

La Computación Aplicada a la
Enseñanza de la Ingeniería Química

319

T E S I S

Que para obtener el título de :

Ingeniero Químico

P r e s e n t a n :

José Agustín Moreno Garza

Gerardo Navarro Cota



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

CLAS. Tesis

ADQ. 1976

FECHA 1976

PROC. ML

309



QUIMICA

Jurado asignado originalmente según el tema

PRESIDENTE	ING. OTHON CANALES VALVERDE
VOCAL	ING. ALEJANDRO LOZADA CAÑIBE
SECRETARIO	ING. ENRIQUE BRAVO MEDINA
1er. SUPLENTE	ING. JOSE ANTONIO GUERRERO MORALES
2do. SUPLENTE	ING. GERARDO RODRIGUEZ ALONSO

Sitio donde se desarrolló el tema

CENTRO DE SERVICIOS DE COMPUTO, U.N.A.M.

Nombre de los sustentantes

JOSE AGUSTIN MORENO GARZA

GERARDO NAVARRO COTA

Asesor del Tema

ING. ENRIQUE BRAVO MEDINA

INDICE

1.	INTRODUCCION	1
2.	CALCULO DE PROPIEDADES	
2.1	Métodos de evaluación	4
2.1.1	Densidad	5
2.1.2	Entalpia	11
2.1.3	Capacidad calorífica	15
2.1.4	Calor latente de vaporización	17
2.1.5	Presión de vapor	20
2.1.6	Tensión superficial	24
2.1.7	Viscosidad	27
2.1.8	Conductividad térmica	34
2.2	Cálculo de equilibrio de fase	41
2.2.1	Constante de equilibrio	43
2.2.2	Puntos de burbuja y rocío	51
2.2.3	Análisis de fase	53
2.2.4	Cálculo de un tanque separador en un proceso adiabático	57
2.3	Descripción del programa Propiedades en Fortran IV	60

2.3.1	Análisis de subrutinas	62
2.3.2	Datos de operación	69
2.3.3	Resultados del programa Propiedades	77
3.	DESARROLLO DE PROGRAMAS	
3.1	Balance de masa en un proceso cíclico	87
3.2	Cálculo de la temperatura de flama teórica en la combustión de hidrocarburos	95
3.3	Cálculo de la potencia de una bomba centrífuga	102
3.4	Análisis del rendimiento de un intercambiador de tubo y coraza existente	107
3.5	Cálculo y optimización de un evaporador	116
3.6	Diseño y costo de una torre de destilación fraccionada y su equipo	127
3.7	Diseño de un reactor catalítico de lecho fijo para la síntesis de acetato de vinilo	138
4.	CONCLUSIONES	146
5.	BIBLIOGRAFIA	148
	APENDICE	151

CAPITULO 1

INTRODUCCION

El campo que le ofrece al Ingeniero Químico el desarrollo industrial y petroquímico de nuestro país lo obliga al conocimiento, desarrollo y aplicación de nuevas técnicas en el diseño, administración y realización de nuevos proyectos, así como a la optimización de los existentes.

Esta visión que se nos presenta al inicio de nuestra vida profesional, aunada a una serie de inquietudes que se provocaron por la falta de realización de ideas enfocadas a resolver problemas inherentes a las materias cursadas, muchas veces por falta de recursos o de tiempo para concretar resultados intuïdos, debido a la complejidad de los cálculos o al manejo de la información existente, nos llevó a realizar este trabajo.

Un problema de Ingeniería Química, como lo puede ser la relación costo-diámetro de un sistema de tuberías, la optimización de un evaporador de múltiple efecto o el cálculo de una torre de destilación, puede su resolución, ser intentada por el estudiante aplicando correlaciones que muchas veces no lo llevan a ningún resultado por la falta de datos o porque requiere de un procedimiento iterativo en el cual necesita repetir sus cálculos a costa de muchas horas; por lo que si se le diera la facilidad de obtener resultados rápidos y exactos, además de la posibilidad de modificar variables y condiciones de una manera

sencilla, podría tener un panorama mas objetivo del problema.

El propósito de esta tesis es el de proporcionar al estudiante de Ingeniería Química las bases para ampliar su entendimiento de los conceptos básicos e incrementar su habilidad para interpretar y analizar nuevas situaciones; al profesorado, darles la facilidad para poder desarrollar sus programas de estudio de una manera mas extensiva y proponer a las autoridades universitarias la creación de una biblioteca de programas de computadora dentro de las instalaciones del Centro de Servicios de Cómputo al alcance del estudiante, así como instituir la cátedra de Programación y Computación como obligatoria dentro del Plan de Estudios de la carrera de Ingeniería Química.

El trabajo se enfocará primeramente a seleccionar los métodos de predicción de propiedades tomando en cuenta los siguientes factores:

- a) Un estudio preliminar de tipo teórico para definir, en principio, si el método es aplicable al cálculo de propiedades físicas y termodinámicas de sistemas de hidrocarburos.
- b) La elección se restringe a métodos que sean programables para el cálculo por medio de computadoras, dando resultados exactos en amplios límites de operación y alimentándose con datos sencillos.

Una vez seleccionados los métodos, se adaptarán en un programa de computadora para que trabaje como simulador de corrientes, el cual puede ser aplicado a casi cualquier cálculo en mezclas de hidrocarburos,

En el Capítulo 3 se presentará una descripción teórica y técnica de problemas comunes en la carrera de Ingeniería Química, así como un programa para la resolución de dichos problemas.

CAPITULO 2

CALCULO DE PROPIEDADES

2.1 Métodos de evaluación.

La determinación experimental de una propiedad física ó fisicoquímica de un compuesto ó mezcla fué durante muchos años la única fuente de información para el ingeniero en diseño; sin embargo, debido al rápido avance de la tecnología, estos datos experimentales se han traducido a ecuaciones teóricas y a correlaciones empíricas ó semiempíricas, muchas de las cuales no habían sido utilizadas, debido a su complejidad, hasta la aparición de computadoras digitales de alta velocidad.

Este desarrollo de la ciencia nos ha proporcionado un sinnúmero de técnicas de cálculo de las diversas propiedades, lo cual nos lleva al problema de poder seleccionar, para cada propiedad, un método confiable por su exactitud y que puede ser utilizado en una amplia gama de condiciones. Otro factor muy importante, que se tomó en cuenta en este trabajo para dicha selección, fué el hecho de que el método sea alimentado con datos disponibles en libros comunes para el estudiante de Ingeniería Química.

En el presente capítulo, se presenta una breve descripción de los métodos seleccionados para el cálculo de cada una de las propiedades que se consideraron en este trabajo.

2.1.1 Densidad

La densidad es definida como la cantidad de masa en una unidad de volumen. Esta propiedad intensiva nos relaciona, en fluidos, los flujos volumétricos con flujos máscicos y es la base para dimensionar el equipo de transporte. Es de importancia considerar el efecto de la temperatura a presión constante sobre el volumen, el cual es utilizado para calcular el efecto de la presión en la entalpía y en otras propiedades termodinámicas.

La evaluación de la densidad de gases y líquidos por una ecuación de estado es el método mas apropiado debido a su exactitud para las dos fases; la ecuación de los gases ideales ha sido la base para el desarrollo de ecuaciones de estado muy complejas; en este trabajo presentamos la ecuación de Starling-Han, la cual es una modificación de la ecuación de Benedict-Webb-Rubbin, que ha dado magníficos resultados, aún en condiciones de alta densidad y baja temperatura.

La forma de esta ecuación es la siguiente:

$$\begin{aligned}
 P = & \rho RT + (B_0 RT - A_0 - \frac{C_0}{T^2} + \frac{D_0}{T^3} - \frac{E_0}{T^4}) \rho^2 \\
 & + (bRT - a - \frac{d}{T}) \rho^3 + \alpha (a + \frac{d}{T}) \rho^6 \\
 & + \frac{c \rho^3}{T^2} (1 + \gamma \rho^2) \exp(-\gamma \rho^2)
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

Esta ecuación de procedimiento iterativo involucra un total de once constantes, las cuales son calculadas para cada compuesto a partir de datos sencillos tales como el factor acéntrico, el volumen crítico, la temperatura crítica, por la constante de los gases, R y las constantes propuestas por Starling-Han, las cuales se presentan en la tabla 2.1.

Las relaciones para el cálculo de cada constante son:

$$p_{ci} B_{0i} = A_1 + B_1 w_i \dots \dots \dots (2.2)$$

$$\frac{p_{ci} A_{0i}}{R T_{ci}} = A_2 + B_2 w_i \dots \dots \dots (2.3)$$

$$\frac{p_{ci} C_{0i}}{R T_{ci}^3} = A_3 + B_3 w_i \dots \dots \dots (2.4)$$

$$p_{ci}^2 \gamma_i = A_4 + B_4 w_i \dots \dots \dots (2.5)$$

$$p_{ci}^2 b_i = A_5 + B_5 w_i \dots \dots \dots (2.6)$$

$$\frac{p_{ci}^2 a_i}{R T_{ci}} = A_6 + B_6 w_i \dots \dots \dots (2.7)$$

$$\frac{p_{ci}^2 c_i}{R T_{ci}^3} = A_8 + B_8 w_i \dots \dots \dots (2.8)$$

$$p_{ci}^3 \alpha_i = A_7 + B_7 w_i \dots \dots \dots (2.9)$$

$$\frac{p_{ci} D_{0i}}{R T_{ci}^4} = A_9 + B_9 w_i \dots \dots \dots (2.10)$$

$$\frac{p_{ci}^3 d_i}{R T_{ci}^4} = A_{10} + B_{10} w_i \dots \dots \dots (2.11)$$

$$\frac{P_{ci} E_{ci}}{R T_{ci}^5} = A_{ii} + B_{ii} W_i \exp(-3.8 W_i) \quad (2.12)$$

donde:

$$R = 10.7335 \text{ psia-ft}^3/\text{lb mol} \cdot ^\circ\text{R}$$

$$W_i = \text{factor acéntrico.}$$

$$A_j, B_j = \text{constantes propuestas por Starling-Han.}$$

Para el cálculo de la densidad de compuestos puros, se utilizan las constantes anteriormente calculadas de una manera directa en la ecuación 2.1; en el caso de mezclas de n componentes se utilizaron las siguientes reglas de mezcla:

$$A_o = \sum_i \sum_j x_i x_j A_{oi}^{\frac{1}{2}} A_{oj}^{\frac{1}{2}} (1 - K_{ij}) \quad (2.13)$$

$$C_o = \sum_i \sum_j x_i x_j C_{oi}^{\frac{1}{2}} C_{oj}^{\frac{1}{2}} (1 - K_{ij})^3 \quad (2.14)$$

$$\gamma = \left\{ \sum_i x_i \gamma_i^{\frac{1}{2}} \right\}^2 \quad (2.15)$$

$$b = \left[\sum_i x_i b_i^{\frac{1}{3}} \right]^3 \quad (2.16)$$

$$a = \left[\sum_i x_i a_i^{\frac{1}{3}} \right]^3 \quad (2.17)$$

$$\alpha = \left[\sum_i x_i \alpha_i^{\frac{1}{3}} \right]^3 \quad (2.18)$$

$$c = \left[\sum_i x_i c_i^{\frac{1}{3}} \right]^3 \quad (2.19)$$

$$D_o = \sum_i \sum_j x_i x_j D_{oi}^{\frac{1}{2}} D_{oj}^{\frac{1}{2}} (1 - K_{ij})^4 \quad (2.20)$$

$$d = \left[\sum_L x_i d_i^{\frac{1}{3}} \right]^3 \quad (2.21)$$

$$E_o = \sum_L \sum_J x_i x_j E_{oi}^{\frac{1}{2}} E_{oj}^{\frac{1}{2}} (1 - K_{ij})^5 \quad (2.22)$$

$$B_o = \sum_L x_i B_{oi} \quad (2.23)$$

El parámetro de interacción k_{ij} es una medida de las desviaciones del comportamiento de una solución ideal entre uno u otro componente, por lo que k_{ij} es cero o cercano a cero para componentes cercanos a la idealidad.

Los datos de condiciones críticas para un total de veintitrés componentes para el uso de esta ecuación se presentan en el Apéndice 1 y son las propuestas por los autores para una mayor exactitud de la ecuación. Se informa un porcentaje de error promedio, para los veintitrés compuestos entre amplios límites de temperatura (-250 a 500°F), de 1.36, calculado a partir de $\frac{P_{exp} - P_{calc}}{P_{exp}} \times 100$. La variación calculada en un total de 971 puntos es de 0.86. Para catorce mezclas binarias y terciarias a temperaturas de -283 a 460°F y presiones de 14.7 a 5000 psia se informa una desviación promedio absoluta con respecto a datos experimentales de 1.16%.

Para aplicar el método a un sistema de multicomponentes es, por tanto, necesario conocer los valores de los parámetros de interacción de todos los sistemas binarios que se presentan en la mezcla.

Este requerimiento representa la única desventaja del método de Starling; en la tabla 2.2 se presentan estos valores para dieciocho componentes.

Valores de los parámetros A_j Y B_j para el uso de la
ecuación de estado generalizada

Parámetro suscrito (j)	Valor del parámetro	
	A_j	B_j
1.....	0.443690	0.115449
2.....	1.28438	-0.920731
3.....	0.356306	1.70871
4.....	0.544979	-0.270896
5.....	0.528629	0.349361
6.....	0.484011	0.754130
7.....	0.0705233	-0.044448
8.....	0.504087	1.32245
9.....	0.0307452	0.179433
10.....	0.0732828	0.463492
11.....	0.006450	-0.022143

TABLA 2.1

Tabla 2.2 -Valores de Parámetros de Interacción Kij para utilizar la Correlación Generalizada
(Kij X 100)

Metano	Etileno	Etano	Propileno	Propano	i-Butano	n-Butano	i-Pentano	n-Pentano	Hexano	Heptano	Octano	Nonano	Decano	Undecano	Nitrógeno	Bióxido de Carbono	Acido Sulfhídrico	
0.0	1.0	1.0	2.1	2.3	2.75	3.1	3.6	4.1	5.0	6.0	7.0	8.1	9.2	10.1	2.5	5.0	5.0	Metano
—	0.0	0.0	0.3	0.31	0.4	0.45	0.5	0.6	0.7	0.85	1.0	1.2	1.3	1.5	7.0	4.8	4.5	Etileno
—	—	0.0	0.3	0.31	0.4	0.45	0.5	0.6	0.7	0.85	1.0	1.2	1.3	1.5	7.0	4.8	4.5	Etano
—	—	—	0.0	0.0	0.3	0.35	0.4	0.45	0.5	0.65	0.8	1.0	1.1	1.3	10.0	4.5	4.0	Propileno
—	—	—	—	0.0	0.3	0.35	0.4	0.45	0.5	0.65	0.8	1.0	1.1	1.3	10.0	4.5	4.0	Propano
—	—	—	—	—	0.0	0.0	0.08	0.1	0.15	0.18	0.2	0.25	0.3	0.3	11.0	5.0	3.6	i-Butano
—	—	—	—	—	—	0.0	0.08	0.1	0.15	0.18	0.2	0.25	0.3	0.3	12.0	5.0	3.4	n-Butano
—	—	—	—	—	—	—	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	13.4	5.0	2.8	i-Pentano
—	—	—	—	—	—	—	—	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	14.8	5.0	2.0	n-Pentano
—	—	—	—	—	—	—	—	—	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	17.2	5.0	0.0	Hexano
—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	20.0	5.0	0.0	Heptano
—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	0.0	0.0	0.0	0.0	22.8	5.0	0.0	Octano
—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	0.0	0.0	0.0	26.4	5.0	0.0	Nonano
—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	0.0	0.0	29.4	5.0	0.0	Decano
—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	0.0	32.2	5.0	0.0	Undecano
—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	0.0	0.0	0.0	Nitrógeno
—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	0.0	3.5	Bióxido de Carbono
—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	0.0	Acido Sulfhídrico

2.1.2 Entalpia

Se define la entalpia de un sistema como la suma de su energía interna más el producto presión-volumen:

$$H = E + PV \quad (2.24)$$

Como la energía interna y el volumen, la entalpia es una propiedad termodinámica extensiva; es decir, que depende de la masa del sistema considerado.

Definiendo a la entalpia como una función de temperatura y presión y recordando las propiedades de una diferencial exacta, la diferencia total resulta:

$$dH = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P dT + \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T dP \quad (2.25)$$

en donde el primer término representa el efecto isobárico de la temperatura y el segundo el efecto isotérmico de la presión sobre la entalpia. Esta expresión representa la variación de la entalpia en un proceso termodinámico.

Todos los gases a presión cero se comportan como gas ideal, y la entalpia definida por la ley de los gases perfectos se representa como:

$$\left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T = V - \left(\frac{R}{P}\right)T = 0 \quad (2.26)$$

de donde se deduce que la entalpia de un gas ideal no depende de la presión y

es solo función de la temperatura del sistema.

En este estado de gas ideal la entalpía molar parcial de un componente es igual a la entalpía del componente puro, es decir se produce una mezcla ideal. La entalpía ideal de la mezcla resulta entonces:

$$H_m^\circ = \sum_{i=1}^n y_i H_i^\circ \quad (2.27)$$

La entalpía de un gas o líquido real se determina por dos clases de métodos:

- a) Métodos basados en el uso de diagramas de entalpías de componentes puros.
- b) Métodos basados en el cálculo de la desviación isotérmica de la entalpía.

El inciso b) nos define los métodos de cálculo que se basan en que el cambio de entalpía es independiente de la forma en que se realice el proceso, pudiendo dividir éste en dos etapas:

- 1) Variación de la temperatura desde el valor de referencia hasta el valor final del sistema en un proceso isobárico a presión cero, por lo que se calcula $H(T, 0)$ basándonos en la ecuación (2.27).
- 2) Compresión isotérmica desde presión cero hasta la presión del sistema.

Por lo que el cambio en la entalpía $H(T, P) - H(T, 0)$, se denomi-

na desviación isotérmica de entalpía.

Debido a que la entalpía es función del estado del sistema, de una ecuación de estado puede derivarse una ecuación analítica para su evaluación; se presenta la ecuación de Starling-Han para el cálculo de la diferencia de entalpía con respecto a un estado basal o ideal, la cual cumple con los criterios anteriormente expuestos. La ecuación se presenta como:

$$\begin{aligned}
 H(T, \rho) - H(T, 0) = & \left(B_0 RT - Z A_0 - \frac{4C_0}{T^2} + \frac{5D_0}{T^3} - \frac{6E_0}{T^4} \right) \rho \\
 & + \frac{1}{2} \left(2bRT - 3a - \frac{4d}{T} \right) \rho^2 + \frac{\alpha}{5} \left(6a + \frac{7d}{T} \right) \rho^5 \quad (2.28) \\
 & + \frac{c}{\gamma T^2} \left[3 - \left(3 + \frac{\gamma \rho^2}{2} - \gamma^2 \rho^4 \right) \exp(-\gamma \rho^2) \right]
 \end{aligned}$$

El cálculo de los valores de las constantes presentadas, tanto para componentes puros como para mezclas, se presenta en el inciso 2.1.1. Por consistencia, los valores de densidad utilizados en esta ecuación son los obtenidos por la ecuación 2.1 para los datos de presión y temperatura.

Los valores de entalpía ideal se calcularon a partir del polinomio presentado en el API, los cuales nos representan una referencia de idealidad de líquido saturado a 200°F.

La secuencia de cálculo para esta propiedad es:

- a) Obtención de la diferencia de entalpía por la ecuación 2.28.
- b) Cálculo de la entalpía ideal a la condición de temperatura, si-

guiendo la regla de mezcla.

$$H^{\circ} = \sum x_i H_i^{\circ} \quad (2.29)$$

c) La entalpia real a las condiciones de presión y temperatura será:

$$H^{T,P} = \Delta H_p^T + H_T^{\circ} \quad (2.30)$$

2.1.3 Capacidad calorífica.

La capacidad calorífica, como la entalpía, es una propiedad termodinámica muy importante al analizar o proyectar sistemas de ingeniería que implican transmisión de calor, ya que la variación en estas propiedades puede relacionarse frecuentemente con las variables de operación importantes, como la elevación de temperatura de un fluido dentro de un cambiador de calor, por lo que es importante estimar la variación de esta propiedad con respecto a presión y temperatura.

