410	5.232
17	88.83	35.86	000	21.419	9.381	5.058
18	88.85	35.84	001	21.551	9.397	4.889
19	88.77	35.84	005	21.609	9.523	4.701
20	88.38	35.86	039	21.473	9.929	4.436
21	87.05	35.91	291	20.705	10.977	3.937
22	82.45	35.28	1.990	17.657	12.796	2.837
23	66.20	93.72	27.053	28.197	35.271	3.198
24	64.65	104.77	27.933	15.535	61.305	0.000
25	60.82	115.47	28.715	0.000	86.750	0.000
26	54.01	133.95	26.092	0.000	107.856	0.000
27	49.98	167.66	23.748	0.000	143.912	0.000
28	46.14	151.41	25.153	0.000	126.259	0.000
29	47.76	136.88	30.661	0.000	106.218	0.000
30	48.00	44.53	25.000	0.000	19.528	0.000

RESIDUO = .631E+05

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON LIQUIDOS)		
1	89.67	40.00	000	14.108	4.108	21.783
2	89.09	76.16	000	32.500	8.607	35.057
3	88.60	76.49	000	32.267	9.805	34.415
	89.09	76.76	000	32.222	10.891	33.643
	87.56	77.01	000	32.203	11.935	32.871
6	87.02	77.26	000	32.164	12.967	32.127
7	86.44	77.51	000	32.092	13.999	31.418
8	87.24	26.85	000	19.051	2.272	5.524
9	87.54	26.64	000	19.797	2.001	4.842
10	87.88	26.49	000	20.441	1.784	4.266
11	88.11	46.35	000	36.501	2.923	6.923
12	88.29	46.24	000	36.982	2.770	6.489
13	88.45	46.16	000	37.369	2.651	6.137
14	88.58	46.09	000	37.691	2.557	5.840
15	88.68	46.03	000	37.965	2.485	5.582
16	88.72	45.99	000	38.197	2.442	5.348
17	88.64	45.96	000	38.380	2.455	5.121
18	88.21	45.96	000	38.478	2.605	4.873
19	86.83	46.03	002	38.372	3.123	4.537
20	82.80	46.31	016	37.713	4.643	3.942
21	77.05	47.13	.120	35.507	8.829	2.670
22	72.45	49.30	.835	29.229	19.240	0.000
23	56.20	58.26	4.578	15.965	37.714	0.000
24	54.65	70.93	5.190	0.000	65.743	0.000
25	50.82	91.78	0.000	0.000	91.777	0.000
26	44.61	117.29	0.000	0.000	117.289	0.000
27	46.83	138.40	0.000	0.000	138.396	0.000
28	47.20	138.77	1.320	0.000	137.453	0.000
29	45.81	116.75	1.343	0.000	115.404	0.000
	38.00	96.00	5.407	0.000	90.589	0.000

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON VAPOR)		
1	89.67	36.16	000	18.391	4.499	13.274
2	89.09	36.49	000	18.158	5.696	12.632
3	88.60	36.76	000	18.113	6.782	11.860

4	88.09	37.01	000	18 095	7 524	11 057
5	87.56	37.26	000	18 056	8 858	10 344
6	87.02	37.51	000	17 984	9 891	9 635
7	86.44	36.85	000	17 443	10 663	8 741
8	87.24	36.64	000	18 188	10 392	8 059
9	87.54	36.49	000	18 937	10 175	7 482
10	87.88	36.35	000	19 460	9 969	6 919
	88.11	36.24	000	19 941	9 815	6 485
12	88.29	36.16	000	20 328	9 696	6 133
13	88.45	36.09	000	20 650	9 602	5 937
14	88.58	36.03	000	20 924	9 530	5 579
15	88.68	35.99	000	21 156	9 487	5 344
16	88.72	35.96	000	21 339	9 500	5 117
17	88.64	35.96	000	21 437	9 650	4 870
18	88.21	36.03	002	21 331	10 168	4 533
19	86.83	36.31	016	20 671	11 689	3 938
20	82.80	37.13	120	18 466	15 874	2 666
21	77.05	39.31	835	12 198	26 285	000
22	72.45	49.34	4 578	000	44 758	000
23	56.20	115.40	20 190	000	35 371	000
24	54.65	135.81	24 507	000	111 305	000
25	50.82	155.66	18 914	000	136 750	000
26	44.61	182.16	24 308	000	157 856	000
27	46.93	183.32	26 320	000	156 998	000
28	47.20	161.29	26 343	000	134 949	000
29	45.81	140.54	30 407	000	110 134	000
30	38.00	44.55	25 000	000	19 545	000

RESIDUO = .131E+06

ETAPA	TEMP	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON LÍQUIDOS)		
	89.65	40 00	000	14 050	4 148	21 802
2	89.07	75.85	000	32 287	8 647	34 915
3	88.57	76.17	000	32 052	9 542	34 277
4	88.06	76.44	000	32 004	10 923	33 511
5	87.54	76.69	000	31 984	11 959	32 747
6	86.99	76.94	000	31 943	12 979	32 015
7	86.43	77.18	000	31 871	13 995	31 318
8	87.23	26.52	000	18 832	2 247	5 435
9	87.54	26.31	000	19 573	1 578	4 760
10	87.87	26.16	000	20 217	1 762	4 123
11	88.08	46.02	000	36 299	2 906	6 813
12	88.24	45.92	000	36 777	2 759	6 370
13	88.31	45.84	000	37 150	2 690	6 000
14	88.19	45.79	000	37 429	2 701	5 664
15	87.63	45.79	000	37 577	2 908	5 309
16	85.83	45.90	000	37 458	3 517	4 833
17	80.67	46.30	000	36 636	5 671	3 989
18	78.21	47.46	002	33 920	11 376	2 164
19	76.83	52.88	015	26 125	26 745	000
20	72.80	61.15	098	5 409	54 643	000
21	67.05	59.33	499	000	58 329	000
22	62.45	70.17	931	000	69 240	000
23	46.20	87.71	000	000	87 714	000
24	44.65	115.74	000	000	115 743	000
25	46.34	142.58	803	000	141 777	000
	45.60	168.32	1 014	000	167 289	000
27	47.26	189.43	1 036	000	188 396	000
28	46.87	166.69	000	000	166 588	000
29	44.05	134.01	242	000	133 771	000
30	28.00	101.54	6 402	000	95 179	000