Estableciendo el cálculo de la capacidad calorífica a partir de la derivada de la entalpía con respecto a presión y temperatura:

$$dH = \left(\frac{\delta H}{\delta T} \right)_P dT + \left(\frac{\delta H}{\delta P} \right)_T dP \quad (2.31)$$

y siendo $d_p = 0$ para una transferencia a presión constante, tenemos que:

$$dH = \left(\frac{\delta H}{\delta T} \right)_P dT \quad (2.32)$$

la que nos relaciona la cantidad de calor tomada por un sistema de sus alrededores con el incremento de la temperatura en un sistema. La relación dH/dt es el C_p , la capacidad calorífica del sistema a presión constante, por lo que tenemos que:

$$C_p = \left(\frac{\delta H}{\delta T} \right)_P \quad (2.33)$$

que identifica esta importante parcial con la cantidad experimental C_p , quedando:

$$dH = C_p dT \quad (2.34)$$

De la ecuación de estado que utilizamos para calcular el valor de la entalpia en el inciso 2.1.2, se obtiene la siguiente ecuación:

$$C - C_p^0 = \frac{A}{B} + C - R \quad (2.35)$$

$$A = T \left[R + B_0 R \rho + \frac{2C_0 \rho}{T^3} + b R \rho^2 - \left(\frac{2C \rho^2}{T^3} \right) (1 + \gamma \rho^2) \exp(-\gamma \rho^2) \right]^2 \quad (2.36)$$

$$B = RT + 2\rho \left(B_0 RT - A_0 - \frac{C_0}{T^2} \right) + 3\rho^2 (bRT - a) + 6a\alpha\rho^5 + \left(\frac{C\rho^2}{T^2} \right) (3 + 3\gamma\rho^2 - 2\gamma^2\rho^4) \exp(-\gamma\rho^2) \quad (2.37)$$

$$C = \frac{6C_0 \rho}{T^3} + \left(\frac{6C}{\gamma T^3} \right) [\exp(-\gamma\rho^2) - 1.0] + \left(\frac{3C\rho^2}{T^3} \right) \exp(-\gamma\rho^2) \quad (2.38)$$

2.1.4 Calor latente de vaporización.

La entalpia de vaporización ΔH_v ó calor latente de vaporización es la diferencia que existe entre las entalpias de vapor saturado y líquido saturado a las mismas condiciones de presión y temperatura.

Debido a las fuerzas de atracción que existen entre las moléculas del líquido, las moléculas que pasan a la fase vapor son aquellas cuya velocidad y energía son mayores que la media. La energía de las moléculas que quedan en el líquido se reduce y tiene que suministrarse más energía para mantener constante la temperatura. Esta es el cambio en la energía interna de vaporización ΔE . Se efectúa trabajo sobre la fase vapor a medida que continúa la vaporización, puesto que el volumen del vapor debe aumentar si la presión permanece constante, la cual corresponde a la presión de vapor. Este trabajo es definido como $w = P_{vp} (V_g - V_l)$. La entalpia de vaporización queda definida como:

$$\Delta H_v = \Delta E_v + w \quad (2.39)$$

$$\Delta H_v = \Delta E_v + P_{vp} (V_g - V_l) = \Delta E_v + RT \Delta Z_v \quad (2.40)$$

La ecuación de Clapeyron nos establece:

$$\frac{d(\ln P_{vp})}{d\left(\frac{1}{T}\right)} = - \Delta H_v / R \Delta Z_v \quad (2.41)$$

por lo que concluimos que el calor latente de vaporización está directamente re-

lacionado con la pendiente de la curva temperatura-presión de vapor. El método aquí presentado está derivado de la ecuación (2.41) ya que la relación temperatura-presión de vapor puede ser calculada con exactitud.

La ecuación de Riedel-Plank-Miller (2.42) fué el resultado de un estudio amplio de los métodos más exactos a partir de la presión de vapor; la forma final de la ecuación es:

$$\Delta H_{vb} = 2.303G \rho T_c \Delta Z_{vb} [1 + T_{br}^2 + K'(1 + 2T_{br})] \quad (2.42)$$

$$G = 0.2471 + 0.1965a \quad (2.43)$$

$$\Delta Z_v = 1 - \frac{0.97}{P_c T_b} \quad (2.44)$$

$$K' = \frac{a}{2.303G} - (1 + T_{br}) \quad (2.45)$$

$$a = \frac{T_{br} \ln P_c}{1 - T_{br}} \quad (2.46)$$

Esta ecuación nos dá como resultado el calor latente de vaporización a la temperatura normal de ebullición. Para el cálculo de la variación de la entalpia de vaporización con respecto a la temperatura se eligió la correlación empírica de Theisen (17), la cual ha demostrado ser la mas útil y es presentada como:

$$\Delta H_v = k (T_c - T)^n \quad (2.47)$$

siendo K y n constantes. Al escribir esta ecuación a dos temperaturas diferentes y al dividir una entre otra obtenemos:

$$\Delta H_{v2} = \Delta H_{v1} \left[\frac{1 - T_{r2}}{1 - T_{r1}} \right]^n \quad (2.48)$$

considerando H_{v1} , el calor latente de vaporización a la temperatura normal de ebullición calculado por la ecuación 2.42. Gambill (17) proporciona referencias de muchos autores quienes han propuesto algunos valores para el exponente n . Watson (17) propone el exponente 0.38 con el que obtuvo resultados con un error medio de 1.8 por ciento. Fishtine propone obtener a partir de:

$$n = \begin{cases} 0.74 T_{br} - 0.116 & 0.57 < T_{br} < 0.71 \\ 0.30 & T_{br} < 0.57 \\ 0.41 & T_{br} > 0.71 \end{cases} \quad (2.49)$$

lo cual nos lleva a resultados exactos entre amplios límites de temperatura, (-10°C a 500°C).

2.1.5 Presión de vapor.

La presión desarrollada por las moléculas de un componente en fase gaseosa, en equilibrio con la fase líquida, es función únicamente de la temperatura del sistema. Esta presión denominada presión de vapor, es característica de cada compuesto puro líquido y nos define la temperatura normal de ebullición, cuando se iguala a la presión atmosférica.

El mecanismo de esta presión se explica de una manera lógica por la Teoría de la distribución de energía de Maxwell-Boltzmann, estableciendo que a bajas temperaturas una fracción de las moléculas en el líquido, posee energía en exceso con respecto a la energía cohesiva del líquido, incrementándose esta fracción rápidamente con el incremento de la temperatura, lo que implica una relación inversa entre la energía cohesiva y la presión de vapor.

Para seleccionar el método de cálculo de esta propiedad entre varios métodos de buena exactitud y amplios límites, como son las ecuaciones de Cox-Antoine, Kirchhoff, Riedel y Frost-Kalkwanf-Thodos, se tomaron en cuenta los datos iniciales disponibles, eligiéndose la ecuación de Frost-Kalkwanf-Thodos (1), que es la más exacta para diversos tipos de compuestos en una amplia gama de temperaturas.

La relación que presentan, basada en la ecuación general de Clapeyron:

$$\frac{d P_{VP}}{dT} = \frac{\Delta H_v}{T \Delta V_v} = \frac{\Delta H_v}{\left(\frac{RT^2}{P_{VP}}\right) \Delta Z_r} \dots (2.50)$$

$$\frac{d(\ln P_{VP})}{d\left(\frac{1}{T}\right)} = - \frac{\Delta H_v}{R \Delta Z_v} \dots (2.51)$$

la resuelven con las siguientes suposiciones:

- 1) El calor de vaporización es una función lineal de la temperatura.

$$\Delta H_v = \Delta H_{v0} + \Delta C_s T \dots (2.52)$$

- 2) La ecuación de Van der Walls representa satisfactoriamente el comportamiento volumétrico del gas:

$$RT = \left(P + \frac{a}{V^2}\right) (V - b) \dots (2.53)$$

- 3) El volumen molar del líquido se calcula aproximadamente por la constante b de Van der Walls.

La forma general de la ecuación deducida es:

$$\log P_{VP} = A + \frac{B}{T} + C \log T + \frac{D/P_{VP}}{T^2} \dots (2.54)$$

D se relaciona en la deducción, a la constante a de Van der Walls, en la forma:

$$D = \frac{a}{2.303 R^2} \dots (2.55)$$

donde:

$$a = \frac{27}{24} \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \dots (2.56)$$

Así:
$$D = 0.1832 T_c^2 / C \quad (2.57)$$

La colaboración de Thodos fué la de relacionar las constantes B y C entre sí, por la relación:

$$C = 1.80 \left(\frac{B}{T_c} \right) + 2.67 \quad (2.58)$$

a fin de obtener una ecuación de presión de vapor reducida con la siguiente forma:

$$\log P_{vpr} = \left(\frac{B}{T_c} \right) \left(\frac{1}{T_r} - 1 \right) + \left(\frac{1.80 B}{T_c} + 2.67 \right) \log T_r + 0.1832 \left(\frac{P_{vpr}}{T_r^2} - 1 \right) \quad (2.59)$$

con la cual se puede obtener el valor de B por medio de un estado de referencia como el punto de ebullición normal por medio de un procedimiento iterativo; ya definido el valor de B, la única incógnita por resolver sería la presión de vapor reducida, la cual se debe resolver por medio de una computadora.

El valor de B puede ser calculado por medio de métodos de grupo aditivo para hidrocarburos, lo cual resulta mas complicado e impráctico; sin embargo esto le dá un sentido físico a las constantes utilizadas.

Los resultados obtenidos para esta relación son muy satisfactorios para una gran variedad de compuestos tanto orgánicos como inorgánicos obteniéndose errores promedio del 2 por ciento para presiones de vapor mayores de 1,500 mm Hg y 6 por ciento de error en presiones menores para un total de 34 hidrocarburos.

Los datos que requiere esta relación son:

P_c = Presión crítica, atmósferas

T_r = Temperatura crítica, °K

T_b = Temperatura normal de ebullición, °K

T = Temperatura, °K

2.1.6 Tensión superficial.

En el equilibrio de las fases líquidas y gaseosas de un componente o de una mezcla, la capa de separación puede considerarse como una tercera fase con propiedades intermedias, dentro de la cual existen grandes gradientes de densidad y energía molecular.

Un panorama microscópico cualitativo de la capa superficial nos muestra que existen fuerzas desiguales que actúan sobre las moléculas, lo cual provoca una tensión en la capa superficial, lo que hace que tienda a contraerse hacia el área mínima, compatible con la masa del material y las paredes del recipiente.

Un índice cuantitativo de este fenómeno puede presentarse en diversas formas, siendo la más común la tensión superficial, la cual se define simplemente por la fuerza ejercida en el plano de la superficie, por unidad de longitud.

El método seleccionado para el cálculo de esta propiedad es el propuesto por Brock y Bird (17), en el que el grupo adimensional $\gamma / P_c^{2/3} T_c^{1/3}$ se correlaciona con el principio de estados correspondientes, dando lugar a la siguiente ecuación:

$$\frac{\gamma}{P_c^{2/3} T_c^{1/3}} = (0.133 \alpha_c - 0.281) (1 - T_r)^{\frac{11}{9}} \quad (2.60)$$

El factor α_c que se presenta en esta ecuación es el propuesto por Reid del (17); es un parámetro de caracterización semejante al factor acéntrico y se

define como:

$$\alpha_c = d(\ln P_{vpr}) / d(\ln T_r) \text{ en el punto crítico} \dots (2.61)$$

El autor desarrolló una ecuación generalizada de presión de vapor, a partir de la cual se determina

Por datos experimentales observó que cuando la temperatura reducida tiene un valor de 1, la presión de vapor reducida es igual a 1, de donde obtuvo la siguiente ecuación con una sola constante de presión de vapor reducida:

$$\log P_{vpr} = -\phi T_r - (\alpha_c - 7) \psi(T_r) \dots (2.62)$$

donde:

$$\phi(T_r) = 0.118 \psi T_r - 7 \log T_r \dots (2.63)$$

$$\psi(T_r) = 0.0364 \varphi(T_r) - \log T_r \dots (2.64)$$

$$\varphi(T_r) = \frac{36}{T_r} + 42 \ln T_r - 35 - T_r^6 \dots (2.65)$$

Un punto de referencia conveniente es el de ebullición normal, ya que es una constante de cada compuesto, por lo que la presión de vapor reducida se define como $1/P_c$ y la temperatura reducida queda como T_b/T_c , siendo T_b la temperatura normal de ebullición.

Para mezclas multicomponentes se emplean constantes pseudo críticas, siguiendo la regla de Kay, la cual nos define que una constante es obtenida a -

partir de sus fracciones molares, por lo que se obtendría P_{cm} , T_{cm} , y α_{cm} .

Se informa para este método un error medio del tres por ciento para hidrocarburos, tanto lineales como cíclicos, teniendo amplios límites de uso.

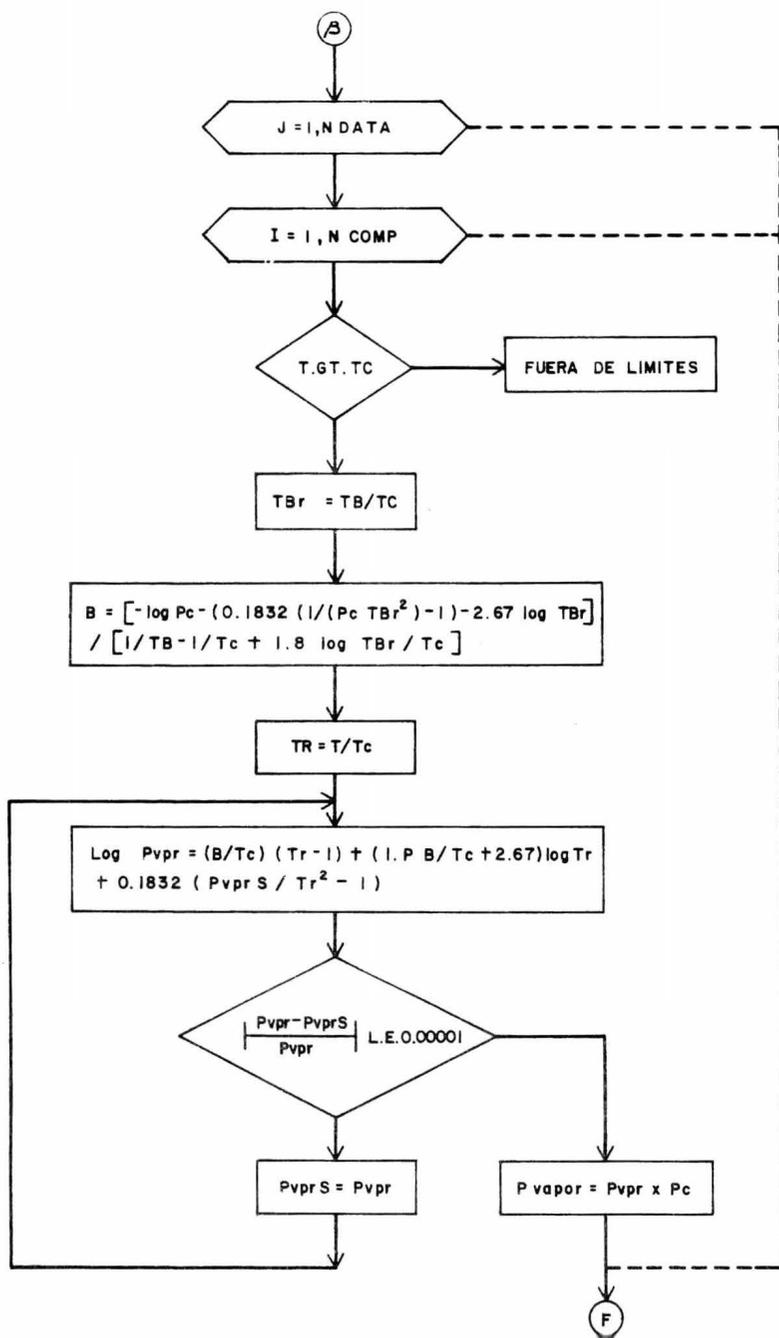


Fig. 2.1 Diagrama de flujo para el cálculo de la presión de vapor.

2.1.7 Viscosidad.

La viscosidad es una medida de la fricción interna del fluido, que tiende a oponerse a cualquier cambio dinámico del movimiento; es decir, si la fricción entre las capas del fluido es pequeña, se tiene un valor bajo de viscosidad, una fuerza cortante dará como resultado un gran gradiente de velocidad. Conforme aumenta la viscosidad, cada capa de fluido ejerce un mayor arrastre friccional sobre las capas adyacentes y el gradiente de velocidad disminuye, por lo que se concluye que la viscosidad es una propiedad dinámica de desequilibrio en una escala microscópica, siendo función de la temperatura, presión y volumen.

Para el cálculo de la viscosidad de líquidos y gases se encontraron los siguientes métodos con resultados satisfactorios, según se enumeran a continuación:

- 1) Gases puros a baja presión.

Stiel y Thodos (17) estudiaron en forma extensiva la correlación de estados correspondientes, la cual nos reduce la función de viscosidad como:

$$\mu_g = \mu \left(\frac{T_c^{1/6}}{M^{1/2} P_c^{2/3}} \right) = f(T_r, Z_c) \dots \dots (2.66)$$

Los datos experimentales ajustados a esta función han proporcionado

do las siguientes ecuaciones que parecen ser las mejores disponibles:

Gases no polares:

$$\mu_{\xi} = (3.40)(10^{-3}) T_r^{0.94} \quad T_r \leq 1.5 \quad (2.67)$$

$$\mu_{\xi} = (17.78)(10^{-3})(4.58 T_r - 1.67)^{\frac{5}{8}} \quad T_r > 1.5 \quad (2.68)$$

Gases polares. Tipos con enlace de hidrógeno:

$$\mu_{\xi} = (7.55 T_r - 0.55)(10^{-5}) Z_c^{-\frac{5}{4}} \quad T_r < 2.0 \quad (2.69)$$

Tipos con enlace sin hidrógeno:

$$\mu_{\xi} = (1.90 T_r - 0.29)(10^{-4}) Z_c^{-\frac{2}{3}} \quad T_r < 2.5 \quad (2.70)$$

En las ecuaciones anteriores:

μ = viscosidad

ξ = $T_c^{1/6} / M^{1/2} P_c^{2/3}$

T_c = Temperatura crítica °K

P_c = Presión crítica, atm.

M = Peso molecular

T_r = Temperatura reducida

Estas ecuaciones simples se aplican a todos los gases polares y no polares excepto el hidrógeno, helio, fluor, bromo y yodo.

Al compararse con valores experimentales los valores calculados se encontró un error medio de sólo un 1.8 por ciento en gases no polares y 3.2 por ciento en los gases polares.

2) Gases puros a alta presión.

Como criterio de alta presión tomaremos presiones mayores de 5 atm., ya que no encontramos grandes diferencias con resultados experimentales, y para evaluar la viscosidad a estas condiciones nos basamos en el método de la viscosidad residual, la cual nos relaciona la viscosidad a baja presión por medio de la densidad reducida.

La correlación presentada por Jossi, Stiel y Thodos cubre el intervalo entre $0.1 < \rho_r < 3$, lo cual nos permite correlacionar viscosidades de líquidos.

La ecuación presentada es:

$$\left[(\mu - \mu^0) \xi + 10^{-4} \right]^{0.25} = 0.1023 + 0.025364/\rho_r + 0.058533/\rho_r^2 - 0.040758/\rho_r^3 + 0.093324/\rho_r^4 \quad (2.71)$$

En esta ecuación:

μ = viscosidad, centipoises

μ^0 = viscosidad a baja presión a la misma temperatura, centipoises.

ρ_r = densidad reducida.

Para el cálculo de la densidad se utiliza el método explicado en este mismo capítulo.

El error medio de esta ecuación al compararse con datos experimentales fue del diez por ciento.

3) Viscosidad de mezcla de gases a baja presión.

La extensión de la teoría cinética de Chapman y Enskog puede emplearse para expresar la viscosidad de una mezcla multicomponente de gases a baja presión.