- 211 -

ETAPA TEMP FLUJO TOTAL FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON VAPORES)

1	89.65	35.85	.000	18.237	4.499	13.113
2	89.07	36.17	.000	18.002	5.694	12.474
3	88.57	36.44	.000	17.955	6.775	11.709
4	88.06	36.69	.000	17.934	7.811	10.945
5	87.54	36.94	.000	17.893	8.831	10.212
6	86.99	37.18	.000	17.821	9.847	9.515
	86.43	36.52	.000	17.282	10.599	8.637
7	87.23	36.31	.000	18.024	10.330	7.958
9	87.54	36.16	.000	18.667	10.114	7.381
10	87.87	36.02	.000	19.295	9.911	6.812
11	88.08	35.92	.000	19.773	9.774	6.370
12	88.24	35.84	.000	20.146	9.695	6.000
13	88.31	35.79	.000	20.424	9.706	5.663
14	88.19	35.79	.000	20.573	9.913	5.308
15	87.63	35.90	.000	20.450	10.622	4.832
16	85.83	36.30	.000	19.631	12.676	3.989
17	80.67	37.46	.002	16.916	18.381	2.163
18	78.21	42.89	.015	9.120	33.750	.000
19	76.83	61.79	.098	.000	61.688	.000
20	72.80	66.37	.499	.000	65.874	.000
21	67.05	77.22	.931	.000	76.285	.000
22	62.45	94.76	.000	.000	94.758	.000
23	46.20	140.58	5.309	.000	135.271	.000
24	44.65	187.11	25.803	.000	161.305	.000
25	46.14	212.78	26.034	.000	186.750	.000
26	45.60	233.89	26.036	.000	207.856	.000
27	47.26	210.24	24.051	.000	186.193	.000
28	46.87	178.52	25.242	.000	153.276	.000
29	44.05	146.05	31.402	.000	114.644	.000
30	28.00	44.51	25.000	.000	19.505	.000

RESIDUO = .448E+06

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON LIQUIDOS)		
1	89.62	40.00	.000	13.949	4.209	21.842
2	89.03	75.40	.000	31.975	8.708	34.718
3	88.53	75.72	.000	31.734	9.902	34.086
4	88.02	75.99	.000	31.682	10.977	33.330
5	87.50	76.24	.000	31.657	12.001	32.579
6	86.96	76.48	.000	31.614	13.004	31.862
7	86.40	76.72	.000	31.541	13.998	31.183
8	87.19	26.05	.000	18.505	2.221	5.326
9	87.45	25.85	.000	19.230	1.969	4.652
10	87.60	25.72	.000	19.846	1.810	4.060
11	87.35	45.62	.000	35.821	3.232	6.568
12	86.32	45.64	.000	36.079	3.633	5.924
13	83.26	45.85	.000	35.865	4.926	5.063
14	78.19	46.56	.000	34.555	8.482	3.527
15	77.63	48.56	.000	30.398	17.891	.270
16	75.83	60.93	.000	18.976	41.950	.000
17	70.67	55.67	.001	.000	55.671	.000
18	68.21	61.38	.000	.000	61.376	.000
19	66.83	76.75	.000	.000	76.745	.000
20	62.80	104.64	.000	.000	104.643	.000
21	57.05	108.83	.000	.000	108.829	.000
22	52.45	119.24	.000	.000	119.240	.000
23	41.76	139.05	1.331	.000	137.714	.000
24	45.28	166.44	6.97	.000	165.743	.000
25	44.36	191.78	.000	.000	191.777	.000
26	44.58	217.29	.000	.000	217.289	.000
27	45.57	238.40	.000	.000	238.396	.000
28	46.26	201.45	1.539	.000	199.913	.000
29	42.48	154.03	1.898	.000	152.135	.000

30 19 15 108 07 8 717 000 99.350 000

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON VAPOR)			
1	89 62	35 40	000	13 026	4 495	12 876
P	89 03	35 72	000	17 785	5 693	12 245
	88 53	35 99	000	17 733	6 767	11 489
4	88 02	36 24	000	17 768	7 792	10 737
E	87 50	36 48	000	17 665	8 794	10 020
6	86 96	36 72	000	17 592	9 788	9 341
7	86 40	36 05	000	17 056	10 511	8 484
8	87 19	35 85	000	17 781	10 260	7 811
9	87 45	35 72	000	18 397	10 101	7 218
10	87 60	35 62	000	18 937	10 116	6 568
11	87 35	35 64	000	19 195	10 517	5 924
12	86 32	35 85	000	18 981	11 810	5 063
13	83 26	36 56	000	17 670	15 366	3 527
14	78 19	38 56	000	13 514	24 776	270
15	77 63	50 93	000	2 091	48 834	000
16	75 82	62 69	001	000	62 676	000
17	70 67	68 38	000	000	68 381	000
18	68 21	83 75	000	000	83 750	000
19	66 83	111 69	000	000	111 688	000
20	62 80	115 87	000	000	115 874	000
21	57 05	126 29	000	000	126 285	000
22	52 45	146 09	1 331	000	144 758	000
23	41 76	210 97	25 697	000	185 271	000
24	45 28	233 44	22 136	000	211 305	000
25	44 36	259 17	22 419	000	236 750	000
26	44 58	281 63	23 777	000	257 856	000
27	45 57	245 84	26 539	000	219 297	000
--	46 26	198 42	26 898	000	171 519	000
.	42 48	152 45	33 717	000	118 734	000
30	19 15	44 38	25 000	000	19 384	000

RESIDUO = 129E+07

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON LIQUIDOS)			
1	89 78	40 00	000	14 166	3 898	21 935
2	89 24	78 91	000	33 961	8 479	36 473
3	88 75	79 25	000	33 719	9 722	35 808
4	88 25	79 54	000	33 683	10 874	34 978
5	87 70	79 81	000	33 676	12 007	34 128
6	87 12	80 09	000	33 642	13 155	33 292
7	86 49	80 38	000	33 567	14 331	32 478
8	86 69	29 75	000	20 506	2 776	6 463
9	85 42	29 68	000	20 971	2 994	5 715
10	79 66	29 95	000	20 850	4 489	4 609
11	77 35	51 36	000	32 373	14 171	4 818
12	76 32	55 94	000	26 214	29 728	000
13	73 26	65 52	000	10 590	54 926	000
14	69 19	58 48	000	000	58 482	000
15	67 63	67 89	000	000	67 891	000
16	65 83	91 95	000	000	91 950	000
17	60 67	105 67	000	000	105 671	000
	58 21	111 38	000	000	111 376	000
19	56 83	126 75	000	000	126 745	000
20	52 80	154 64	000	000	154 643	000
21	47 05	158 83	000	000	158 829	000
22	48 79	169 24	000	000	169 240	000
23	38 54	187 71	000	000	187 714	000
24	41 66	215 74	000	000	215 743	000
25	43 49	243 04	1 260	000	241 777	000

26	44.46	268.59	1.297	.000	267.289	.000
27	46.20	283.71	1.431	.000	282.276	.000
28	46.07	210.18	.000	.000	210.182	.000
29	39.83	152.03	1.141	.000	150.886	.000
30	19.58	102.74	14.831	.000	87.912	.000

E	'A	TEMP	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON VAPOR)		
1		89.78	38.91	.000	19.795	4.581	14.538
2		89.24	39.25	.000	19.553	5.824	13.873
3		88.75	39.54	.000	19.517	6.976	13.043
4		88.25	39.81	.000	19.509	8.109	12.192
5		87.70	40.09	.000	19.476	9.256	11.357
6		87.12	40.38	.000	19.400	10.432	10.543
7		86.49	39.75	.000	18.840	11.377	9.528
8		86.69	39.69	.000	19.304	11.596	8.780
9		85.42	39.95	.000	19.184	13.091	7.673
10		79.66	41.36	.000	17.031	19.513	4.818
11		77.35	45.94	.000	10.872	35.070	.000
12		76.32	61.81	.000	.000	61.810	.000
13		73.26	65.37	.000	.000	65.366	.000
14		68.19	74.78	.000	.000	74.776	.000
15		67.63	98.83	.000	.000	98.834	.000
16		65.83	112.68	.000	.000	112.676	.000
17		60.67	118.38	.000	.000	118.381	.000
18		58.21	133.75	.000	.000	133.750	.000
19		56.83	161.69	.000	.000	161.688	.000
20		52.80	165.87	.000	.000	165.874	.000
21		47.05	176.29	.000	.000	176.285	.000
22		48.79	194.76	.000	.000	194.758	.000
23		38.54	257.21	21.943	.000	235.271	.000
24		41.66	287.57	26.260	.000	261.305	.000
25		43.49	313.05	26.297	.000	286.750	.000
26		44.46	326.55	26.431	.000	300.118	.000
27		46.20	252.00	23.981	.000	228.024	.000
28		46.07	194.87	26.141	.000	168.728	.000
29		39.83	145.58	39.831	.000	105.753	.000
30		19.58	42.84	25.000	.000	17.842	.000

RESIDUO = 336E+07

ETAPA	TEMP	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON LIQUIDOS)		
1	90.25	40.00	.000	14.649	3.038	22.313
2	89.84	91.53	.000	40.729	7.927	42.875
3	89.43	91.91	.000	40.488	9.320	42.106
4	88.94	92.26	.000	40.511	10.718	41.033
5	88.35	92.62	.000	40.568	12.212	39.845
6	87.63	93.02	.000	40.577	13.857	38.589
7	86.77	93.47	.000	40.504	15.692	37.275
8	85.39	43.01	.000	27.367	4.964	10.659
9	80.65	43.47	.000	27.040	7.045	9.380
10	69.66	45.15	.000	25.165	13.626	6.363
11	67.35	71.04	.000	29.375	38.117	3.545
12	66.32	81.82	.000	21.214	59.158	1.451
13	63.26	83.64	.000	17.162	65.797	.684
14	59.45	83.43	.000	19.117	64.075	2.34
15	63.05	73.98	.000	37.223	34.612	.055
16	64.44	91.99	.000	50.000	41.950	.036
17	62.72	105.68	.001	50.000	55.671	.013
18	62.06	111.38	.001	50.000	61.376	.004
19	61.50	126.75	.001	50.000	76.745	.001
20	58.80	154.65	.001	50.000	104.644	.001
21	54.56	158.84	.010	50.000	108.829	.000

22	54.08	169 38	.136	50.000	119.240	000
23	45.76	189.75	2.031	50.000	137.714	000
24	47.29	217.13	1.385	50.000	165.743	000
25	47.65	244.47	2.692	50.000	191.777	000
26	47.63	269.60	2.310	50.000	217.289	000
27	48.63	272.00	2.412	37.311	232.276	000
28	47.87	182.71	2.100	20.430	160.182	000
29	39.10	117.30	5.024	11.390	100.886	000
30	26.25	80.00	23.931	4.972	51.097	000