Las expresiones son bastantes complicadas y consisten en la relación de dos determinantes que comprenden términos en las que involucran fracciones molares, pesos moleculares, viscosidades de componentes puros, temperaturas, integrales de colisión y difusividades; se presentan como:

$$\mu_m = \frac{\sum_{i=1}^n \mu_i}{1 + \sum_{i=1}^n \phi_{ij} \left(\frac{\mu_j}{\mu_i} \right)} \quad (2.72)$$

$$\phi_{ij} = \frac{6}{5} A_{ij}^* \left(\frac{RT}{P \mu_i} \right) \left(\frac{\mu_i}{D_{ij}} \right) \quad (2.73)$$

y donde: $A_{ij}^* = \Omega_{ij} \nu_{ij} / \Omega_{D_{ij}}$ (2.74)

Wilke (17) simplificó la facilidad de aplicación de esta expresión aproximando el coeficiente de difusión del modelo de la teoría cinética de Sutherland, para que dé:

$$\phi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{1/2} \left(\frac{\mu_j}{\mu_i}\right)\right]^2}{\sqrt{8} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)\right]^{1/2}} \quad (2.75)$$

Al comparar los resultados de esta ecuación con datos experimentales se encontró una desviación media del uno por ciento en mezclas binarias, teniendo valores más altos en mezclas con hidrógeno.

4) Viscosidad de mezclas de gases a alta presión.

Se presenta una modificación de la técnica de viscosidad residual explicada en el inciso 2), desarrollada por Dean y Stiel, cuya ecuación es:

$$(\mu_m - \mu_m^0) \xi_m = (10.8)(10^{-5}) \left(e^{1.439} \rho_{rm} - e^{1.111} \rho_{rm}^{1.858} \right) \quad (2.76)$$

donde:

μ_m = viscosidad de la mezcla de alta presión, centipoises.

μ_m^0 = viscosidad de la mezcla a baja presión, centipoises.

ρ_{rm} = densidad pseudo reducida de la mezcla.

ρ_m = densidad de la mezcla, g mol/cm³

ρ_{cm} = a partir del volumen crítico de mezcla, 1/V_{cm}.

El peso molecular de la mezcla así como las demás propiedades pseudocríticas se calculan por medio de las reglas de Prausnitz y Gunn a partir de las fracciones molares:

$$T_{cm} = \sum_{i=1}^n y_i T_{ci} \quad (2.77)$$

$$Z_{cm} = \sum_{i=1}^n y_i Z_{ci} \quad (2.78)$$

$$V_{cm} = \sum y_i V_{ci} \quad (2.79)$$

$$P_{cm} = \frac{Z_{cm} R T_{cm}}{V_{cm}} \quad (2.80)$$

Con estos valores pseudocríticos se calculan los valores de

$$P_{cm} \text{ y } T_{cm}$$

El cálculo de la densidad de mezcla se logra a partir del método explicado anteriormente.

Esta correlación puede aplicarse a gases y a líquidos debido a su límite amplio de densidad. Con respecto a datos experimentales se presenta un error promedio del 3.7 por ciento.

5) Viscosidad de líquidos.

Para el cálculo de viscosidades de líquidos no se encontró ningún método confiable ya que no existe ninguna base teórica cuantitativa que nos describa en forma exacta el comportamiento de la viscosidad de líquidos.

Eyring propone un método con bases teóricas que tiene como variables la densidad, el calor latente de vaporización y la tempe-

ratura normal de ebullición; sin embargo, presenta errores hasta del 67.7 por ciento.

El método de Jossi, Stiel y Thodos presentado en el inciso 2), - con densidades calculadas a partir del método usado nos presenta errores medios del 10 al 15 por ciento, lo cual resulta aceptable.

6) Viscosidad de mezclas de líquidos.

Por lo presentado en el inciso 5) y por consistencia en los cálculos presentamos el método enunciado en el inciso 4) para el cálculo de viscosidad de mezcla de líquidos, siempre que se tenga una densidad reducida menor de 2, ya que la exactitud arriba de ese valor no será aceptable.

2.1.8 Conductividad térmica.

La conductividad térmica es una propiedad dinámica de desequilibrio térmico en escala microscópica, siendo función de la temperatura y presión del sistema.

Esta propiedad es una medida de la cantidad de calor transmitido en una unidad de tiempo, por unidad de área, a través de una unidad de espesor por cada unidad de cambio de temperatura.

Cuando la resistencia que presenta el fluido al paso del calor es muy alta, se obtiene un valor bajo de conductividad térmica, por lo que tenemos un aislante de calor. En caso contrario, se obtiene un alto valor de conductividad térmica y entonces se tiene un conductor de calor eficiente.

Para realizar la estimación de la conductividad térmica para gases y líquidos, se encontraron los siguientes métodos enumerados a continuación:

1) Gases puros a baja presión.

Misic y Thodos proponen un método basado simplemente en un análisis dimensional.

$$k = \alpha (\mu^a T_c^b T^c P_c^d V_c^e C_p^f R^g) \quad (2.81)$$

Como resultado se obtiene la siguiente relación:

$$k\gamma = \alpha \left[T_r^c \left(\frac{C_p}{R} \right)^t Z_c^{\frac{5}{6}} - g - f P_c^{\frac{5}{6}} \right] \quad (2.82)$$

donde γ se define por:

$$\gamma = T_c^{\frac{1}{6}} \mu^{1/2} / P_c^{\frac{2}{3}} \quad (2.83)$$

El método de Missic y Thodos reduce entonces, el tener que hallar la mejor relación funcional entre $k\gamma$ y T_r , C_p y Z_c .

Se encontró que hay varias ecuaciones para distintos tipos de compuestos y para distintos intervalos de temperatura reducida.

Las ecuaciones son:

$$\frac{k\gamma}{C_p} = (0.445)(10^5) T_r ; T_r \leq 1.0 \quad (2.84)$$

para metano, naftenos e hidrocarburos aromáticos.

$$\frac{k\gamma}{C_p} = (10^{-6})(14.52 T_r - 5.14)^{\frac{2}{3}} \quad (2.85)$$

para todos los hidrocarburos a todas las temperaturas, excepto los casos anteriores.

Al comparar los valores calculados con valores experimentales, observamos un error medio de 2.4 por ciento.

2) Gases puros a alta presión.

Para el caso de sistemas con alta presión, trabajos recientes que

tratan del efecto de la presión sobre la conductividad térmica han utilizado una sugerencia de correlación notablemente simple hecha por Abas-Zade (17).

En este esquema, la conductividad térmica residual, $k - k^0$, se transporta a una gráfica en función de la densidad (o densidad reducida); ésto es:

$$k - k^0 = f(\rho) \quad (2.86)$$

La temperatura y la presión no intervienen explícitamente, pero sus efectos se incluyen en los parámetros k^0 (de temperatura únicamente) y densidad.

Stiel y Thodos han generalizado la ecuación con el razonamiento de que $f(\rho)$ depende sólo de T_c , P_c , V_c , M y ρ . Por análisis dimensional, obtienen una correlación entre $k - k^0$, Z_c , ρ_r y ρ_r .

Las expresiones analíticas aproximadas son:

$$(k - k^0) \rho_r Z_c^5 = (14.0)(10^{-8}) (e^{-0.535/\rho_r - 1}); \rho_r < 0.5 \quad (2.87)$$

$$(k - k^0) \rho_r Z_c^5 = (13.1)(10^{-8}) (e^{0.47/\rho_r} - 1.069); 0.5 < \rho_r < 2.0 \quad (2.88)$$

$$(k - k^0) \rho_r Z_c^5 = (2.976)(10^{-8}) (e^{1.155/\rho_r} + 2.016); 2.0 < \rho_r < 2.8 \quad (2.89)$$

El error promedio encontrado al comparar valores experimentales con valores calculados es de ± 10 al 20%.

3) Mezcla de gases a baja presión.

Muchos de los métodos para predecir la conductividad térmica de mezclas están basados en una ecuación propuesta por Wassiljewa:

$$k_m = \frac{\sum_{i=1}^n k_i}{1.0 + \sum_{\substack{j=i \\ j \neq i}}^n A_{ij} \left(\frac{x_j}{x_i} \right)} \quad (2.90)$$

El término A_{ij} no fue especificado por Wassiljewa, por lo que existen muchas correlaciones propuestas.

Lindsay y Bromles propusieron la siguiente ecuación para calcular el término A_{ij} :

$$A_{ij} = \frac{1}{4} \left\{ 1.0 \left[\frac{\mu_i}{\mu_j} \left(\frac{\mu_j}{\mu_i} \right)^{3/4} \left(\frac{1.0 + \frac{S_i}{T}}{1.0 + \frac{S_j}{T}} \right) \right]^{1/2} \right\}^2 \quad (2.91)$$

$$\left[\frac{(1.0 + S_{ij}/T)}{(1.0 + S_i/T)} \right]$$

$$S_i = 1.5 T_{bi} \quad (2.92)$$

$$S_{ij} = (S_i S_j)^{1/2} \quad (2.93)$$

Usando este método de estimación se puede encontrar una desviación de la realidad de menos del 4%.

4) Líquidos puros.

Se han propuesto muchas técnicas de estimación para calcular la conductividad térmica de un líquido puro; la mayoría son empíricas, aunque algunas se basan en modelos teóricos no muy seguros.

Weber, en 1880, sugirió que la conductividad térmica era proporcional al producto $C_p \rho^{2/3}$, y este tipo general de correlación se ha modificado varias veces. Sin embargo, la mejor modificación parece ser la realizada por Robbins y Kingrea, quienes han propuesto la siguiente relación:

$$K_L = \frac{(88.0 - 4.94H)(10^{-3})}{\Delta S^*} \left(\frac{0.55}{T_r} \right)^N C_p \rho^{2/3} \quad (2.94)$$

donde:

K_L = Conductividad térmica de líquido, cal/cm-seg-°K.

T_r = Temperatura reducida, T/T_c .

C_p = Capacidad calorífica molar del líquido, cal/gmol-°K.

ρ = Densidad molar del líquido, gmol/cm³.

ΔS^* = Entropía de vaporización modificada de Everett

$$= \frac{\Delta H_{vb}}{T_b} + R \ln \frac{273}{T_b} \quad (2.95)$$

ΔH_{vb} = Calor molar de vaporización en el punto de ebullición normal, cal/gmol.

Tb = Punto de ebullición normal, °K.

Los parámetros H y N se obtienen de la siguiente tabla. H depende de las estructuras moleculares y N de la densidad del líquido a 20 °C.

Grupo funcional	No. Grupos	H
Hidrocarburos no ramificados:		
Parafinas		0
Olefinas		0
Anillos		0
Ramas CH ₃	uno	1
	dos	2
	tres	3
Ramas C ₂ H ₅	uno	2
Ramas iso-C ₃ H ₇	uno	2
Ramas C ₄ H ₉	uno	2
Sustituciones F	uno	1
	dos	2
Sustituciones Cl	uno	1
	dos	2
	tres ó cuatro	3

Sustituciones Br	uno	4
	dos	6
Sustituciones I	uno	5
Sustituciones OH	uno (iso-)	1
	uno (normal)	-1
	dos	0
	uno (terc)	5
Sustituciones oxígeno		
	cetonas, aldehidos	0
	ácidos, ésteres	0
	éteres	2
Sustituciones NH ₂	uno	1

Densidad de líquido, g/cm³ N

1 1

1 0

Se informa una desviación media de la realidad de 3.7 por ciento.

2.2 Cálculo del equilibrio de fase.

El estudio del equilibrio de fase en mezclas binarias en los cursos de Ingeniería Química ha sido la base para la enseñanza de operaciones unitarias como la destilación y la absorción, debido a la amplia información que existe de datos de equilibrio, así como la gran cantidad de métodos desarrollados para el cálculo de las etapas de equilibrio.

Cuando se estudian mezclas multicomponentes, la representación gráfica de sus propiedades de equilibrio no pueden ser aplicadas para determinar una etapa de equilibrio, por lo que es necesario utilizar un procedimiento de computación analítico, usualmente implementado en una computadora digital debido a la complejidad de los cálculos.

Las propiedades termodinámicas estarán representadas por ecuaciones algebraicas y dependerán de la temperatura, presión y de las composiciones de fase, por lo que estas ecuaciones tienden a ser muy complejas, particularmente cuando las interacciones entre moléculas disímiles son importantes.

La importancia de la exactitud de las correlaciones de propiedades termodinámicas dentro del diseño de equipo de operación no debe ser más enfatizada, así como los límites que cubre cada método a estudiar; sólo así el diseñador puede seleccionar el modelo más adecuado a su separación, a fin de tener una me-

por posición para determinar el factor de diseño más conveniente a su sistema.

Se presenta a continuación una descripción del método seleccionado para el cálculo de la constante de equilibrio, así como de los algoritmos para determinar las propiedades de las fases.

2.2.1 Constante de equilibrio.

La relación de vaporización en el equilibrio, K_i , para un componente distribuido entre las fases líquido y vapor en un sistema multicomponente, está definida como:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} \quad (2.97)$$

donde y_i , x_i son las fracciones mol del componente i en las fases vapor y líquido respectivamente. Para mezclas de hidrocarburos los métodos tradicionales para predecir datos de equilibrio son las correlaciones gráficas a partir de datos experimentales y los modelos teóricos que representan las dos fases. La relación de tres propiedades termodinámicas definen la constante de equilibrio como:

$$K_i = \frac{f_i^L \gamma_i}{\phi_i} \quad (2.98)$$

donde f_i^L es la fugacidad del líquido puro i , γ_i es el coeficiente de actividad de la fase líquida y ϕ_i es el coeficiente de fugacidad del componente i en la fase vapor.

Entre los métodos gráficos más comunes encontramos las gráficas de De Priester (22) basadas en la ecuación de estado de Benedict-Webb-Rubin, la cual tiene la limitación de trabajar sólo en hidrocarburos ligeros y mezclas de hidrógeno en límites muy pequeños. Las gráficas de Lenoir o las cartas del API

suelen ser más versátiles a pesar de ser derivadas de datos experimentales.

Desde un punto de vista práctico los modelos teóricos de la constante de equilibrio propuestos por Chao-Seader (4) y Grayson-Streed (8) son de gran utilidad. La única diferencia entre estos dos modelos son los valores de los coeficientes determinados empíricamente utilizando la teoría de estados correspondientes de Pitzer.

Estos dos métodos fueron seleccionados en el presente trabajo, si no por una gran exactitud, sí por sus amplios límites de operación y su confiabilidad en diferentes tipos de mezclas de hidrocarburos.

Los valores termodinámicos enunciados en la ecuación (2.98) se calculan a partir de los siguientes métodos:

- 1) Coeficiente de fugacidad del componente líquido.

Chao-Seader (4) desarrollaron una expresión empírica para el cálculo del coeficiente de fugacidad en la fase líquida en términos de la temperatura y la presión reducidas y del factor acéntrico utilizando la correlación generalizada de Pitzer et al (7), la cual está basada en la ecuación de estado expresada como:

$$P = \frac{zRT}{V} \quad (2.99)$$

Para condiciones hipotéticas del líquido ($P > P_{c_i}$ o $T > T_{c_i}$), la correlación se obtuvo a partir de datos experimentales resolviendo

en orden inverso la ecuación (2.98). La correlación se presenta -
como:

$$\log f_i = \log f_i^{(e)} + w_i \log f_i^{(i)} \quad (2.100)$$

donde:

$$\begin{aligned} \log f_i^{(e)} = & A_0 + \frac{A_1}{T_{ri}} + A_2 T_{ri} + A_3 T_{ri}^2 + A_4 T_{ri}^3 \\ & + (A_5 + A_6 T_{ri} + A_7 T_{ri}^2) P_{ri} + (A_8 + A_9 T_{ri}) P_{ri}^2 - \log P_{ri} \end{aligned} \quad (2.101)$$

y:

$$\begin{aligned} \log f_i^{(i)} = & A_{10} + A_{11} T_{ri} + \frac{A_{12}}{T_{ri}} + \frac{A_{13}}{T_{ri}^3} \\ & + A_{14} (P_{ri} - 0.6) \end{aligned} \quad (2.102)$$

Las constantes para (2.102) son:

$$A_{10} = -4.23893 \quad A_{11} = 8.65808 \quad A_{12} = -1.22060$$

$$A_{13} = -3.15224 \quad A_{14} = -0.025$$

Grayson-Streed (8) presentan constantes revisadas para $A_0 \dots A_9$ como se presentan en la tabla 2.3.

Estas ecuaciones empíricas son aplicables para temperaturas reducidas de 0.5 a 1.3.

2) Coeficiente de actividad de la fase líquida (f_i).

Se consideran las mezclas de hidrocarburos como soluciones regulares, caracterizadas por un exceso de entropía igual a cero, siendo cualquier comportamiento fuera de la idealidad debido al calor de solución. Hildebrand (17) propuso la siguiente ecuación:

$$\ln \gamma = \frac{V_i (\delta_i - \bar{\delta})^2}{RT} \quad (2.103)$$

donde δ es un parámetro de solubilidad definido por Hildebrand (17) como:

$$\delta = \left(\frac{A E_v}{V} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.104)$$

El valor de $\bar{\delta}$ representa el parámetro de solubilidad medio para la mezcla:

$$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i V_i \delta_i}{\sum x_i V_i} \quad (2.105)$$

siendo V_i igual al volumen molar del líquido a 25°C.

3) Coeficiente de fugacidad en la fase vapor.

Chao-Seader eligieron la ecuación de estado de Redlich-Kwong para resolver el cálculo del coeficiente de fugacidad representado por una ecuación PVT como:

$$f_r = \frac{\ln f}{P} = \frac{1}{RT} \int_0^P \left(V - \frac{RT}{P} \right) dP \quad (2.106)$$

La ecuación de Redlich-Kwong:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{T^{0.5}V(V+b)} \quad (2.107)$$

donde:

$$a = \frac{0.4278 R^2 T_c^{2.5}}{P_c} \quad (2.108)$$

$$b = \frac{0.0867 R T_c}{P_c} \quad (2.109)$$

La ecuación de fugacidad quedará definida como:

$$\ln \frac{f}{P} = Z - 1 - \ln(Z - BP) - \frac{A^2}{B} \ln \left(1 + \frac{BP}{Z} \right) \quad (2.110)$$

El factor de compresibilidad Z se definirá por medio de la misma ecuación de estado como:

$$Z = \frac{1}{1-h} - \frac{A^2}{B} \frac{h}{1+h} \quad (2.111)$$

donde:

$$A^2 = \frac{a}{R^2 T^{2.5}} \quad (2.112)$$

$$B = \frac{b}{RT} \quad (2.113)$$

$$h = \frac{BP}{Z} = \frac{b}{V} \quad (2.114)$$

$$\frac{A^2}{B} = \frac{a}{bRT^{1.5}} \quad (2.115)$$

Sustituyendo la ecuación (2.111) en (2.110) nos queda como ecuación de trabajo:

$$Z^3 - Z^2 + BP\left(\frac{A^2}{B} - BP - 1\right)Z - \frac{A^2}{B}(BP)^2 = 0 \quad (2.116)$$

Debido a la naturaleza de esta ecuación por ser cúbica con respecto a Z nos presenta tres valores matemáticos reales en su solución, por lo que es necesario implantar un criterio para determinar el valor real dentro del algoritmo de solución.