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON VAPOR)		
1	90.25	51.53	000	26.080	4.887	20.562
2	89.84	51.91	000	25.839	6.282	19.793
3	89.43	52.26	000	25.862	7.680	18.720
4	88.94	52.62	000	25.919	9.174	17.532
5	88.35	53.02	000	25.928	10.819	16.276
6	87.63	53.47	000	25.855	12.654	14.962
7	86.77	53.01	000	25.218	14.446	13.346
8	85.39	53.47	000	24.892	16.507	12.067
9	80.65	55.15	000	23.016	23.088	9.050
10	69.66	61.04	000	17.491	40.002	3.545
11	67.35	71.82	000	9.330	61.042	1.451
12	66.32	73.64	000	5.278	67.682	684
13	63.26	73.43	000	7.232	65.960	234
14	59.45	63.98	000	27.398	36.496	085
15	63.05	98.87	000	50.000	48.834	036
16	64.44	112.69	001	50.000	62.676	013
17	62.72	118.39	001	50.000	68.351	004
18	62.06	133.75	001	50.000	83.750	001
19	61.50	161.69	001	50.000	111.688	001
20	58.80	165.89	010	50.000	115.874	000
21	54.56	176.42	136	50.000	126.285	000
22	54.08	196.79	2.032	50.000	144.758	000
23	45.76	261.66	26.365	50.000	185.271	000
24	47.29	289.00	27.692	50.000	211.305	000
25	47.65	314.06	27.310	50.000	236.750	000
26	47.63	315.46	27.412	37.927	250.118	000
27	48.63	226.17	27.100	21.046	178.024	000
28	47.87	160.76	30.024	12.005	118.728	000
29	39.10	120.00	48.931	5.587	65.482	000
30	26.25	40.00	25.000	616	14.384	000

RESIDUO = .237E+07

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON LIQUIDOS)		
1	90.09	40.00	000	13.946	3.448	22.606
2	89.66	90.93	000	35.771	8.464	42.679
3	89.22	91.33	000	39.474	9.910	41.943
4	88.72	91.69	000	39.471	11.319	40.889
5	88.12	92.04	000	39.512	12.814	39.716
6	87.41	92.44	000	39.508	14.461	38.470
7	86.56	92.89	000	39.420	16.315	37.153
8	85.30	42.47	000	26.276	5.663	10.531
9	80.86	43.11	000	25.712	8.457	8.741
10	76.80	45.19	000	24.035	15.740	5.410
11	64.11	70.66	000	29.936	36.953	3.773
12	61.35	75.67	000	25.275	45.939	1.461
13	59.61	78.32	000	22.423	55.404	496
14	58.28	79.40	000	20.921	58.315	112
15	56.98	80.91	000	19.873	60.979	085
16	57.03	95.29	000	14.210	71.077	008
17	58.20	96.48	000	12.637	73.847	000 -215-

18	59.76	84.94	000	14.458	10.447	000
19	59.34	84.45	001	14.951	69.502	000
20	58.17	83.81	007	14.959	65.346	000
21	55.72	82.08	054	16.875	65.147	000
22	54.72	87.27	409	17.624	69.240	000
23	47.71	107.89	3.192	16.980	87.714	000
24	49.23	128.39	2.087	10.564	115.743	000
	49.12	151.50	1.998	7.824	141.777	000
26	48.92	175.91	2.130	5.472	167.289	000
27	49.45	190.93	2.599	6.057	182.576	000
28	48.43	119.14	2.764	5.196	110.182	000
29	40.19	91.19	5.877	5.048	80.264	000
30	26.43	80.00	22.245	2.731	55.023	000

ETAPA	TEMP	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON VAPOR)			
1	90.09	50.93	000	25.825	5.036	20.073
2	89.66	51.33	000	25.528	6.463	19.337
3	89.22	51.68	000	25.525	7.371	18.283
4	88.72	52.04	000	25.565	9.366	17.110
5	88.12	52.44	000	25.561	11.013	15.864
6	87.41	52.89	000	25.474	12.867	14.547
7	86.56	52.47	000	24.829	14.715	12.925
8	85.30	53.11	000	24.465	17.509	11.135
9	80.86	55.19	000	22.589	24.753	7.804
10	70.80	60.66	000	17.952	39.638	3.773
11	64.11	65.67	000	13.187	51.024	1.441
12	61.33	68.32	000	10.138	57.458	0.786
13	59.61	69.40	000	8.837	60.399	1.62
14	58.28	70.91	000	7.789	63.063	0.055
15	56.99	75.29	000	2.125	73.161	0.005
	57.03	76.48	000	5.52	75.932	0.00
	58.20	74.94	000	2.373	72.564	0.00
18	58.76	74.45	001	2.866	71.586	0.00
19	59.34	73.81	007	2.874	70.830	0.00
20	58.17	72.08	054	4.791	67.232	0.00
21	55.72	82.23	409	5.540	76.285	0.00
22	54.72	102.85	3.192	4.895	94.758	0.00
23	47.71	173.34	27.087	10.980	135.271	0.00
24	49.23	196.44	26.898	8.239	161.705	0.00
25	49.12	220.79	27.130	6.908	186.750	0.00
26	48.92	234.19	27.599	6.473	200.118	0.00
27	49.45	162.40	27.764	6.611	128.024	0.00
28	48.43	131.19	30.977	5.463	94.848	0.00
29	40.19	120.00	47.245	3.147	69.600	0.00
30	26.43	40.00	25.000	4.415	14.584	0.00

RESIDUO = 201E+06

ETAPA	TEMP	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON LIQUIDOS)			
1	90.03	40.00	000	13.972	3.465	22.563
2	89.63	90.18	000	19.457	8.454	42.268
3	89.19	90.56	000	19.146	9.369	41.549
4	88.69	90.91	000	19.137	11.258	40.517
5	88.10	91.27	000	19.173	12.724	39.376
6	87.40	91.66	000	19.158	14.333	38.144
7	86.56	92.09	000	19.084	16.136	36.872
8	85.44	91.66	000	25.751	5.415	19.293
9	81.17	42.22	000	25.668	7.966	9.590
10	71.34	44.17	000	23.904	5.439	5.439
11	63.67	69.23	000	20.110	35.249	2.870
12	60.25	74.26	000	25.335	17.307	1.582
13	58.94	77.23	000	25.350	54.365	514

14	58.42	78.64	.000	20.705	57.77c	.166
15	58.11	79.26	.000	19.902	59.301	.053
16	58.03	79.64	.000	19.537	60.083	.016
17	58.16	79.70	.000	19.588	60.105	.005
18	58.27	79.57	.000	19.735	59.831	.002
19	58.34	79.58	.001	19.683	59.900	.000
20	58.15	79.57	.008	19.630	59.928	.000
.	57.56	79.43	.055	19.496	59.877	.000
22	56.02	78.83	.392	19.387	59.047	.000
23	49.32	75.99	2.554	18.992	54.443	.000
24	50.44	94.07	1.483	9.486	83.105	.000
25	50.14	100.02	1.346	6.901	91.777	.000
26	49.87	123.89	1.301	5.297	117.289	.000
27	49.91	137.71	1.345	4.088	132.276	.000
28	48.73	96.79	1.453	2.953	92.382	.000
29	39.86	91.99	4.686	2.465	84.834	.000
30	26.06	80.00	21.988	1.237	56.775	.000

ETAPA TEMP. FLUJO TOTAL FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON VAPOR)

1	90.03	50.18	.000	25.466	4.989	19.722
2	89.63	50.56	.000	25.155	6.404	19.006
3	89.19	50.91	.000	25.145	7.793	17.974
4	88.69	51.27	.000	25.181	9.259	16.827
5	88.10	51.66	.000	25.177	10.868	15.611
6	87.40	52.09	.000	25.092	12.671	14.329
7	86.56	51.66	.000	24.459	14.454	12.750
8	85.44	52.22	.000	24.176	17.001	11.047
9	81.17	54.17	.000	22.412	23.873	7.886
10	71.34	59.23	.000	17.799	37.559	3.876
11	63.67	64.26	.000	13.124	49.638	1.502
.	60.25	67.23	.000	10.039	56.679	.514
.	58.94	68.64	.000	8.394	60.083	.166
14	58.42	69.26	.000	7.591	61.612	.053
15	58.11	69.64	.000	7.226	62.393	.016
16	58.03	69.70	.000	7.277	62.415	.005
17	58.16	69.57	.000	7.424	62.142	.002
18	58.27	69.58	.001	7.372	62.210	.000
19	58.34	69.57	.008	7.319	62.239	.000
20	58.15	69.43	.055	7.185	62.188	.000
21	57.56	68.83	.392	7.076	61.357	.000
22	56.02	65.99	2.554	6.681	56.754	.000
23	49.32	134.07	26.483	9.675	97.916	.000
24	50.44	144.74	26.346	7.090	111.305	.000
25	50.14	168.54	26.301	5.486	136.750	.000
26	49.87	180.74	26.345	4.277	150.118	.000
27	49.91	136.79	26.453	3.142	107.193	.000
28	48.73	131.99	29.686	2.654	99.645	.000
29	39.86	120.00	46.988	1.426	71.586	.000
30	26.06	40.00	25.000	.189	14.811	.000

RESIDUO = .444E+05

ETAPA TEMP. FLUJO TOTAL FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON LIQUIDOS)

1	90.03	40.00	.000	13.997	3.467	22.536
	89.63	90.09	.000	39.416	8.453	42.224
3	89.19	90.48	.000	39.108	9.866	41.506
4	88.68	90.83	.000	39.099	11.253	40.475
5	88.10	91.18	.000	39.136	12.717	39.329
6	87.40	91.57	.000	39.131	14.323	38.115
7	86.56	92.01	.000	39.047	16.122	36.877
8	85.45	41.57	.000	25.915	5.398	10.261
9	81.21	42.13	.000	25.636	7.928	8.569



10	71.44	44.07	000	23.887	14.752	5.428
11	63.66	69.08	000	70.146	35.017	3.890
12	60.15	74.10	000	25.457	47.136	1.511
13	58.89	77.11	000	22.365	54.224	.517
14	58.43	78.53	000	20.722	57.640	.167
15	58.25	79.16	000	19.927	59.181	.053
16	58.19	79.44	000	19.559	59.864	.017
	58.17	79.56	000	19.393	60.166	.005
18	58.16	79.62	000	19.320	60.296	.002
19	58.16	79.64	.001	19.286	60.352	.001
20	58.12	79.63	.007	19.270	60.357	.000
21	57.92	79.56	.052	19.248	60.256	.000
22	56.65	79.02	.374	19.143	59.506	.000
23	49.82	76.05	2.478	18.533	55.036	.000
24	50.88	93.95	1.485	9.435	83.027	.000
25	50.60	94.98	1.346	6.801	86.831	.000
26	50.35	95.94	1.286	5.199	89.458	.000
27	50.12	96.44	1.429	4.097	90.917	.000
28	48.78	96.48	1.590	2.995	91.890	.000
29	39.84	91.96	4.654	2.191	85.115	.000
30	25.99	80.00	21.919	1.070	57.011	.000

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON VAPOR)		
1	90.03	50.09	.000	25.419	4.986	19.687
2	89.63	50.48	.000	25.112	6.399	18.969
3	89.19	50.83	.000	25.103	7.786	17.938
4	88.68	51.18	.000	25.139	9.250	16.793
5	88.10	51.57	.000	25.135	10.856	15.579
6	87.40	52.01	.000	25.050	12.655	14.300
7	86.56	51.57	.000	24.418	14.411	12.725
	85.45	52.13	.000	24.139	16.961	11.032
	81.21	54.07	.000	22.390	23.785	7.892
10	71.44	59.08	.000	17.802	37.385	3.890
11	63.66	64.10	.000	13.119	49.474	1.511
12	60.15	67.11	.000	10.027	56.562	.517
13	58.89	68.53	.000	8.384	59.978	.167
14	58.43	69.16	.000	7.590	61.519	.053
15	58.25	69.44	.000	7.222	62.202	.017
16	58.19	69.56	.000	7.056	62.503	.005
17	58.17	69.62	.000	6.982	62.634	.002
18	58.16	69.64	.001	6.948	62.689	.001
19	58.16	69.63	.007	6.932	62.695	.000
20	58.12	69.56	.052	6.911	62.593	.000
21	57.92	69.02	.374	6.806	61.844	.000
22	56.65	66.05	2.478	6.195	57.373	.000
23	49.82	133.95	26.485	9.597	97.864	.000
24	50.88	134.98	26.346	6.963	101.668	.000
25	50.60	135.94	26.286	5.361	104.296	.000
26	50.35	136.44	26.429	4.260	105.755	.000
27	50.12	136.48	26.590	3.158	106.728	.000
28	48.78	131.96	29.654	2.354	99.953	.000
29	39.84	120.00	46.919	1.232	71.849	.000
30	25.99	40.00	25.000	.162	14.838	.000