Coeficientes determinados por Grayson - Streed (8)
 para el cálculo de la fugacidad de líquido
 en la Ecuación de Chao - Seader

	Hidrógeno	Metano	Fluido Simple
CLAVE	1	2	3
A ₀	1.50709	1.36822	2.05135
A ₁	2.74283	-1.54831	-2.10899
A ₂	-0.02110	0.	0.
A ₃	0.00011	0.02889	-0.19396
A ₄	0.	-0.01076	0.02282
A ₅	0.008585	0.10486	0.08852
A ₆	0.	-0.02529	0.
A ₇	0.	0.	-0.00872
A ₈	0.	0.	-0.00353
A ₉	0.	0.	0.00203

TABLA 2.3

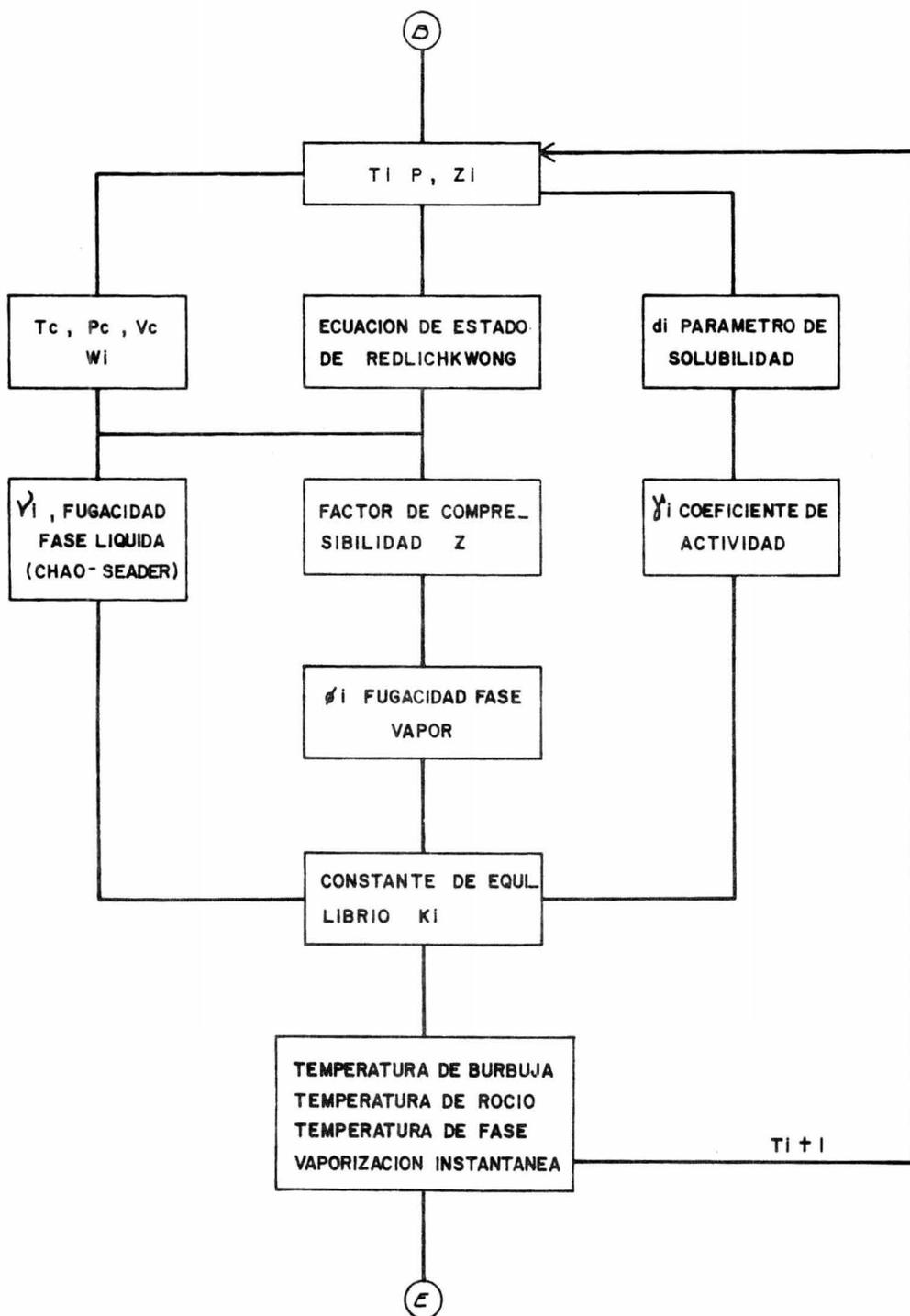


Fig. 2.2 Cálculo y uso de la constante de equilibrio.

2.2.2 Puntos de burbuja y rocío.

La determinación del punto de burbuja y rocío en una mezcla de multi componentes es la base para el cálculo del análisis de fase y de los métodos rigurosos para el cálculo de sistemas de destilación, ya que determinan los límites en las condiciones de presión y temperatura de coexistencia de las fases líquido y vapor.

El punto de burbuja se define como la condición, ya sea de presión o temperatura (por lo que una de éstas debe ser fijada), bajo la cual un líquido alcanza la saturación, es decir, entra en equilibrio con la fase vapor, siendo la suma de las fracciones mol, x_i y del vapor y_i igual a la unidad, por lo que tenemos:

$$\sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i = 1 \quad (2.117)$$

Partiendo de la definición constante de equilibrio K_i y de lo anteriormente dicho, tenemos:

$$\sum_{i=1}^n K_i \times z_i = 1 \quad (2.118)$$

donde z_i se refiere a la fracción mol de cada componente de la mezcla, las cuales se identifican en este caso con las fracciones mol de líquido.

Siguiendo el mismo razonamiento para el punto de rocío, el cual se define como la condición a la cual la fase vapor entra en equilibrio con la fase líquida formando una primera gota. Definiendo.

$$\sum_{i=1}^n \frac{z_i}{K_i} = 1 \quad \dots \quad (2.119)$$

Las funciones error para estos cálculos, ya que se requiere hacerlos a partir de métodos de convergencia como el Newton-Raphson o por procedimientos de prueba y error, son:

Punto de burbuja:

$$f(T_b) = \sum_{i=1}^n z_i (K_i - 1) = 0 \quad \dots \quad (2.120)$$

Punto de rocío:

$$f(T_r) = \sum_{i=1}^n \frac{z_i (K_i - 1)}{K_i} = 0 \quad \dots \quad (2.121)$$

La figura 2.3 nos presenta las características de la convergencia de estas funciones.

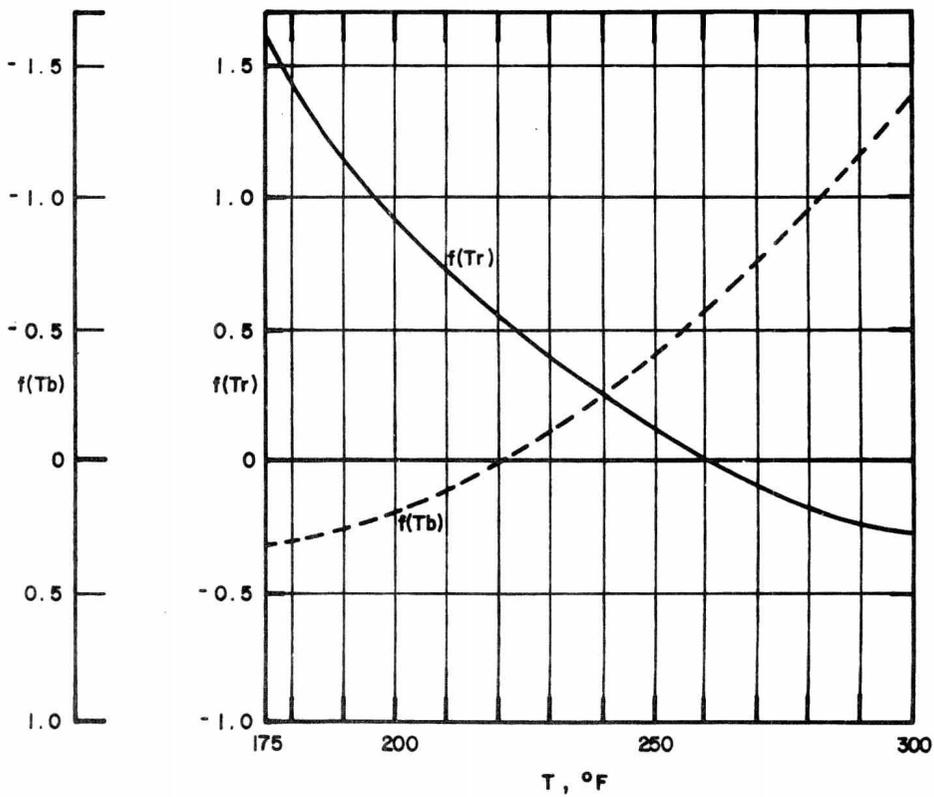


Fig. 2.3 Convergencias en las funciones de Temperatura de burbuja -
y temperatura de rocío.

2.2.3 Análisis de fase.

La fase de una corriente de hidrocarburos se determina a partir de los puntos de burbuja y de rocío de la mezcla, los cuales son comparados con las condiciones de temperatura y presión del sistema.

A una misma condición de presión, se compara la temperatura con la temperatura de burbuja; si resulta menor, la fase será líquida; en el caso contrario se compara con la temperatura de rocío, si resulta ser más alta se encuentra en fase vapor. La composición en ambos casos no se alterará.

En el caso de que la temperatura del sistema sea intermedia a las dos temperaturas de referencia, se tiene un equilibrio entre las dos fases, por lo que se debe determinar qué fracción de la corriente corresponde a cada fase y la composición mol de cada una. El método utilizado para lograr esto es el denominado Vaporización instantánea isotérmica, el cual consiste en la simulación de la separación de fases en un tanque con control de temperatura.

Refiriéndose a la figura 2.5 podemos realizar el siguiente balance de masa por componente en una vaporización continua:

$$Z_i F = V_i y_i + L_i x_i \quad (2.122)$$

L, V, y F se refieren a los flujos molares de las corrientes líquida, vapor y de la

2.2.3 Análisis de fase.

La fase de una corriente de hidrocarburos se determina a partir de los puntos de burbuja y de rocío de la mezcla, los cuales son comparados con las condiciones de temperatura y presión del sistema.

A una misma condición de presión, se compara la temperatura con la temperatura de burbuja; si resulta menor, la fase será líquida; en el caso contrario se compara con la temperatura de rocío, si resulta ser más alta se encuentra en fase vapor. La composición en ambos casos no se alterará.

En el caso de que la temperatura del sistema sea intermedia a las dos temperaturas de referencia, se tiene un equilibrio entre las dos fases, por lo que se debe determinar qué fracción de la corriente corresponde a cada fase y la composición mol de cada una. El método utilizado para lograr esto es el denominado Vaporización instantánea isotérmica, el cual consiste en la simulación de la separación de fases en un tanque con control de temperatura.

Refiriéndose a la figura 2.5 podemos realizar el siguiente balance de masa por componente en una vaporización continua:

$$Z_i F = V_i y_i + L_i x_i \quad (2.122)$$

L , V , y F se refieren a los flujos molares de las corrientes líquida, vapor y de la

alimentación, respectivamente. x_i , y_i , y z_i son las fracciones mol del componente i . Un balance total de masa nos dará:

$$F = V + L \quad (2.123)$$

La expresión de equilibrio para cada componente es:

$$y_i = K_i x_i \quad (2.124)$$

Sustituyendo las ecuaciones (2.123) y (2.124) en la ecuación (2.122) tenemos:

$$x_i L + K_i x_i V = z_i F \quad (2.125)$$

donde:

$$x_i = \frac{F z_i}{V K_i + L} = \frac{F z_i}{V K_i + F - V} = \frac{F z_i}{V(K_i - 1) + F} = \frac{z_i}{\frac{V}{F}(K_i - 1) + 1} \quad (2.126)$$

haciendo lo mismo con y_i tenemos:

$$y_i = \frac{z_i K_i}{\frac{V}{F}(K_i - 1) + 1} \quad (2.127)$$

En el equilibrio tenemos que la suma de las fracciones mol de cada fase son igual a la unidad, por lo que:

$$\sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i = 1.0 \quad (2.128)$$

Si se toma como función error la resta de las dos sumas tenemos:

$$f(\xi) = \sum_{i=1}^n \frac{z_i (k_i - 1)}{\frac{V}{F} (k_i - 1) + 1} \quad (2.129)$$

lo cual nos satisface el modelo.

Para que se cumpla esta función error debemos iterar el valor de V/F ; a fin de que la convergencia se acelere se utiliza el método de Newton-Raphson. Una vez determinado este valor se calcula la fracción de líquido y las composiciones de cada fase a partir de las ecuaciones (2.126) y (2.127).

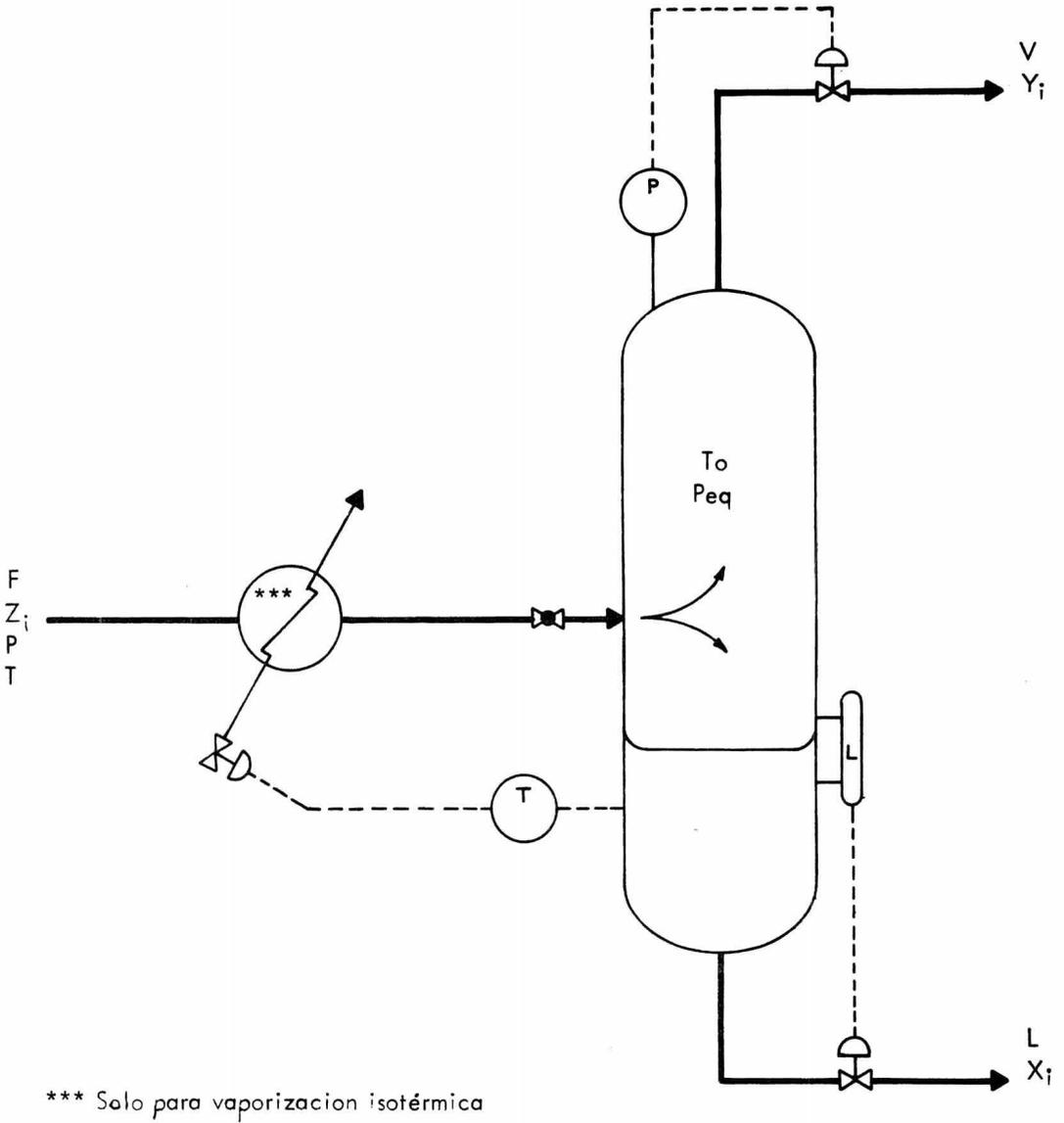


Fig. 2.5 Tanque Separador (2 opciones)

2.2.4 Cálculo de un tanque separador en un proceso adiabático.

La separación de una mezcla de hidrocarburos en componentes ligeros y pesados en una sola etapa de equilibrio, sin ningún intercambio de calor con el sistema, se puede lograr mediante una reducción en la condición de presión a la corriente de alimentación de un tanque provocada por una válvula reductora, lo cual nos establece un sistema de dos fases, siendo éstas separadas por gravedad en el tanque separador. Dado que se considera un sistema adiabático, el balance de energía resulta como:

$$H_{ent} = H_{gas} + H_{liq} \quad (2.130)$$

La temperatura de operación del tanque resulta menor a la temperatura de alimentación debido al cambio de fase de una fracción de la corriente, lo que provoca una transformación de calor sensible a calor latente.

El cálculo de las características de la separación sigue la siguiente secuencia:

- a) Se realiza una vaporización instantánea isotérmica de la corriente de alimentación a partir de los datos iniciales de temperatura, presión y composición antes de la válvula reductora. Una vez definidas las características de la corriente se calcula la entalpía de alimentación.

- b) Se fija la presión del equipo y supone una temperatura.
- c) Se realiza una vaporización instantánea isotérmica con las nuevas condiciones de presión y temperatura, determinando la relación gas-líquido y sus composiciones. Se calculan las entalpías de cada fase.
- d) Se compara la suma de las entalpías de cada fase con la entalpía de la alimentación. Si resultan iguales dentro de una tolerancia la temperatura será correcta, así como el análisis de las corrientes de salida, en caso contrario se supone una nueva temperatura a partir de un Newton-Raphson, el cual se basa en las temperaturas de burbuja y rocío para sus límites de iteración.

Las entalpías de gas y líquido se calculan por las ecuaciones sugeridas por Chao-Seader a fin de mantener una consistencia en el cálculo.

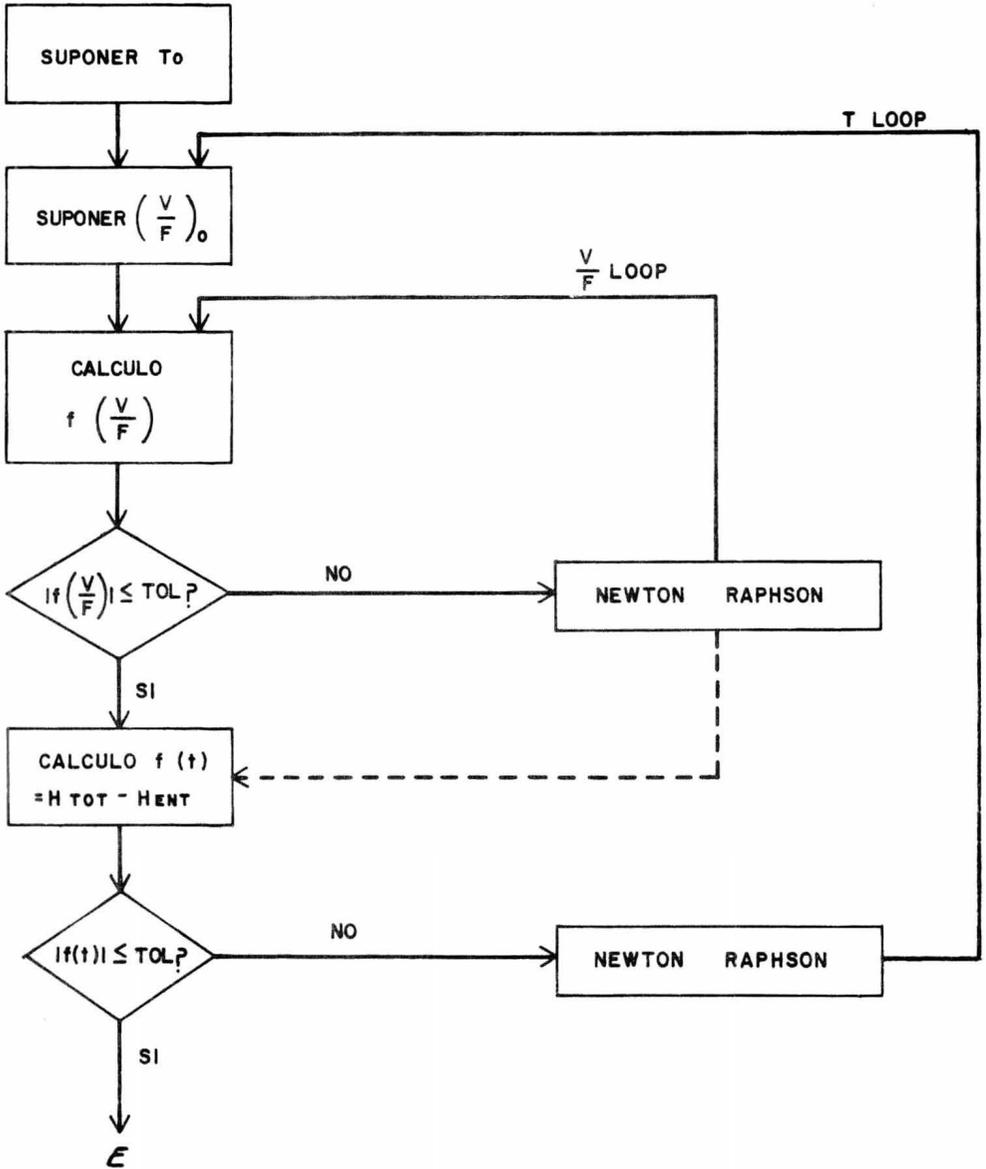


Fig. 2 4 Diagrama de flujo del cálculo de un tanque separador.