RESIDUO = .563E+04

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE	(TODOS SON LIQUIDOS)		
1	90.03	40.00	.000	13.995	3.466	22.538
2	89.63	90.12	.000	39.428	8.453	42.237
3	89.19	90.51	.000	39.120	9.867	41.519
4	88.68	90.85	.000	39.111	11.255	40.487
5	88.10	91.21	.000	39.148	12.720	39.341

6	87.40	91.60	.000	39.143	14.327	38.126
7	86.56	92.03	.000	39.059	16.127	36.846
8	85.44	41.60	.000	25.926	5.406	10.269
9	81.20	42.16	.000	25.645	7.944	8.573
10	71.43	44.10	.000	23.892	14.783	5.428
11	63.65	69.12	.000	30.133	35.097	3.887
12	60.14	74.14	.000	25.448	47.187	1.509
	58.89	77.15	.000	22.356	54.275	.517
14	58.43	78.57	.000	20.714	57.690	.167
15	58.26	79.20	.000	19.920	59.230	.053
16	59.19	79.48	.000	19.553	59.911	.017
17	58.17	79.60	.000	19.387	60.209	.005
18	58.15	79.65	.000	19.313	60.338	.002
19	58.15	79.67	.001	19.280	60.392	.001
20	58.12	79.67	.007	19.264	60.402	.000
21	57.94	79.60	.052	19.243	60.305	.000
22	56.68	79.07	.374	19.139	59.555	.000
23	49.85	76.08	2.477	18.530	55.077	.000
24	50.93	93.99	1.485	9.433	83.075	.000
25	50.70	95.03	1.361	6.794	86.876	.000
26	50.55	96.02	1.292	5.151	89.576	.000
27	50.29	96.61	1.281	4.019	91.308	.000
28	48.79	96.35	1.601	3.160	91.586	.000
29	39.85	91.92	4.669	2.304	84.951	.000
30	26.00	80.00	21.922	1.122	56.956	.000

ETAPA TEMP. FLUJO TOTAL FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON VAPOR)

1	90.03	50.12	.000	25.432	4.987	19.699
2	89.63	50.51	.000	25.125	6.400	18.981
3	89.19	50.85	.000	25.116	7.788	17.949
	88.68	51.21	.000	25.152	9.253	16.803
	88.10	51.60	.000	25.148	10.860	15.588
6	87.40	52.03	.000	25.064	12.661	14.308
7	86.56	51.60	.000	24.431	14.440	12.731
8	85.44	52.16	.000	24.150	16.977	11.035
9	81.20	54.10	.000	22.396	23.817	7.890
10	71.43	59.12	.000	17.803	37.427	3.887
11	63.65	64.14	.000	13.118	49.517	1.509
12	60.14	67.15	.000	10.026	56.605	.517
13	58.89	68.57	.000	8.384	60.019	.167
14	58.43	69.20	.000	7.590	61.560	.053
15	58.26	69.48	.000	7.223	62.240	.017
16	58.19	69.60	.000	7.057	62.538	.005
17	58.17	69.65	.000	6.983	62.668	.002
18	58.15	69.67	.001	6.950	62.722	.001
19	58.15	69.67	.007	6.934	62.732	.000
20	58.12	69.60	.052	6.913	62.635	.000
21	57.94	69.07	.374	6.809	61.885	.000
22	56.68	66.08	2.477	6.200	57.407	.000
23	49.85	133.99	26.485	9.603	97.905	.000
24	50.93	135.03	26.361	6.964	101.706	.000
25	50.70	136.02	26.292	5.322	104.406	.000
26	50.55	136.61	26.281	4.189	106.138	.000
27	50.29	136.35	26.601	3.330	106.416	.000
28	48.79	131.92	29.669	2.474	99.781	.000
29	39.85	120.00	46.922	1.292	71.785	.000
	26.00	40.00	25.000	.170	14.830	.000

RESIDUO = .875E+00

ETAPA TEMP. FLUJO TOTAL FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON LIQUIDOS) -

1	90.03	40.00	.000	13.995	3.466	22.538
---	-------	-------	------	--------	-------	--------

2	89.63	90.12	000	39.428	8.453	42.237
3	87.19	90.51	000	39.120	9.867	41.519
4	88.68	90.85	000	39.111	11.255	40.487
5	88.10	91.21	000	39.147	12.720	39.341
6	87.40	91.60	000	39.143	14.327	38.126
7	86.56	92.03	000	39.059	16.127	36.846
8	85.44	41.60	000	25.926	5.406	10.269
	81.20	42.16	000	25.645	7.943	8.573
10	71.43	44.10	000	23.892	14.782	5.428
11	63.65	69.12	000	30.133	35.096	3.887
12	60.14	74.14	000	25.448	47.186	1.509
13	58.89	77.15	000	22.356	54.275	.517
14	58.43	78.57	000	20.714	57.689	.167
15	58.26	79.20	000	19.921	59.230	.053
16	58.19	79.48	000	19.553	59.910	.017
17	58.17	79.60	000	19.387	60.208	.005
18	58.15	79.65	000	19.313	60.337	.002
19	58.15	79.67	001	19.280	60.391	.001
20	58.12	79.67	.007	19.264	60.401	.000
21	57.94	79.60	.052	19.244	60.305	.000
22	56.68	79.07	.374	19.140	59.555	.000
23	49.85	76.08	2.477	18.530	55.077	.000
24	50.93	93.99	1.484	9.433	83.074	.000
25	50.71	95.03	1.360	6.794	86.877	.000
26	50.55	96.02	1.292	5.151	89.578	.000
27	50.30	96.61	1.281	4.018	91.307	.000
28	48.79	96.35	1.601	3.158	91.586	.000
29	39.85	91.92	4.669	2.302	84.952	.000
30	26.00	80.00	21.922	1.121	56.957	.000