2.3 Descripción del programa Propiedades en Fortran IV.

Una vez definidos los métodos de cálculo para cada una de las propiedades descritas en este capítulo, se elaboró un programa de computadora en el language Fortran IV, el cual se ejecutó en la computadora Burroughs 6700/7700 del Centro de Servicios de Cómputo de la Universidad Nacional Autónoma de México.

El programa fué elaborado a base de subrutinas, las cuales son descritas en el inciso 2.3.1; cada una de las cuales corresponde a las diversas propiedades, a fin de que en un momento dado trabajen de una manera independiente, pudiendo ser utilizadas como fuente de información en el desarrollo de otros cálculos.

La operación del programa está diseñada para tres opciones básicas de cálculo, siendo las dos primeras de información de propiedades, y la tercera un simulador de una mezcla de hidrocarburos en etapas de equilibrio.

Las opciones son:

- 1) Propiedades de compuestos puros a diferentes condiciones de presión y temperatura, con una capacidad de veinte compuestos diferentes y veinte juegos de condiciones para cada compuesto, pudiéndose ampliar este campo modificando la capacidad de los vectores correspondientes. La subrutina Props sirve como monitor de

este juego de propiedades, seleccionando el cálculo por medio de una serie de claves, las cuales se leen como datos y se especifican en la tabla 2.4.

- 2) **Propiedades de mezclas multicomponentes a diferentes condiciones de temperatura y presión, como se especifica en la opción 1).** Se deben alimentar como datos la composición y la fase de la mezcla.
- 3) **Simulación de las propiedades de una corriente de hidrocarburos, dada la composición inicial y las condiciones de presión y temperatura.** Esta opción involucra cálculos de los puntos de burbuja y de rocío, el análisis de las fases líquido y vapor, determinando composiciones y porcentajes de cada fase por medio del cálculo de una vaporización instantánea (flash isotérmico).

Además, se incluye el cálculo de una expansión adiabática utilizando un balance de entalpías en los límites de un tanque separador.

Una vez determinadas las características de fase de la corriente, se estiman sus propiedades físicas y termodinámicas por medio de los métodos de la opción 2).

Los datos de operación para este programa se describen en el inciso 2.3.2, especificándose la manera como deben ser alimentadas, dependiendo de la opción del cálculo.

2.3.1 Análisis de subrutinas.

A continuación se presenta una síntesis de las subrutinas empleadas.

SUBROUTINA EQUIL

Calcula las constantes de equilibrio K_i para cada componente en las condiciones de presión, composición y temperatura requeridas por el método de Chao-Seader.

SUBROUTINA FEBUR

Calcula la función error para el cálculo de la temperatura de burbuja.

SUBROUTINA FEROC

Calcula la función error para el cálculo de la temperatura de rocío.

SUBROUTINA TBURB

Calcula las temperaturas de burbuja y de rocío por el método de Newton-Raphson utilizando las constantes de equilibrio.

SUBROUTINA ZETA

Calcula el factor de compresibilidad a la presión indicada utilizando la ecuación de estado Redlich-Kwong.

SUBROUTINA FLASH

Realiza una vaporización instantánea de la corriente en las condiciones especificadas para conocer la fracción de la corriente en estado líquido y en estado vapor, así como la composición de ambas fases.

SUBROUTINA GEXY

Asigna a X y a Y los valores de la composición alimentada.

SUBROUTINA FASE

Realiza un análisis de fase en las condiciones de la corriente, calculando el flujo de vapor y el flujo del líquido en dicha corriente. Utiliza como criterio la comparación de la temperatura con respecto a la temperatura de burbuja y a la temperatura de rocío.

SUBROUTINA FLAD

Esta subrutina es el monitor de la expansión adiabática. Calcula la entalpía de la corriente de alimentación.

SUBROUTINA FLA2

Calcula la temperatura y la composición de las salidas de vapor y líquido, de un tanque separador, por el método de convergencia de entalpías.

SUBROUTINA HVL

Cálculo de la entalpía de mezcla de la fase líquida por el método de Chao-Seader. Cálculo de la entalpía de mezcla de la fase vapor utilizando la ecuación de estado de Redlich-Kwong. La entalpía ideal la calcula a partir de las constantes del API.

SUBROUTINA IMPRES

Calcula los valores de flujo, llama las subrutinas necesarias para el cálculo de las propiedades e imprime los resultados del programa.

SUBROUTINA ANACOR

Esta subrutina realiza la lectura de las condiciones iniciales, constantes y opciones de cálculo. Con la opción de cálculo se define qué subrutina trabaja.

SUBROUTINA DENPUR

Calcula la densidad de compuestos puros utilizando la ecuación de estado de Starling-Han.

SUBROUTINA VISPUR

Calcula la viscosidad de compuestos puros en fase vapor a baja presión. Utiliza el método de estados correspondientes de Stiel y Thodos.

SUBROUTINA VISPAP

Calcula la viscosidad de compuestos puros en fase vapor o en fase líquida a alta presión. Utiliza el método de estados correspondientes de viscosidad reducida de Dean y Stiel.

SUBROUTINA ENTP

Calcula la entalpia de compuestos puros utilizando la ecuación de Starling-Han.

SUBROUTINA CPRP

Calcula la capacidad calorífica de compuestos puros utilizando la ecuación de estado de Starling-Han.

SUBROUTINA CONGAS

Calcula la conductividad térmica de gases puros a baja presión utilizando el método de Misic-Thodos.

SUBROUTINA CONGAP

Calcula la conductividad térmica de gases puros a alta presión. Utiliza el método de Stiel y Thodos.

SUBROUTINA CLAVA

Esta subrutina puede evaluar el calor latente de vaporización a la tempe-

ratura normal de ebullición. Se utiliza el método de Riedel, Plank y Miller.

SUBROUTINA CALAT

Esta subrutina calcula el calor latente de vaporización a cualquier temperatura utilizando el método de Watson.

SUBROUTINA CONLQ

Calcula la conductividad térmica de compuestos puros en fase líquida. Utiliza el método de Robbins y Kingrea.

SUBROUTINA TENSUP

Esta subrutina calcula la tensión superficial de compuestos puros utilizando el método de Riedel, Plank y Miller.

SUBROUTINA PREVAP

Calcula la presión de vapor de compuestos puros. Utiliza el método de Frost-Kalkwanf-Thodos.

SUBROUTINA DENSI

Esta subrutina calcula la densidad de mezcla utilizando la ecuación de estado de Starling-Han.

SUBROUTINA HREAL

Calcula la entalpía de mezcla por el método de Starling-Han.

SUBROUTINA CPREAL

Calcula la capacidad calorífica de mezcla utilizando la ecuación de estado de Starling-Han.

SUBROUTINA VISM3P

Esta subrutina calcula la viscosidad de mezcla de gases a baja presión. El método utilizado es el propuesto por Wilke.

SUBROUTINA VMAP

Calcula la viscosidad de mezcla de gases a alta presión utilizando el método de Dean y Stiel.

SUBROUTINA CONM3P

Calcula la conductividad térmica de mezcla de gases a baja presión. Utiliza el método propuesto por Thodos.

SUBROUTINA BWRC

Esta subrutina calcula las constantes para la ecuación de Starling-Han.

SUBROUTINA ENT

Calcula la desviación de la entalpía con respecto a la idealidad con

el método de Starling-Han.

SUBROUTINA CPR

Calcula la desviación de la capacidad calorífica con respecto a la idealidad utilizando la ecuación de estado de Starling-Han.

SUBROUTINA XY

Asigna valores de fracción mol.

SUBROUTINA REDUCP

Calcula los valores de la presión y la temperatura reducidas para cada componente.

	KF = 2 Gas
	KF = 3 Gas-Líquido
C (I)	- Opción de cálculo de las diferentes propiedades. Tabla 2.4.
To	- Temperatura, °C.
Po	- Presión, atm.
Peqp	- Presión de equipo, atm.
F	- Flujo de alimentación, moles/hr.
Q	- Calor transferido, Btu/hr.
A1, A2, A3 (I)	- Nombre del componente i.
Z (I)	- Fracción mol del componente i.
PM (I)	- Peso molecular del componente i.
Tc (I)	- Temperatura crítica del componente i, °K.
Pc (I)	- Presión crítica del componente i, atm.
Vc (I)	- Volumen crítico del componente i, ml/gr-mol.
Zc (I)	- Factor de compresibilidad crítico del componente i.
W (I)	- Factor acéntrico del componente i.
D (I)	- Parámetro de solubilidad del componente i, cal/cm ³ .

$V_w (I)$	- Volumen molar del líquido a 25°C, del componente i , cm^3/gmol .
$T_b (I)$	- Temperatura normal de ebullición en el componente i , °K.
$A_{cp}, B_{cp}, C_{cp},$ $D_{cp}, E_{cp}. (I)$	- Constantes del polinomio de la entalpia ideal del componente i .
$l_{\text{tipo}} (I)$	- Índice en el cálculo de la viscosidad de el componente i .
$l_{nd} (I)$	- Clave para el cálculo de la constante de equilibrio del componente i .
$K_{ij} (I, J)$	- Parámetro de interacción en la ecuación de Starling.

Los datos que se alimentan al programa deben seguir la siguiente secuencia, dependiendo de la opción de cálculo que seleccione el usuario.

Para las opciones 1 y 2 tenemos:

Tarjeta No. 1	Columna 1-2	Njuego
Tarjeta No. 2	Columna 1-2	Kopc
Tarjeta No. 3	Columna 1-2	KF
	Columna 3-4	Ndata
	Columna 5-6	Ncomp
Tarjeta No. 4	Columna 1-30	C (I)
Tarjeta No. 5	Columna 1-10	P (J)
	Columna 11-20	T (J)
	Se alimentan Ndata número de tarjetas.	
Tarjeta No. 6	Columna 1-6	A1
	Columna 7-12	A2
	Columna 13-18	A3
	Columna 19-24	Z
Tarjeta No. 7	Columna 1-10	Pm
	Columna 11-20	Tc
	Columna 21-30	Pc

	Columna	31-40	Vc
	Columna	41-50	Zc
Tarjeta No. 8	Columna	1-10	Tb
	Columna	11-20	w
	Columna	21-30	D
	Columna	31-40	Vw
	Columna	41-42	ltipo
	Columna	43-44	Ind
Tarjeta No. 9	Columna	1-10	Acp
	Columna	11-20	Bcp
	Columna	21-30	Ccp
	Columna	31-40	Dcp
	Columna	41-50	Ecp
	Se alimentan grupos de tarjetas		
	de 6 a 9 como componentes haya.		
Tarjeta No. 10	Columna	1-80	Kij
	Se alimentan tarjetas como compo		
	nentes -1 haya.		
Para la opción 3 tenemos:			
Tarjeta No. 1	Columna	1-2	Njuego

Tarjeta No.	2	Columna	1-2	Kopc
Tarjeta No.	3	Columna	1-5	Kc
		Columna	6-10	Ncomp
		Columna	11-20	To
		Columna	21-30	Po
		Columna	31-40	Peqp
		Columna	41-50	F
		Columna	51-60	Q
Tarjeta No.	4	Columna	1-6	A1
		Columna	7-12	A2
		Columna	13-18	A3
		Columna	19-24	Z
Tarjeta No.	5	Columna	1-10	Pm
		Columna	11-20	Tc
		Columna	21-30	Pc
		Columna	31-40	Vc
		Columna	41-50	Zc
Tarjeta No.	6	Columna	1-10	Tb
		Columna	11-20	w
		Columna	21-30	D

Tarjeta No. 7

Columna	31-40	Vw
Columna	41-42	Itipo
Columna	43-44	Ind
Columna	1-10	Acp
Columna	11-20	Bcp
Columna	21-30	Ccp
Columna	31-40	Dcp
Columna	41-50	Ecp

Se alimentan tarjetas de 4 a 7
como componentes haya.

PROPIEDADES PUROS	SUBROUTINA	CLAVE C (I)
Densidad	DENPUR	2
Viscosidad	VISPUR	3
Entalpia	ENTP	4
Capacidad calorífica	CPRP	5
Conductividad térmica de gases	CONGAS	6
Calor latente de vaporización a temperatura normal	CLAVA	7
Calor latente de vaporización	CALAT	8
Conductividad térmica de líquidos	CONLQ	9
Tensión superficial	TENSUP	10
Presión de vapor	PREVAP	11
PROPIEDAD MEZCLA	SUBROUTINA	CLAVE C (I)
Densidad	DENSI	12
Entalpia	HREAL	13
Capacidad calorífica	CPREAL	14
Viscosidad	VISMBP	15
Conductividad térmica	CONMBP	16

Tabla 2.4 Claves para el cálculo de las diferentes propiedades.

2.2.4 Resultados del programa Propiedades.

CALCULO DE LA DENSIDAD DEL PROPANO

PREsION	TEMPERATURA	DENSIDAD	DENSIDAD
(ATMS)	(GR.C)	(MOLES=LITRO)	(LBMOL-FTCUBICO)
1.000	25.000	.4157000E-01	.2595631E-02
1.000	50.000	.3821000E-01	.2385832E-02
1.000	75.000	.3537000E-01	.2208503E-02
1.000	100.000	.3293000E-01	.2056149E-02
5.000	50.000	.2019800E+00	.1261163E-01
10.000	50.000	.4386500E+00	.2738931E-01
20.000	50.000	.1126830E+01	.7035927E-01
30.000	50.000	.5243040E+01	.3273754E+00

VISCOSIDAD DE COMPUESTOS PUROS, CENTIPOISES

PRESION (ATMS)	TEMPERATURA (GR.C.)	COMPUESTO		
		PROPANO	N-BUTANO	N-PENTANO
1.0000	25.0000	0.00831363	0.00758593	0.00699745
1.0000	50.0000	0.00896728	0.00818237	0.00754762
1.0000	75.0000	0.00961790	0.00877604	0.00809524
1.0000	100.0000	0.01026572	0.00936716	0.00864050
5.0000	50.0000	0.00906044	0.00830359	0.00770696
10.0000	50.0000	0.00910343	0.00840113	0.04865802
20.0000	50.0000	0.00927884	0.02976007	0.04961901
30.0000	50.0000	0.01218059	0.03053774	0.05056577



QUIMICA

CALCULO DE LA ENTALPIA DEL PROPANO

PRESION (ATMS)	TEMPERATURA (GR.C.)	ENTALPIA IDEAL		DESVIACION ENT		ENTALPIA REAL	
		(CAL/GMOL)	(BTU/LBMOL)	(CAL/GMOL)	(BTU/LBMOL)	(CAL/GMOL)	(BTU/LBMOL)
1.000	25.000	7482,089	13467,760	-99,212	-178,581	7581,300	13646,341
1.000	50.000	7945,155	14301,280	-81,238	-146,228	8026,393	14447,507
1.000	75.000	8438,394	15189,108	-67,691	-121,844	8506,085	15310,953
1.000	100.000	8960,842	16129,515	-57,241	-103,034	9018,083	16232,549
5.000	50.000	7945,155	14301,280	-417,990	-752,382	8363,145	15053,662
10.000	50.000	7945,155	14301,280	-871,878	-1569,380	8817,033	15870,650
20.000	50.000	7945,155	14301,280	-1971,898	-3549,416	9917,053	17850,696
30.000	50.000	7945,155	14301,280	-3753,966	-6757,130	11609,122	21058,419

CALOR LATENTE DE VAPORIZACION EN CAL/GMOL

TEMPERATURA	COMPUESTO				
	PROPENO	PROPANO	I-BUTANO	N-BUTANO	N-PENTANO
-100.000	4897.40	5058.09	5985.72	6823.01	7767.92
-75.000	4669.78	4825.54	5749.31	6186.86	7516.93
-50.000	4418.42	4569.66	5494.05	5933.38	7251.79
-25.000	4135.91	4283.43	5215.57	5658.88	6969.15
0.000	3810.17	3955.66	4907.53	5358.25	6685.85
25.000	3419.33	3566.57	4560.27	5023.96	6336.77
50.000	2915.33	3074.74	4157.76	4644.28	5976.15
75.000	2139.98	2358.74	3669.73	4199.04	5574.38

REFRACION DE VAPORES

TEMPERATURA	COMPUESTO				
	PROPENO	PROPANO	I-BUTANO	N-BUTANO	N-PENTANO
-100.000	0.040123	0.028137	0.003736	0.001567	0.000092
-75.000	0.237444	0.176163	0.032649	0.016125	0.001556
-50.000	0.898116	0.694077	0.164886	0.092080	0.012925
-25.000	2.518797	2.005685	0.574359	0.352269	0.045978
0.000	5.749226	4.680667	1.543967	1.017656	0.238545
25.000	11.348120	9.393371	3.449543	2.403449	0.671402
50.000	20.182303	16.914531	6.736874	4.899491	1.570422
75.000	33.312477	28.172447	11.913950	8.955064	3.197386

TENSIÓN SUPERFICIAL DE LÍQUIDOS Puros EN DINAS/CM

TEMPERATURA	COMPUESTO				
	PROPENO	PROPANO	ISOPUTANO	N-BUTANO	N-PENTANO
-100.000	73.05	29.65	29.05	34.78	33.54
-75.000	34.07	26.17	26.24	31.66	31.02
-50.000	29.26	22.60	23.34	28.45	28.42
-25.000	24.36	18.93	20.38	25.16	25.77
0.000	19.33	15.19	17.35	21.80	23.05
25.000	14.20	11.36	14.25	18.37	20.27
50.000	8.97	7.46	11.10	14.87	17.45
75.000	3.65	3.50	7.89	11.31	14.57

TEMPERATURA DE BURBUJA Y TEMPERATURA DE ROCIO

MEZCLA :

NOMBRE	FRACCION MOL	CONSTANTE DE EQUILIBRIO
PROPENO	0.0010	.3161896F+01
PROPANO	0.0030	.2970775F+01
I-BUTANO	0.3305	.1390658F+01
N-BUTANO	0.3826	.1061632F+01
N-PENTANO	0.2829	.4326739F+00

PRESION DE LA MEZCLA = 102.900 PSIA
 TEMPERATURA DE BURBUJA = 154.930 GR.F

TEMPERATURA DE ROCIO = 174.482GR.F

RESULTADOS DEL CALCULO DE UNA VAPORIZACION INSTANTANEA
 REALIZADA EN UN EQUIPO CUYA PRESION DE OPERACION ES 50.000 PSIA

CONDICIONES INICIALES

COMPONENTE	CONSTANTE	ALIMENTACION		LIQUIDO		VAPOR	
		LB-MOL/H	% MOL	LB-MOL/H	% MOL	LB-MOL/H	% MOL
PROPENO	.3181889E+01	0.100	0.1000	0.100	0.1000	0.000	0.0000
PROPANO	.2874768E+01	0.300	0.3000	0.300	0.3000	0.000	0.0000
ISOBUTANO	.1300655E+01	33.050	33.0500	33.050	33.0500	0.000	0.0000
N-BUTANO	.1061630E+01	38.260	38.2600	38.260	38.2600	0.000	0.0000
N-PENTANO	.4326732E+00	28.290	28.2900	28.290	28.2900	0.000	0.0000
		*****	*****	*****	*****	*****	*****
TOTAL LB-MOL/H		100.000	100.0000	100.000	100.0000	0.000	0.0000
FLUJO TOTAL LB/H * KG/H		5938.7	2693.8	5938.7	2693.8	0.0	0.0
PESO MOLECULAR PROMEDIO		59.387		59.387		0.000	
DENSIDAD RELATIVA A 60 F		0.47026		0.47026		0.00000	
BP@ A 60 F		865.5		865.5		0.0	
MMPCSD 68 F, 1 KG/CM ²		4.865		4.865		0.000	
PRESION PSIG (P ATM= 14.7)		102.900					
TEMPERATURA GR. F		149.000					
DENSIDAD A P Y T LB/FT ³		29.2975		29.2975		0.0000	
ENTALPIA MBTU/HR		200.8450		200.6458		0.0000	
CONDUCTIVIDAD TERMICA, CAL/CM-SEG-K		.95E-02		.95E-02		0.	
VISCOSIDAD, CPS		0.066332		0.066332		0.000000	
CAPACIDAD CALORIFICA, BTU/LB-MOL-F		-18.1166		-18.1166		0.0000	

CONDICIONES FINALES

COMPONENTE	CONCENTRACION	SOLIDIFICACION		LIQUIDO		VAPOR	
		LB-MOL/HR	% MOL	LB-MOL/HR	% MOL	LB-MOL/HR	% MOL
PROPANO	.159220E+01	0.160	0.1000	0.080	0.0840	0.014	0.5328
PROPANO	.1103726E+01	0.300	0.3000	0.240	0.2485	0.045	0.9056
ISOBUTANO	.1109022E+01	33.050	33.0500	30.565	32.0822	2.230	47.1583
N-BUTANO	.1167090E+01	38.260	38.2600	36.245	38.0050	1.025	40.6660
N-PENTANO	.1713080E+01	28.290	28.2900	28.080	29.4798	0.518	10.9461
		*****	*****	*****	*****	*****	*****
TOTAL LB-MOL/HR		100.000	100.0000	95.271	99.9994	4.729	100.0007
FLUJO TOTAL LB/HR * 0.578		5838.7	2695.8	5681.9	2577.3	265.9	114.5
PESO MOLECULAR PROMEDIO		59.387		59.630		55.708	
DENSIDAD RELATIVA A 60 F		0.0000		0.50664		8.12157	
BPL A 60 F		2823.7		768.7		2055.0	
MOLSO 60 F, 1 KG/CM2		15.871		4.320		11.550	
PROVISION PSIC (P ATR 14.7)		50.000					
TEMPERATURA 60 F		104.953					
DENSIDAD A P Y T LB/FT3		0.0000		31.5635		0.5474	
ENTALPIA BTU/LB		200.6458		153.8341		46.8194	
CONDUCTIVIDAD TERMICA, CAL/CM-SEC-K		0.		.50E-02		.21E-04	
VISCOSIDAD, CPS		0.000000		0.150211		0.241753	
CAPACIDAD CALORIFICA, BTU/LB-MOL-F		0.0000		-1.7176		20.6872	

CAPITULO 3

DESARROLLO DE PROGRAMAS

3.1 Balance de masa en un proceso cíclico.

Descripción teórica.

En un proceso, cualquiera que sea su naturaleza, la materia sigue leyes muy precisas fundamentadas en la ley de la conservación de la masa, las cuales exigen que en el proceso no pueda haber ni pérdidas ni ganancias de masa durante el mismo, excepto, por supuesto, en los procesos nucleares.

Para el diseño, así como para la evaluación económica de un proceso, es necesario definir la cantidad de materia y energía como primer paso para el desarrollo del mismo.

Un proceso cíclico es aquel donde productos ó subproductos del mismo son recirculados a la alimentación ó a algún otro punto del proceso, a fin de obtener una pureza ó una concentración específica del producto final; por lo que se requiere, para llegar a conocer los valores de las diversas corrientes, de un procedimiento iterativo, el cual seguirá una secuencia parecida a la del arranque del proceso hasta llegar a una estabilización; o bién, la resolución de un juego de ecuaciones simultáneas utilizando métodos numéricos, los cuales por su naturaleza resultan bastante complicados sin el uso de una computadora digital de gran rapidez.

Descripción técnica.

Se presenta un programa, el cual consiste en dos rutinas, la primera --

ro menor, sin embargo se busca la sencillez en el procedimiento. A continuación se escribe una matriz con los coeficientes, dejando del lado extremo derecho los términos independientes, como se representa:

$$\begin{array}{cccccccc}
 M_1 & M_2 & M_3 & M_4 & M_5 & M_6 & M_7 & T I \\
 1 & & & & & -1 & & F \\
 -X & 1 & & & & & & 0 \\
 -1 & 1 & 1 & & & & & 0 \\
 & -1 & & 1 & & & -1 & 0 \\
 & & -1 & -1 & 1 & & & 0 \\
 & & & & -X & 1 & & 0 \\
 & & & & -1 & 1 & 1 & P
 \end{array} \quad (3.8)$$

Todos los balances de masa así expresados toman la misma forma, por lo que no importa qué tan complicados sean éstos, o bien las ecuaciones en sí, si éstas se plantean con cuidado. En la diagonal siempre deben quedar números "1" automáticamente cuando las ecuaciones están bien planteadas.

La forma de llenar la matriz la explicaremos a partir de la ecuación (3.2).

Si $-X M_1 + M_2 = 0$, entonces en el renglón dos colocamos X abajo

de M_1 y 1 abajo de M_2 , quedando 0 en el término independiente.

En el planteamiento del problema se debe vigilar que en cada ecuación haya una sola incógnita por cada corriente, por lo que los datos del problema deben seguir ciertas reglas:

- a) En un equipo donde se deriva más de una corriente, se requieren los porcentajes de cada una de las corrientes.
- b) Se requieren los datos de alimentación, así como algún producto, si no, el problema quedará indefinido.

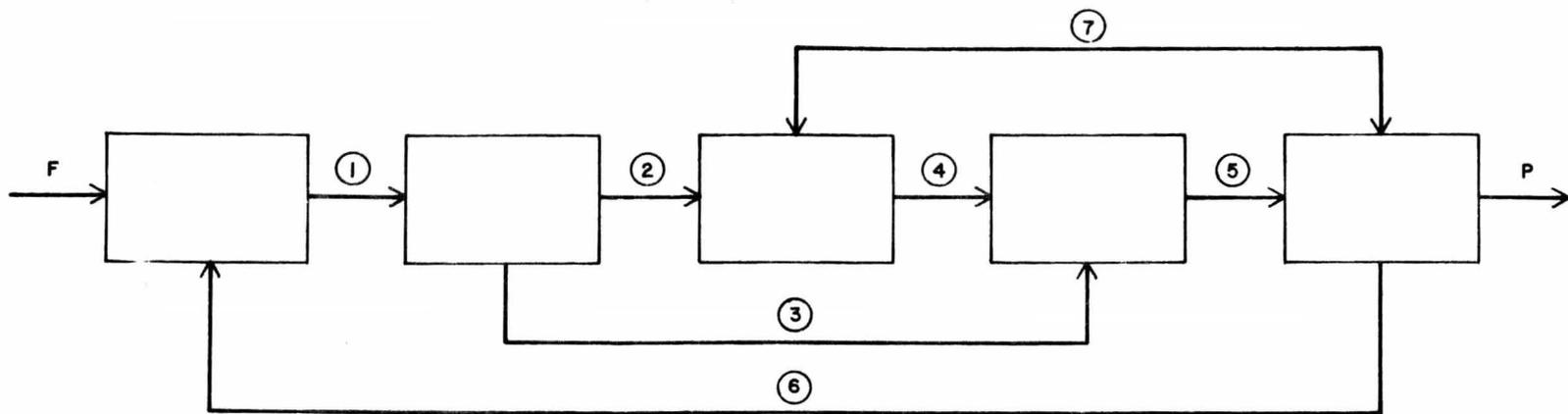
LA MATRIZ A

1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-1.00	0.00	100.00
-0.30	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
-1.00	1.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.00	-1.00	0.00	1.00	0.00	0.00	-1.00	0.00
0.00	0.00	-1.00	-1.00	1.00	0.00	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00	0.00	-0.50	1.00	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00	0.00	-0.40	0.00	1.00	0.00

CORRIENTE

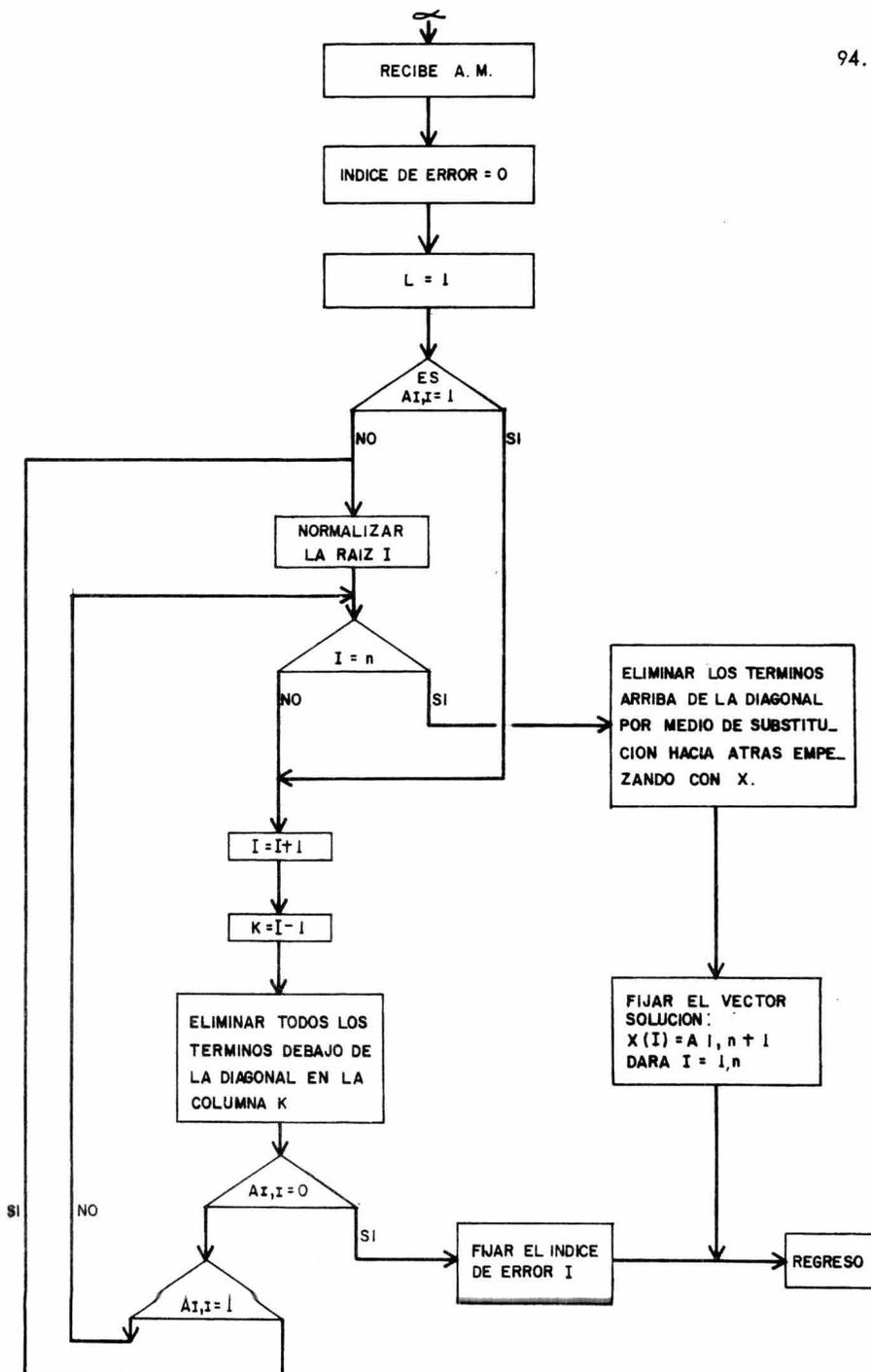
VALOR

1	600.00
2	180.00
3	420.00
4	580.00
5	1000.00
6	500.00
7	400.00



- ② 30 % CORRIENTE 1
- ⑥ 50 % CORRIENTE 5

Fig. 3.1 Ilustración del problema de un proceso cíclico.



3.2 Cálculo de la temperatura de flama teórica en la combustión de hidrocarburos.

Descripción teórica.

El cálculo de la temperatura de flama en la combustión de una mezcla de hidrocarburos sigue las siguientes bases teóricas:

- 1) El proceso es adiabático.
- 2) La combustión es perfecta.
- 3) El combustible y el aire se mezclan a la temperatura de referencia.
- 4) Todos los productos de la combustión se encuentran a una temperatura.

La reacción general de combustión en un hidrocarburo es:



por lo que podemos plantear balances de materia y energía con la información de cada compuesto en cuanto composición, calor de combustión, y datos de capacidad calorífica. El balance de masa se plantea a partir de las siguientes igualdades:

$$N_{CO_2} = N_c \quad . \quad . \quad . \quad . \quad (3.10)$$

$$N_{H_2O} = \frac{N_H}{2} \quad . \quad . \quad . \quad . \quad (3.11)$$

$$N_{O_2} = N_c + N_H/4 + N_S \quad (3.12)$$

$$N_{N_2} = N_{O_2} + 3.7619 \text{ (aire)} \quad (3.13)$$

$$N_{SO_2} = N_S \quad (3.14)$$

La cantidad de reactivos depende de la calidad de la combustión provocada por la mezcla aire-combustible.

El balance de energía se establece entre el calor de combustión de la mezcla y el cambio en la entalpia de los productos de la combustión:

$$\Delta H_{\text{productos}} = \Delta H_{\text{combustión}} \quad (3.15)$$

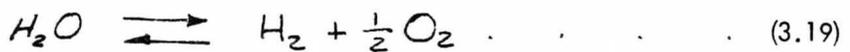
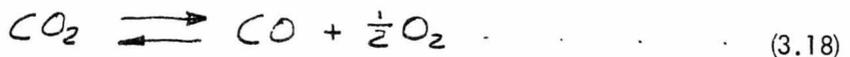
El primer término de esta igualdad se calcula a partir de los datos de capacidad calorífica de cada componente:

$$\Delta H_{\text{productos}} = \int_{T_{\text{ref}}}^T \sum_{i=1}^n n_i C_{P_i} dT \quad (3.16)$$

y el segundo término a partir de los calores de combustión de cada componente por su fracción mol.

$$\Delta H_c = \sum_{i=1}^n \Delta H_{c_i} \times X_{c_i} \quad (3.17)$$

Un factor importante que se presenta en temperaturas mayores que los 2900°F es la disociación de los productos de combustión.



por lo tanto el porcentaje de disociación es función de la temperatura y depende -

de la constante de equilibrio, así como la temperatura final es función del porcentaje de disociación, por lo que la inclusión de este factor complica la solución de la temperatura de flama.

Descripción técnica.

Para la resolución del algoritmo para el cálculo de la temperatura de flama se requiere el análisis del combustible, los datos de capacidad calorífica y el calor estandar de cada componente, a fin de plantear los balances. El programa que se plantea a continuación genera varias relaciones de aire con respecto a un aire teórico requerido, a fin de obtener una serie de resultados a diferentes relaciones. Los balances de masa requieren determinar el número de elementos C, H, O, S, del combustible a partir de cada componente a fin de determinar los productos y plantear el balance de energía.

Las capacidades caloríficas se plantean de la siguiente forma:

$$C_{pi} = a_{1i} + a_{2i}T + a_{3i}T^2 + a_{4i}T^3 + a_{5i}T^{-\frac{1}{2}} + a_{6i}T^{-2} \quad (3.20)$$

Método de solución.

A partir de las ecuaciones (3.16), (3.17), (3.20), la función error se plantea como:

$$F(T) = C_1T^4 + C_2T^3 + C_3T^2 + C_4T + C_5T^{1/2} + \frac{C_6}{T} + C_7 \quad (3.21)$$

la cual se logró integrando la ecuación (3.16) y agrupando términos de la siguiente

te forma:

$$C_1 = \sum_{i=1}^n \frac{n_i a_{4i}}{4} \quad (3.22)$$

$$C_2 = \sum_{i=1}^n \frac{n_i a_{3i}}{3} \quad (3.23)$$

$$C_3 = \sum_{i=1}^n \frac{n_i a_{2i}}{2} \quad (3.24)$$

$$C_4 = \sum_{i=1}^n n_i a_{1i} \quad (3.25)$$

$$C_5 = \sum_{i=1}^n 2n_i a_{5i} \quad (3.26)$$

$$C_6 = \sum_{i=1}^n -n_i a_{6i} \quad (3.27)$$

$$C_7 = -\Delta H_c - \left(C_1 T_{ref}^4 + C_2 T_{ref}^3 + C_3^2 T_{ref} + C_4 T_{ref} + C_5 T_{ref}^{-\frac{1}{2}} + \frac{C_6}{T_{ref}} \right) \quad (3.28)$$

donde N = número de componentes

$T_{ref} = 2980K$.

AH_c = calor estandar de combustión de la mezcla.

n_i = número de moles de cada componente en los productos a partir de la relación de aire.

La ecuación (3.21) es resuelta para la temperatura de flama usando el método iterativo de Newton-Raphson:

$$T_{r+1} = T_r - F(T_r) / \frac{dF}{dT} T_r \quad (3.29)$$

donde r es el número de iteraciones.

La derivada dF/dT está dada por:

$$\frac{dF}{dT} = 4C_1 T^3 + 3C_2 T^2 + 2C_3 T + C_4 + C_5 T^{-\frac{1}{2}} - \frac{2}{T^2} C_6 \quad (3.30)$$

Se encontró que este método no es sensible a la temperatura supuesta y

que convergía rápidamente.

A continuación se presenta el diagrama de bloques y los resultados del programa elaborado para la resolución del algoritmo. Los datos alimentados se obtuvieron de las referencias 13 y 19.

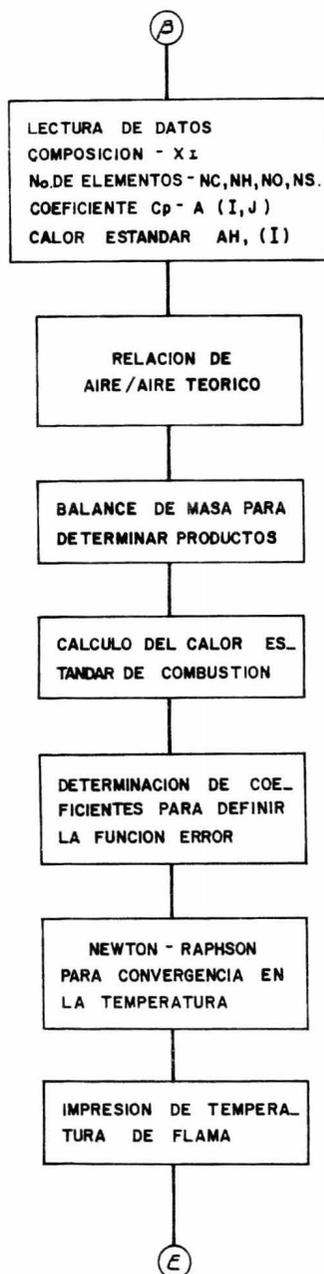


Fig. 3.3 Diagrama de bloques para el cálculo de la temperatura de flama.

CALCULO DE LA TEMPERATURA DE FLAMA EN LA COMBUSTION DE GAS NATURAL

COMPONENTE	FRACCION MOL	CALOR DE COMBUSTION CALORIAS/GMOL	C	H	O	S
METANO	0.94500	197750.00000	1	4	0	0
ETANO	0.02000	341261.00000	2	6	0	0
PROPANO	0.01800	488527.00000	3	8	0	0
BUTANO	0.00100	635384.00000	4	10	0	0
PENTANO	0.00050	782040.00000	5	12	0	0
HEXANO	0.00020	921370.00000	6	14	0	0
CO2	0.01330	0.00000	1	0	2	0

RESULTADOS

RELACION AIRE ACTUAL/AIRE TEORICO	TEMPERATURA DE FLAMA TEORICA (GRADOS KELVIN)	NUMERO DE ITERACIONES
0.50000	2105.25250	3
0.66667	2246.56356	3
0.83333	2343.13586	3
1.00000	2412.77015	3
1.16667	2187.00141	3
1.33333	2005.37622	3
1.50000	1855.80465	3
1.66667	1730.35549	3
1.83333	1623.56750	3
2.00000	1531.53785	3

TEMPERATURA SUPUESTA = 1500.00

3.3 Cálculo de la potencia de una bomba centrífuga.

Descripción teórica.

En el diseño y evaluación económica de un proceso el cálculo de la potencia de bombas es un factor muy importante, debido al costo y al consumo de energía que requiere este equipo, el cual debe suministrar la energía mecánica necesaria para cumplir con las condiciones requeridas en el proceso.