ETAPA	TEMP.	FLUJO TOTAL	FLUJO POR COMPONENTE (TODOS SON VAPOR)			
	90.03	50.12	.000	25.432	4.987	19.699
2	89.63	50.51	.000	25.124	6.400	18.981
3	89.19	50.85	.000	25.115	7.788	17.949
4	88.68	51.21	.000	25.152	9.253	16.803
5	88.10	51.60	.000	25.148	10.860	15.588
6	87.40	52.03	.000	25.063	12.661	14.308
7	86.56	51.60	.000	24.431	14.440	12.731
8	85.44	52.16	.000	24.150	16.977	11.035
9	81.20	54.10	.000	22.396	23.816	7.890
10	71.43	59.12	.000	17.803	37.426	3.887
11	63.65	64.14	.000	13.118	49.516	1.509
12	60.14	67.15	.000	10.026	56.604	.517
13	58.89	68.57	.000	8.384	60.019	.167
14	58.43	69.20	.000	7.590	61.560	.053
15	58.26	69.48	.000	7.223	62.240	.017
16	58.19	69.60	.000	7.057	62.538	.005
17	58.17	69.65	.000	6.983	62.667	.002
18	58.15	69.67	.001	6.950	62.721	.001
19	58.15	69.67	.007	6.934	62.731	.000
20	58.12	69.60	.052	6.914	62.635	.000
21	57.94	69.07	.374	6.809	61.885	.000
22	56.68	66.08	2.477	6.200	57.407	.000
23	49.85	133.99	26.484	9.603	97.904	.000
24	50.93	135.03	26.360	6.964	101.707	.000
25	50.71	136.02	26.292	5.321	104.408	.000
	50.55	136.61	26.281	4.188	106.137	.000
c /	50.30	136.35	26.601	3.328	106.416	.000
28	48.79	131.92	29.669	2.472	99.782	.000
29	39.85	120.00	46.922	1.291	71.786	.000
30	26.00	40.00	25.000	.170	14.830	.000

RESIDUO = .207E-03

FLUJO DE PRODUCTO,FASE LIQUIDA

1	.000	13.995	3.466	22.538
2	.000	.000	.000	.000
3	.000	.000	.000	.000
4	.000	.000	.000	.000
	.000	.000	.000	.000
6	.000	.000	.000	.000
7	.000	.000	.000	.000
8	.000	.000	.000	.000
9	.000	.000	.000	.000
10	.000	10.835	6.704	2.462
11	.000	.000	.000	.000
12	.000	.000	.000	.000
13	.000	.000	.000	.000
14	.000	.000	.000	.000
15	.000	.000	.000	.000
16	.000	.000	.000	.000
17	.000	.000	.000	.000
18	.000	.000	.000	.000
19	.000	.000	.000	.000
20	.000	.000	.000	.000
21	.000	.000	.000	.000
22	.000	.000	.000	.000
23	.000	.000	.000	.000
24	.000	.000	.000	.000
25	.000	.000	.000	.000
26	.000	.000	.000	.000
27	.000	.000	.000	.000
28	.000	.000	.000	.000
29	.000	.000	.000	.000
30	.000	.000	.000	.000

FLUJO DE PRODUCTO,FASE VAPOR

1	.000	.000	.000	.000
2	.000	.000	.000	.000
3	.000	.000	.000	.000
4	.000	.000	.000	.000
5	.000	.000	.000	.000
6	.000	.000	.000	.000
7	.000	.000	.000	.000
8	.000	.000	.000	.000
9	.000	.000	.000	.000
10	.000	.000	.000	.000
11	.000	.000	.000	.000
12	.000	.000	.000	.000
13	.000	.000	.000	.000
14	.000	.000	.000	.000
15	.000	.000	.000	.000
16	.000	.000	.000	.000
17	.000	.000	.000	.000
18	.000	.000	.000	.000
19	.000	.000	.000	.000
20	.000	.000	.000	.000
21	.000	.000	.000	.000
	.000	.000	.000	.000
23	.000	.000	.000	.000
24	.000	.000	.000	.000
25	.000	.000	.000	.000
26	.000	.000	.000	.000
27	.000	.000	.000	.000
28	.000	.000	.000	.000
29	.000	.000	.000	.000

30	25.000	.170	14.830	.000
----	--------	------	--------	------

PERFIL DEL FACTOR K EN LA COLUMNA

1	5.581	1.450	1.148	.698
2	6.295	1.127	1.475	.786
3	6.417	1.139	1.509	.748
4	6.567	1.138	1.554	.712
5	6.723	1.132	1.601	.675
6	6.879	1.121	1.646	.633
7	7.032	1.107	1.686	.586
8	8.920	.736	2.655	.796
9	9.025	.646	2.598	.579
10	8.713	.467	2.135	.255
11	8.811	.374	1.637	.097
12	9.666	.366	1.372	.045
13	10.511	.382	1.264	.028
14	11.017	.396	1.220	.022
15	11.267	.404	1.201	.019
16	11.381	.408	1.194	.018
17	11.432	.410	1.190	.018
18	11.454	.411	1.189	.018
19	11.462	.411	1.188	.018
20	11.455	.410	1.187	.018
21	11.378	.406	1.180	.018
22	10.842	.379	1.138	.017
23	8.181	.255	.928	.014
24	12.294	.428	.863	.010
25	13.442	.472	.846	.009
26	14.270	.504	.837	.009
27	14.795	.522	.827	.008
28	14.297	.497	.785	.008
29	9.099	.293	.574	.005
30	2.647	.104	.384	.002

PERFIL DE FRACCION MOL EN LA COLUMNA(FASE LIQUIDA)

1	.000	.350	.087	.563
2	.000	.438	.094	.469
3	.000	.432	.109	.459
4	.000	.430	.124	.446
5	.000	.429	.139	.431
6	.000	.427	.156	.416
7	.000	.424	.175	.400
8	.000	.623	.130	.247
9	.000	.608	.188	.203
10	.000	.542	.335	.123
11	.000	.436	.508	.056
12	.000	.343	.636	.020
13	.000	.290	.704	.007
14	.000	.264	.734	.002
15	.000	.252	.748	.001
16	.000	.246	.754	.000
	.000	.244	.756	.000
18	.000	.242	.758	.000
19	.000	.242	.758	.000
20	.000	.242	.758	.000
21	.001	.242	.758	.000
22	.005	.242	.753	.000
23	.033	.244	.734	.000
24	.016	.100	.884	.000

25	.014	.071	.914	.000
26	.013	.054	.933	.000
27	.013	.042	.945	.000
28	.017	.033	.951	.000
29	.051	.025	.924	.000
30	.274	.014	.712	.000

PERFIL DE FRACCION MOL EN LA COLUMNA(FASE VAPOR)

1	.000	.507	.100	.393
2	.000	.497	.127	.376
3	.000	.494	.153	.353
4	.000	.491	.181	.328
5	.000	.487	.210	.302
6	.000	.482	.243	.275
7	.000	.473	.280	.247
8	.000	.463	.325	.212
9	.000	.414	.440	.146
10	.000	.301	.633	.066
11	.000	.205	.772	.024
12	.000	.149	.843	.008
13	.000	.122	.875	.002
14	.000	.110	.890	.001
15	.000	.104	.896	.000
16	.000	.101	.899	.000
17	.000	.100	.900	.000
18	.000	.100	.900	.000
19	.000	.100	.900	.000
20	.001	.099	.900	.000
21	.005	.099	.896	.000
22	.037	.094	.869	.000
23	.198	.072	.731	.000
24	.195	.052	.753	.000
25	.193	.039	.768	.000
26	.192	.031	.777	.000
27	.195	.024	.780	.000
28	.225	.019	.756	.000
29	.391	.011	.598	.000
30	.625	.004	.371	.000

EL CALOR A SER ALIMENTADO AL REBOILER ES .4609E+06(CAL/HR)

EL CALOR A SER REMOVIDO POR EL CONDENSADOR ES .6353E+06(CAL/HR)

TABLA D.5 RESULTADOS COMPUTACIONALES DEL SISTEMA I.  
 CALCULO DEL COEF. VIRIAL B(I,J)

MEZCLA DE CUATRO COMPONENTES

1 ETANOL, 2 AGUA  
 3 PROPANOL, 4 AC. ACETICO

COMPONENTE	PC EN ATM	RD EN A	DMU EN DEB.	ETA	T C EN K
1	48.600	3.004	.000	.000	562.100
2	54.000	3.178	1.020	.000	536.600
3	47.000	2.740	2.880	.900	509.100
4	37.800	3.348	1.780	.530	523.300

PARAMETROS DE SOLVACION

	1	2	3	4
1	.000	.120	.500	.600
2	.120	.000	1.260	1.650
3	.500	1.260	.900	1.100
4	.600	1.650	1.100	.530

COEFICIENTES VIRIALES

TEMPERATURA= 323.200

	1	2	3	4
1	-1194.383	-1131.541	-1047.058	-1473.418
2	-1131.541	-1194.383	-1588.842	-2449.529
3	-1047.058	-1588.842	-1194.383	-1802.612
4	-1473.418	-2449.529	-1802.612	-1521.778

TEMPERATURA= 333.200

	1	2	3	4
1	-1100.828	-1046.669	-973.301	-1358.311
2	-1046.669	-1100.828	-1402.772	-2091.558
3	-973.301	-1402.772	-1100.828	-1620.179
4	-1358.311	-2091.558	-1620.179	-1403.752

TEMPERATURA= 353.200

	1	2	3	4
1	-947.400	-906.578	-849.080	-1168.381
2	-906.578	-947.400	-1122.576	-1587.891
3	-849.080	-1122.576	-947.400	-1335.336
4	-1168.381	-1587.891	-1335.336	-1207.690

TEMPERATURA= 368.000

	1	2	3	4
1	-855.724	-822.280	-772.818	-1054.301
2	-822.280	-855.724	-969.804	-1332.331
3	-772.818	-969.804	-855.724	-1173.986
4	-1054.301	-1332.331	-1173.986	-1089.183

TABLA D.6 RESULTADOS COMPUTACIONALES DEL SISTEMA 2.  
CALCULO DEL COEF VIRIAL B(I,J)

MEZCLA DE CUATRO COMPONENTES  
1 DICLOROETANO, 2 N-PROPANGL  
3 ILUENO, 4 ACETONA

COMPONENTE	PC EN ATM	RD EN A	DMU EN DEB.	ETA	T C EN °
1	53.000	.100	2.851	.000	560.900
2	47.000	2.726	1.660	1.320	508.400
3	41.600	3.443	.360	.000	592.000
4	47.000	2.740	2.880	.900	509.100

PARAMETROS DE SOLVATACION

	1	2	3	4
1	.000	.000	.000	.000
2	.000	1.320	.000	1.000
3	.000	.000	.000	.500
4	.000	1.000	.500	.900

COEFICIENTES VIRIALES

TEMPERATURA= 320.000

	1	2	3	4
1	-1489.483	-928.175	-1075.962	-1150.062
2	-928.175	-1489.483	-1075.962	-1892.916
3	-1075.962	-1075.962	-1489.463	-1483.846
4	-1150.062	-1892.910	-1483.846	-1489.283

TEMPERATURA= 340.000

	1	2	3	4
1	-1267.738	-797.219	-933.574	-967.743
2	-797.219	-1267.738	-933.574	-1529.911
3	-933.574	-933.574	-1267.738	-1253.977
4	-967.743	-1529.911	-1253.977	-1206.350

TEMPERATURA= 360.000

	1	2	3	4
1	-1092.489	-692.769	-821.143	-824.669
2	-692.769	-1092.489	-821.143	-1263.136
3	-821.143	-821.143	-1092.489	-1073.803
4	-824.669	-1263.136	-1073.803	-996.947

TEMPERATURA= 380.000

	1	2	3	4
1	-951.468	-607.886	-729.981	-710.448
2	-607.886	-951.468	-729.981	-1061.213
3	-729.981	-729.981	-951.468	-930.029
4	-710.448	-1061.213	-930.029	-837.953