Los factores más importantes en este cálculo se deben a los cambios de elevación, la resistencia provocada por la fricción y los cambios de energía interna dentro de un sistema, los cuales se relacionan por medio de un balance total de energía mecánica a régimen continuo, el cual se representa en forma diferencial como:

$$\frac{g}{g_c} dz + v dP + \frac{v_1 dv_1}{g_c} = \sum \omega_o - dF \quad (3.31)$$

Esta ecuación se integra entre los puntos inicial y final del sistema:

$$Z_1 \frac{g}{g_c} - \int_1^2 v dP + \frac{v_1^2}{2 \times g_c} + \omega_o = Z_2 \frac{g}{g_c} + \frac{v_2^2}{2 \times g_c} + \sum F \quad (3.32)$$

donde V es el promedio de velocidad, por el coeficiente de corrección de la velocidad, y v el volumen específico del fluido.

Las ecuaciones anteriores son suficientemente generales para el tratamiento de casi cualquier problema de flujo y la base para muchas ecuaciones de diseño.

El término ΣF , que resume el efecto provocado por la fricción debida a la rugosidad de la tubería, a los accesorios de la misma y el patrón de flujo -- provocado por las propiedades del fluido, es un factor muy importante en el diseño de tuberías, ya que una vez definida la potencia de la bomba se deben conservar las condiciones.

Descripción técnica.

El algoritmo que presentamos a continuación está basado en el método de cálculo de LUMMUS Co. para bombas centrífugas.

Los datos que se deben alimentar al programa son:

- 1) Gasto en GPM.
- 2) Densidad relativa en las condiciones de operación.
- 3) Longitud de la tubería.
- 4) Número y tipo de accesorios.

Los resultados del programa son:

- 1) El NPSH requerido por la bomba.
- 2) El NPSH disponible en el sistema.
- 3) Recomendación de la altura del tanque de succión.
- 4) Cabeza total de la bomba.
- 5) Potencia de la bomba.

El balance total de energía mecánica lo podemos plantear en función

de la presión de succión y la presión de descarga como sigue:

$$\Delta P = P_D - P_S \quad (3.33)$$

para lo cual tenemos que la presión de succión es:

$$P_S = P_1 + \Delta P_{\text{elev.}} - \Delta P_{\text{fricción}} \quad (3.34)$$

P_1 es la presión a la cual se encuentra el recipiente, ΔP_{elev} es el cambio de presión debido a la diferencia de altura entre el recipiente y el nivel de la bomba; y $\Delta P_{\text{fricción}}$ son las pérdidas de energía debidas a la fricción en la tubería de succión.

La presión de descarga es:

$$P_D = P_2 + \Delta P_{\text{elev.}} + \Delta P_{\text{fricción}} + \Delta P_{\text{varios}} \quad (3.35)$$

P_2 es la presión a la cual se encuentra el recipiente en el que se descarga el fluido, ΔP_{elev} es el cambio de presión debido a la diferencia de altura entre el nivel de la bomba y el nivel de descarga en el recipiente, $\Delta P_{\text{fricción}}$ son las pérdidas por fricción en la tubería de descarga, y ΔP_{varios} corresponde a cambios de presión causados por instrumentos y válvulas de control, más cambios imprevistos anteriormente.

El cambio de presión por la diferencia de altura lo podemos calcular como:

$$\Delta P_{\text{elev.}} = \frac{h S_g}{2.31} \quad (3.36)$$

La altura (h) corresponde al equipo en la succión o en la descarga, según sea el caso. En el primero (si no se conoce dicha altura) se recomienda que sea 2ft., mayor que la cabeza neta de succión positiva disponible (NPSHD)

$$\text{ALTURA SUCCION} = \text{NPSH}_D + 2 \text{ft.} \quad (3.37)$$

En el segundo, dicha altura se debe conocer de antemano.

La pérdida de presión por fricciones la podemos conocer por medio de la ecuación:

$$\begin{aligned} \Delta P_{\text{fricción}} &= \left(\frac{\Delta P}{100} \right)_{\text{fricción}} \times \frac{L_T}{100} \\ \left(\frac{\Delta P}{100} \right)_{\text{fricción}} &= 9.401 \omega^2 / 10^6 \rho \phi^{5.3} \end{aligned} \quad (3.38)$$

siendo L_T , la longitud total la cual se obtiene a partir de la longitud de la línea y de la suma de las longitudes equivalentes de los accesorios del sistema.

En el programa se encuentran incluidos los factores de longitud equivalente que corresponde a cada tipo de accesorio. También se incluyó un factor de seguridad para diseño, correspondiente a tres veces la longitud total.

Este programa incluye una relación gráfica entre el gasto (GPM) y la cabeza neta de succión positiva que requiere la bomba, utilizando como parámetro las revoluciones por minuto que se desean en el impulsor.

Se recomienda que la cabeza neta de succión positiva disponible sea 3ft., mayor que la requerida por la bomba (como mínimo).

$$\text{NPSH}_D = \text{NPSH}_R + 3 \text{ft.} \quad (3.39)$$

Con este valor ya podemos conocer la altura del equipo en la succión.

Si tenemos vacío en la succión entonces:

$$NPSH_D = NPSH_R + 6 \text{ ft.} \quad (3.40)$$

Una vez determinada la caída de presión del sistema, ya podemos conocer la cabeza y la potencia de la bomba.

$$H = \frac{\Delta P \times 2.31}{S_g} \quad (3.41)$$

$$POT = \Delta P \frac{Q_{dis.}}{1715} \quad (3.42)$$

Se presenta otra relación gráfica entre el gasto (GPM) y la eficiencia de la bomba, con la cual podemos conocer la potencia real de la bomba.

$$bHP = \frac{POT}{\eta} \quad (3.43)$$

A continuación presentamos un diagrama de bloques que nos muestra el método de solución.

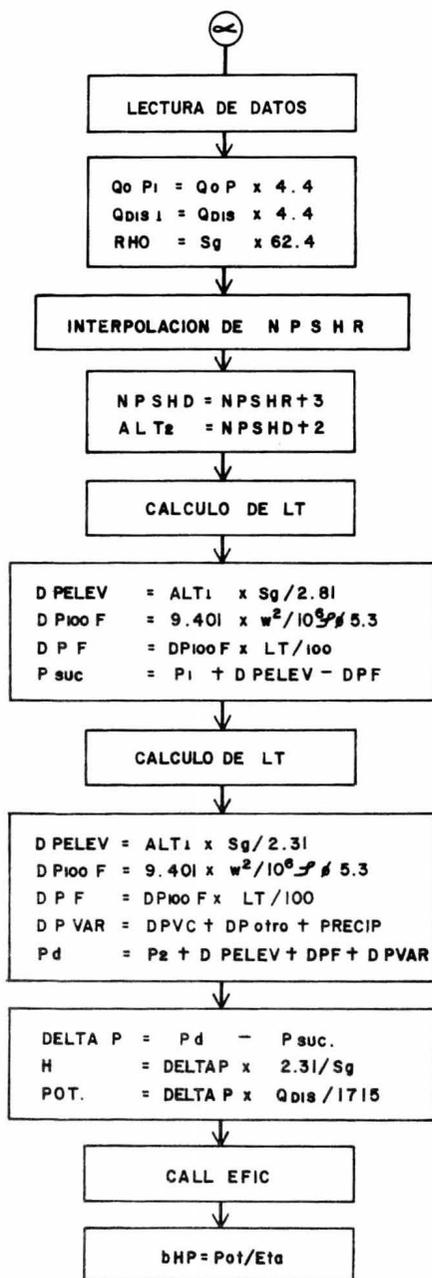


Fig. 3.4 Diagrama de bloques. Bomba Centrífuga.

3.4 Análisis del rendimiento de un intercambiador de tubo y coraza existente.

Descripción teórica.

En la economía de un proceso a nivel industrial, uno de los factores más importantes que se debe tener en cuenta es el máximo aprovechamiento de la energía suministrada al proceso, ya sea energía mecánica ó energía calorífica.

El aprovechamiento de la energía calorífica se lleva a cabo mediante el intercambio sucesivo de calor por gradientes de temperatura ó calores latentes de corrientes diferentes, donde una es la fuente y otra es el receptor. De la misma forma se puede aprovechar calor generado dentro del sistema por reacciones exotérmicas a fin de optimizar procesos.

Existe en la actualidad una gran variedad de equipos de intercambio de calor, desde el diseño sencillo de tubos concéntricos hasta condensadores de complejas superficies con grandes áreas de transferencia. El tipo más común a escala industrial es el de intercambiadores de tubo y coraza, debido a su versatilidad dentro de diferentes procesos y a muy diversas condiciones de operación.

Descripción técnica.

El análisis que se presenta nos da como conclusión que el intercambia-

Bomba CENTRIFUGA No : 1

FLUIDO : CRUDO

DATOS DE LA CORRIENTE :

FLUJO MASICO LB/HR	=	82254.71	DENSIDAD LB/FT3	=	51.79	VISCOSIDAD CP	=	0.45	
GASTO OPERACION M3/HR * GPM	=	39.00	171.60	DENSIDAD RELATIVA	=	0.830	PRESION DE VAPOR PSIA	=	0.09
GASTO DISEÑO M3/HP * GPM	=	45.00	198.00						

RESULTADOS :

HPSH REQUERIDO FT	=	7.54	PRESION DE SUCCION PSIA	=	19.25	CABEZA DE LA BOMBA FT	=	230.55
HPSH DISPONIBLE FT	=	10.54	PRESION DE DESCARGA PSIA	=	102.09	POTENCIA DE LA BOMBA HP	=	9.56
ALTURA DEL EQUIPO EN LA SUCCION FT	=	12.54	DIFERENCIA DE PRESION PSIA	=	82.84	POTENCIA AL FRENO DE LA BOMBA BHP	=	19.99

El tipo de tubo y coraza estudiado es apropiado para las condiciones de proceso establecidas.

Hay tres puntos de significación en la adaptabilidad del intercambiador:

- 1) El coeficiente global de transferencia "limpio" es determinado por las propiedades fisicoquímicas de los fluidos y por su patrón de flujo.
- 2) Por medio del balance de calor, del área del intercambiador y de la diferencia verdadera de temperaturas, se obtiene un valor de diseño para el coeficiente global de transferencia, U_D , el cual debe ser menor que el calculado, de manera que el factor de obstrucción, R_D , el cual es una medida del exceso de superficie, nos garantice la operación del intercambiador por un periodo de servicio razonable.
- 3) La caída de presión permitida para las dos corrientes no debe excederse.

Las condiciones de proceso requeridas para la evaluación de intercambiador son:

- a) Temperaturas de entrada y salida de ambas corrientes.
- b) Flujos másicos.
- c) Datos de capacidad calorífica, conductividad térmica, densidad

relativa, y viscosidad de los fluídos en las condiciones de operación.

- d) El factor de obstrucción requerido y las caídas de presión permisibles.

Los datos del cambiador existente que se deben conocer son:

- a) Diámetro interno de la coraza, espaciado de los deflectores y el número de pasos.
 b) Número, longitud, diámetro, especificación, arreglo y número de pasos de los tubos.

Para iniciar la secuencia de cálculo, lo primero es determinar qué fluido pasará por la coraza y cual por los tubos; no hay ninguna regla que nos defina ésto, sino únicamente criterios a partir de las áreas de flujo.

La secuencia de cálculo que se presenta es la desarrollada por Donald, Q. Kern, "Procesos de Transferencia de Calor".

La secuencia se inicia con el balance de calor:

$$Q = w_c (T_1 - T_2) = w_c (t_2 - t_1) \quad (3.44)$$

y el cálculo de la diferencia de temperaturas:

$$\Delta T = \frac{(T_1 - t_2)(T_2 - t_1)}{\ln \left(\frac{T_1 - t_2}{T_2 - t_1} \right)} FT \quad (3.45)$$

El cálculo de las temperaturas calóricas se realiza por medio de las siguientes ecuaciones:

Para el fluido caliente tenemos:

$$T_c = T_2 + F_c (T_1 - T_2) \quad \dots \quad (3.46)$$

y para el fluido frío:

$$t_c = t_1 + F_c (t_2 - t_1) \quad \dots \quad (3.47)$$

El factor F_c lo obtenemos de:

$$F_c = \frac{\frac{1}{K_e} + \frac{r}{r-1}}{1 + \frac{\ln(K_e+1)}{\ln r}} - \frac{1}{K_c} \quad \dots \quad (3.48)$$

donde:

$$K_c = \frac{U_H - U_c}{U_c} \quad y \quad r = \frac{T_2 - t_1}{T_1 - t_2} \quad (3.49)$$

U_H y U_c se refieren a los coeficientes globales de transferencia de calor calculados en la terminal caliente y en la terminal fría respectivamente.

El cálculo del coeficiente global limpio se realiza a partir de los coeficientes de película del lado de la coraza y de los tubos.

$$U_{\text{limpio}} = \frac{h_{i0} \times h_o}{h_{i0} + h_o} \quad \dots \quad (3.50)$$

Para conocer los coeficientes de película se han propuesto en diversos artículos las siguientes ecuaciones:

$$h_{i0} = \left[\left(\frac{1.86 R_e P_r D}{T_L} \right)^{0.33} \frac{k}{D} \right] \frac{D}{D_{ext}} \quad R_e \leq 2100 \quad (3.51)$$

$$h_{i0} = \left[\left(0.027 R_e^{0.8} P_r \right)^{0.33} \frac{k}{D} \right] \frac{D}{D_{ext}} \quad R_e > 10,000$$

y para el intervalo $2100 < Re < 10,000$ se hace una interpolación entre las dos relaciones.

$$h_o = 0.36 Re^{0.55} Pr^{0.35} \frac{k}{D_{equiv.}} \quad (3.52)$$

Para las tres ecuaciones tenemos:

$$Re = \frac{DG}{\mu} \quad y \quad Pr = \frac{C_p \mu}{k} \quad (3.53)$$

y ya que conocemos el valor de U_L podemos calcular el valor del factor de obstrucción.

$$R_D = \frac{U_L - U_D}{U_L \times U_D} \quad (3.54)$$

Como criterio tenemos que si R_D excede al factor de obstrucción requerido, el cambiador cumple desde el punto de vista térmico.

Ahora debemos comprobar si la caída de presión no excede de la permitida para lo cual calculamos las caídas de presión de la siguiente manera:

$$\Delta P_{coraza} = \frac{f G_s^2 D_s (N+1)}{5.22 \times 10^{10} D_{es} \phi_s} \quad (3.55)$$

y

$$\Delta P_{tubos} = \Delta P_t + \Delta P_{retorno} \quad (3.56)$$

$$\Delta P_t = \frac{f G_t^2 \times L_n}{5.22 \times 10^{10} D_s \phi_t}$$

$$\Delta P_{retorno} = \frac{L_n}{S} \times \frac{V^2}{2g} \times \frac{62.5}{144}$$

En el caso que la caída de presión permitida no se ha excedido, podemos concluir que el cambiador cumple con las condiciones de proceso.

A continuación se presenta un diagrama de flujo en el cual se muestra la secuencia de cálculo.

Esta misma secuencia se puede aprovechar para diseño, suponiendo cambiadores existentes, hasta lograr el óptimo.

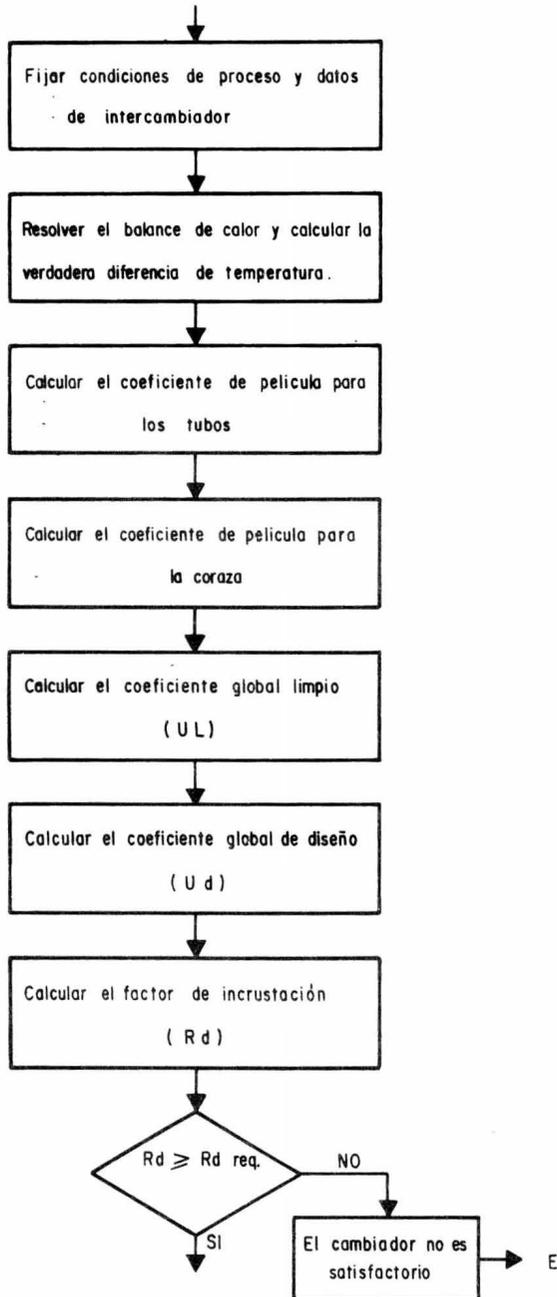


Fig. 3.5 Diagrama de bloques.

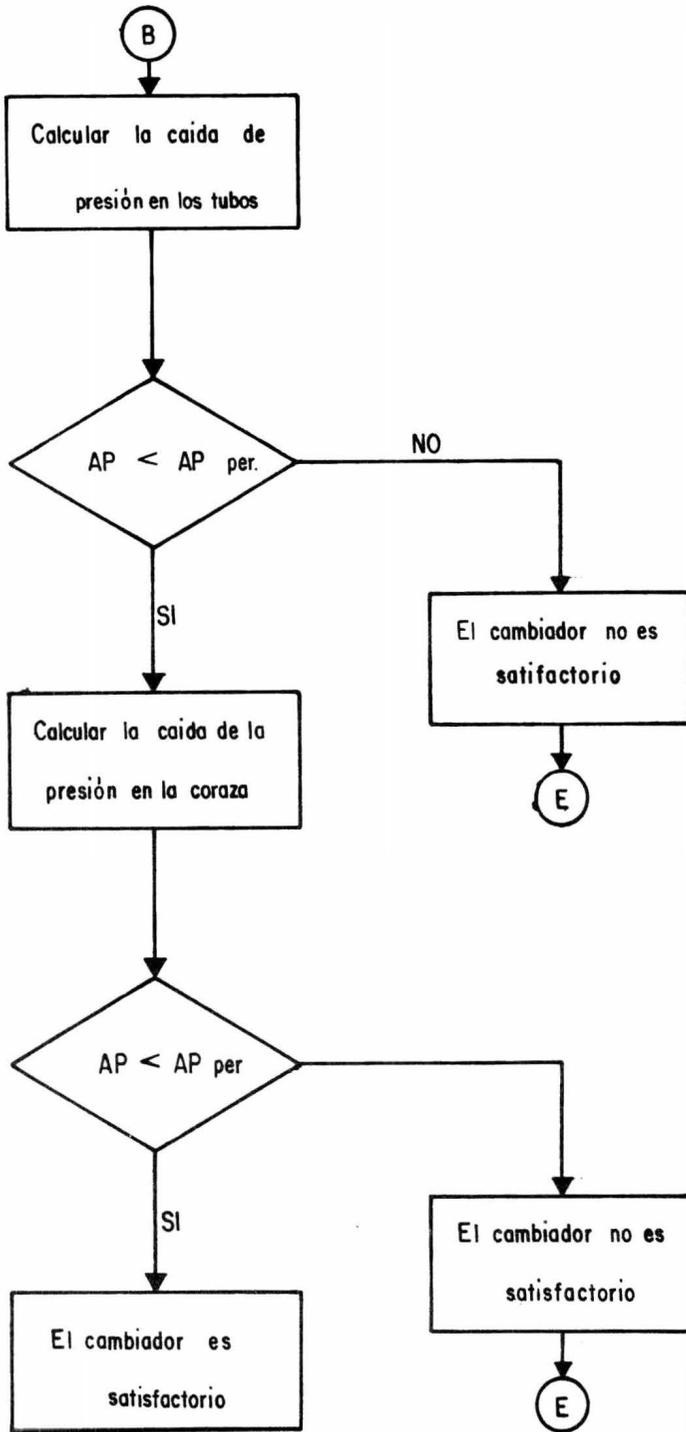


Fig. 3.6 Diagrama de bloques. Análisis hidráulico.

INTERCAMBIADOR :

CORAZA

DIAMETRO INTERIOR = 21.25 PLG
 ESPACIADO DE LOS DEFLECTORES = 5.00 PLG
 PASOS = 1

TUROS

NUMERO = 158
 LONGITUD = 16.00 FT
 DIAMETRO EXTERIOR = 1.00 PLG
 BWG = 13
 PITCH = 1.25 PLG
 ARREGLO = EN CUADRO
 PASOS = 4

SERVICIO:

NOMBRE DEL FLUIDO = KEROSENA 42 API
 FLUJO MASICO = 43800.00 LB/HR
 TEMPERATURA DE ENTRADA = 390.00 GR.F
 TEMPERATURA DE SALIDA = 200.00 GR.F

NOMBRE DEL FLUIDO = AGUA DE 34 API
 FLUJO MASICO = 149000.00 LB/HR
 TEMPERATURA DE ENTRADA = 100.00 GR.F
 TEMPERATURA DE SALIDA = 170.00 GR.F

CALOR TRANSFERIDO = 5110700.00 BTU/HR
 DIFERENCIA CORREGIDA DE TEMPERATURA = 135.71 GR.F
 AREA DE TRANSFERENCIA DE CALOR = 661.83 FT*FT

COEFICIENTE DE PELICULA DEL LADO DE LA CORAZA = 176.95 BTU/HR(FT*FT)GR.F

COEFICIENTE DE PELICULA DEL LADO DE LOS TUBOS = 118.23 BTU/HR(FT*FT)GR.F

COEFICIENTE GLOBAL LIMPIO = 70.87 BTU/HR(FT*FT)GR.F

COEFICIENTE GLOBAL DE DISEÑO = 56.90 BTU/HR(FT*FT)GR.F
 FACTOR DE INCRUSTACION CALCULADO = 0.00346 HR(FT*FT)GR.F/BTU
 FACTOR DE INCRUSTACION REQUERIDO = 0.00300 HR(FT*FT)GR.F/BTU

CAIDA DE PRESION EN LA CORAZA = 3.73 LB/(PLG*PLG)
 CAIDA DE PRESION PERMITIDA = 10.00 LB/(PLG*PLG)

CAIDA DE PRESION EN LOS TUBOS = 9.35 LB/(PLG*PLG)
 CAIDA DE PRESION PERMITIDA = 10.00 LB/(PLG*PLG)

3.5 Cálculo y optimización de un evaporador.

Descripción teórica.

En la industria química la manufactura de agentes químicos tales como la sosa cáustica, sal de mesa, y azúcar se logra a partir de soluciones diluídas de las que deben eliminarse grandes cantidades de agua antes de poder llegar a la cristalización en equipo adecuado para este fin.

Para lograr ésto se utilizan evaporadores de múltiple efecto a régimen contínuo, de los cuales se encuentran básicamente dos tipos: con alimentación en paralelo y a contra corriente, (Figs. 3.7 y 3.8). Los criterios de selección de uno u otro se enuncian en "Procesos de Transferencia de Calor", Donald Q. Kern, Cap. 14.

Aún cuando los evaporadores de múltiple efecto son capaces de altas eficiencias térmicas, ésto se ve afectado debido al aumento del punto de ebullición sobre la temperatura de saturación correspondiente al agua pura debido al aumento en concentración.

El análisis de la operación se logra a partir del balance total de materia y de los balances de energía correspondientes a cada efecto.

Balance total de materia:

$$m_f X_f = m_n X_n \quad (3.57)$$

m_f = alimentación, lb/hr

x_f = fracción en peso de sólidos en la alimentación

m_n = producto, lb/hr

x_n = fracción en peso de sólidos en los productos

Balances de energía en el efecto 1:

$$m_{i-1}(H_{fi-1}) + (m_{i-2} - m_{i-1})(H_{fgi-1}) = (m_{i-1} - m_i)H_{gi} + m_i H_{fi} \quad (3.58)$$

donde:

m_i = flujo másico de concentrado del efecto i

H_{fi} = Entalpia del líquido del efecto i , BTU/lb.

H_{gi} = Entalpia del gas del efecto i , BTU/lb.

H_{fgi} = Calor latente de vaporización del vapor en el efecto i .

Para el primer efecto $m_{L-1} = m_f$ y $m_{L-2} - m_{L-1} = m_s$. El juego de $n + 1$ ecuaciones lineales simultáneas tiene $n + 1$ incógnitas, m_1, m_n, m_s, \dots . Los coeficientes en estas ecuaciones son las entalpias de las corrientes apropiadas. La entalpia de cada corriente es una función de la temperatura normal de ebullición, T , de la fracción peso de las salidas, x , y del incremento de la temperatura de ebullición, E , debido a la concentración de salidas en las corrientes líquidas. Las ecuaciones para el cálculo de H_{gi} y H_{fgi} son para agua pura y se escriben:

$$H_{gi} = 1075 + 0.3466(T_i) + 0.45(E_i) \quad (3.59)$$

donde: $Q_i = (m_{i-2} - m_{i-1}) (H_{f_{gi}} - 1)$, BTU/hr

$U_i =$ coeficiente global de transferencia de calor, BTU/hr - ft²

$A_i =$ área total de transferencia, ft²

$T_i = T_{i-1} - (T_i + E_i)$

En el primer efecto $q_i = m_s (H_{f_{gs}}) Y_s$ y $T_1 = T_s - (T_i + E_i)$ ya que el vapor es usado para calentar este efecto cuando se encuentra flujo en paralelo.

Debido a que es necesario estimar la temperatura y la concentración en cada efecto antes de calcular los flujos y la cantidad de calor transferido, una aproximación iterativa se requiere para la solución del problema. Estas estimaciones de T y X son hechas y modificadas hasta que las áreas de cada efecto son iguales y las concentraciones convergen a las estimadas. Cuando esta condición es encontrada, la solución del problema es correcta.

Descripción técnica.

Dadas las condiciones de la alimentación en un evaporador de múltiple efecto en paralelo ó a contracorriente, se pretende determinar lo siguiente:

- 1) La cantidad de vapor requerida y la economía del mismo definida como lb agua evaporada/lb de vapor en función del número de efectos y de la temperatura de alimentación.
- 2) El área de transferencia.
- 3) El aumento del punto de ebullición en cada efecto.

$$H_{fgi} = 1104 - 0.64(T_i) \quad (3.60)$$

La ecuación (3.59) para la entalpia de vapor de agua es una aproximación lineal de las tablas de vapor desde $T = 50^\circ\text{F}$ a $T = 350^\circ\text{F}$, más el sobrecalentamiento debido al incremento de temperaturas; de una manera similar, la ecuación (3.60) es una aproximación lineal del calor latente de vaporización.

La entalpia de las corrientes líquidas pueden ser escritas como:

$$H_{fi} = C_{pi}(t - 32) \quad (3.61)$$

para materiales que tienen un ligero incremento en su punto de ebullición. La capacidad calorífica, c_p , puede ser una función de X y T .

En sistemas donde existe un gran incremento en el punto normal de ebullición, se estima necesario considerar los calores de solución para calcular H_f . Los datos de entalpia concentración son conocidos para algunos sistemas de interés. Se utiliza una forma polinomial a fin de aproximar estos datos.

Para determinar los flujos de entrada y salida de cada efecto es necesario suponer la temperatura y concentración para el efecto en cuestión, dicha estimación se considera correcta cuando los resultados obtenidos satisfacen las ecuaciones que rigen la transferencia de calor.

Estas son:

$$Q_i = U_i A_i \Delta t_i \quad (3.62)$$

- 4) El coeficiente global de transferencia de calor para cada efecto.
- 5) La cantidad de calor transferida para cada efecto.
- 6) La temperatura normal de ebullición en cada efecto.
- 7) El flujo másico del concentrado.
- 8) Concentración de salidas en cada efecto.

Se consideran las áreas de transferencia iguales para cada efecto.

Método de solución:

Al comenzar el cálculo se estima T y X en cada efecto, dividiendo el incremento de temperatura total entre el número de efectos para el flujo en paralelo:

$$\Delta t = \frac{T_s - T_n}{n} \quad (3.63)$$

La temperatura normal de ebullición para el primer efecto será:

$$T_1 = T_s - \Delta T \quad (3.64)$$

y para los siguientes:

$$T_i = T_{i-1} - \Delta T \quad (3.65)$$

Las concentraciones serán inicialmente distribuidas de una manera similar:

$$\Delta X = \frac{x_f - x_p}{n} \quad (3.66)$$

para el primer efecto:

$$X_i = X_f - \Delta X \quad (3.67)$$

y para los subsiguientes:

$$X_i = X_{i-1} - \Delta X \quad (3.68)$$

Para cada efecto, T_i y X_i son utilizados para calcular E_i , H_{fi} , H_{fgi} , y U_i . Las funciones usadas para calcular E , H_f , y U son dependientes de los materiales evaporados y se deben incluir para cada problema. Las funciones para calcular H_g y H_{fg} son generales para cualquier problema. Estos parámetros se usan para determinar los coeficientes de la ecuación lineal de balance de energía mostrada en la matriz de la figura 3.9. La solución de estas ecuaciones lineales consiste en los flujos para cada efecto y se logra mediante la subrutina SIMQ (9).

Determinados los flujos, se calculan las áreas de transferencia de cada efecto utilizando la ecuación (3.62). Las áreas se comparan entre sí para comprobar su igualdad con un 0.5% de error.

Las concentraciones en cada efecto son calculadas utilizando:

$$X_i = \frac{X_f m_f}{m_i} \quad (3.69)$$

Estas son comparadas individualmente con las concentraciones estimadas originalmente, previendo un porcentaje de error de 0.5%. Si las áreas son iguales y las concentraciones concuerdan, todas las características de operación son co

nocidas y el algoritmo se ha cumplido.

Cuando estos valores no convergen, las temperaturas son ajustadas usando:

$$\bar{A} = \sum_{i=1}^n \frac{A_i}{n} \quad (3.70)$$

$$\Delta t'_i = \Delta t_i \frac{A_i}{\bar{A}} \quad (3.71)$$

Esta corrección en ΔT_i puede no resultar cuando:

$$\sum \Delta t'_i \neq T_s - T_n - \sum_{i=1}^n E_i \quad (3.72)$$

lo cual es necesario para el establecimiento del problema, por lo que es necesario ajustar el ΔT utilizando:

$$\Delta t''_i = \Delta t'_i \frac{T_s - T_n - \sum_{i=1}^n E_i}{\sum_{i=1}^n \Delta t'_i} \quad (3.73)$$

Los nuevos T son utilizados en lugar del original y el cálculo es repetido hasta lograr la igualdad de las áreas de transferencia y la concordancia de las concentraciones.

A continuación se encuentra el diagrama de bloques y el programa que se utiliza para la solución del algoritmo que nos presenta Mc Cabe & Smith en el capítulo 16 de su libro "Unit Operations of Chemical Engineering".

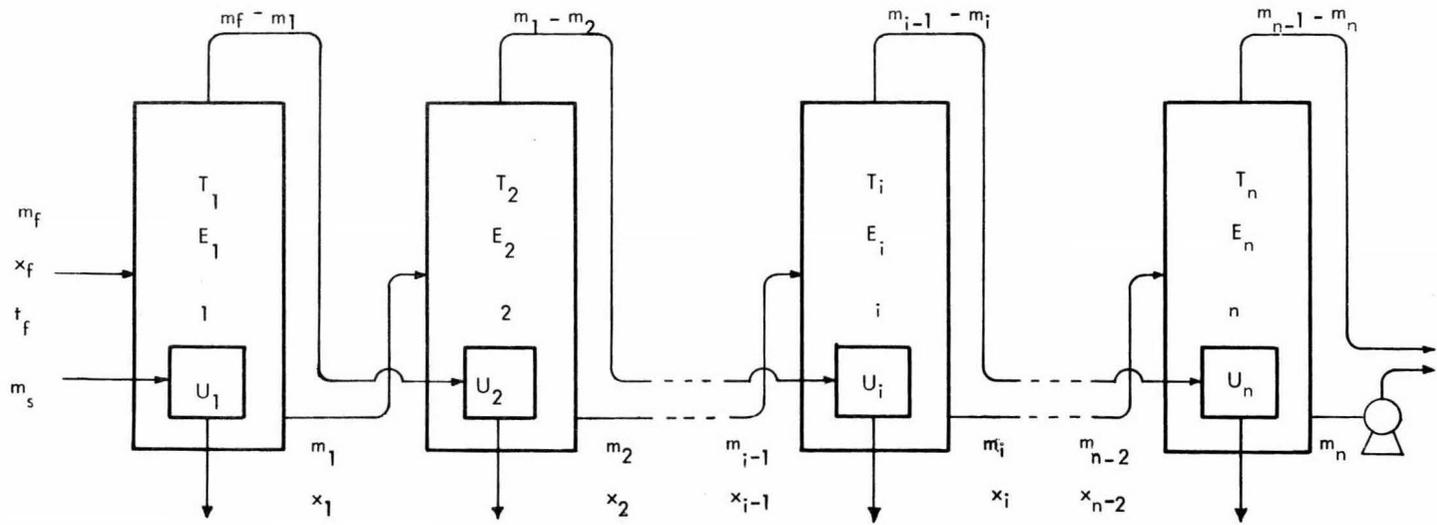


Fig. 3.7 Evaporador de múltiple efecto en paralelo.

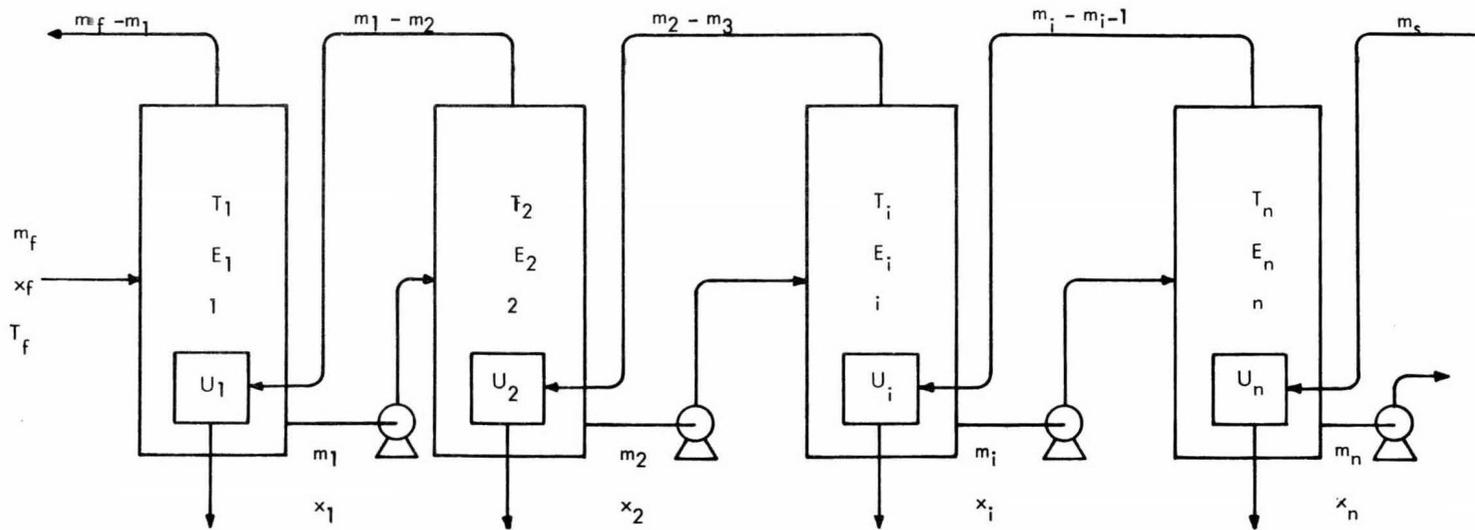
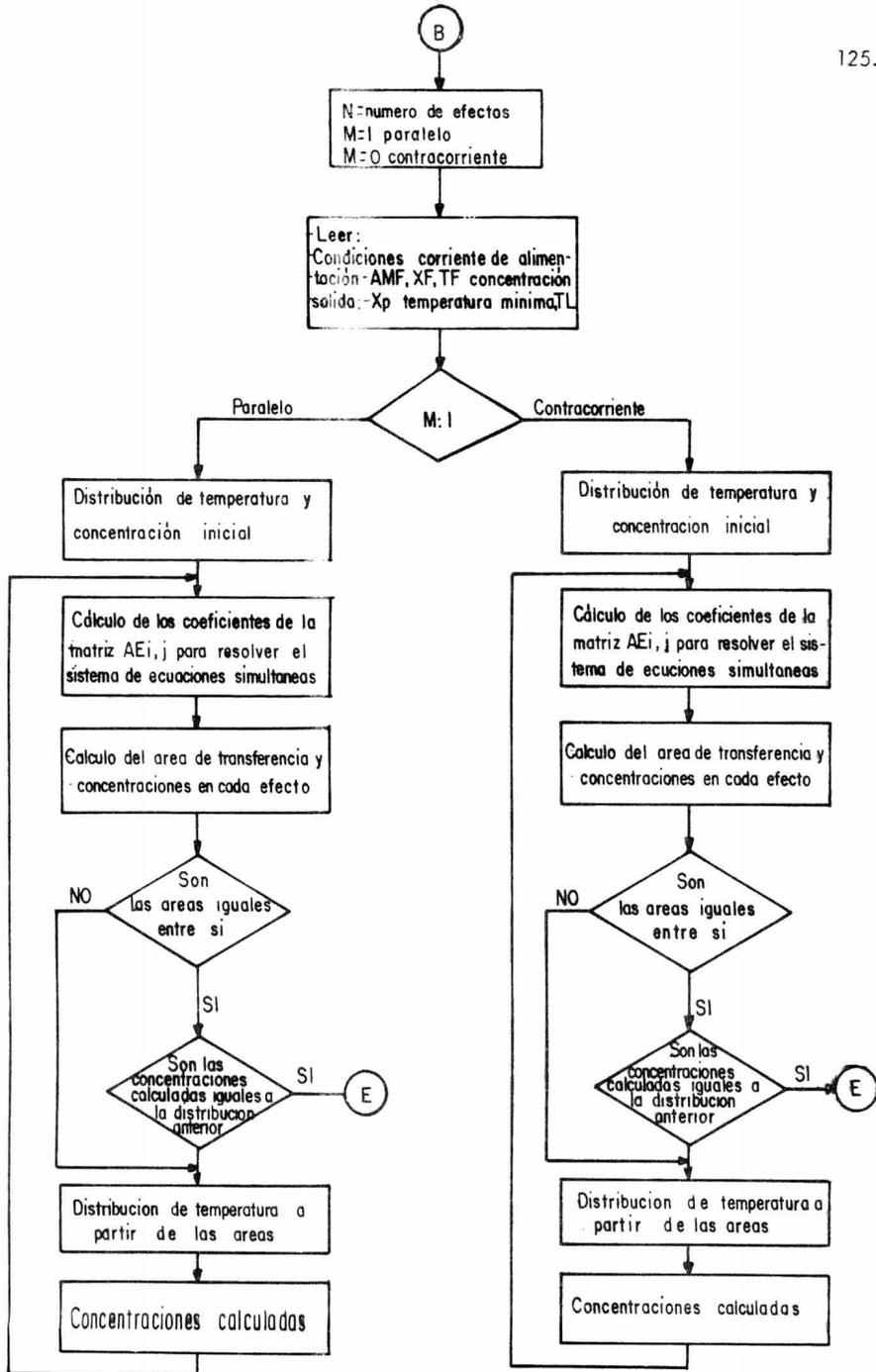


Fig. 3.8 Evaporador de múltiple efecto contracorriente.



ALIMENTACION EN PARALELO 3 EFECTOS

DATOS DE ENTRADA:

AMF LB/HR	XF	TF, GR. F	XP	MINIMA T	YS	TS, GR. F
200000.0	0.05	60.0	0.50	101.7	1.00	344.3

SOLUCION DESPUES DE 4 ITERACIONES:

MS=115303.LB/HR ECONOMIA DE VAPOR 1.56

EFFECTO	AREA FT2	T(I), GR.F	E(I), GR.F	U(I)	Q(I), BTU/HR	M(I), LB/HR	X(I)
1	2626.4	293.0	2.8	800.	101887012.	141644.	0.07
2	2629.3	245.1	7.2	500.	53482532.	80346.	0.12
3	2635.2	101.7	70.0	300.	58056487.	20000.	0.50

3.6 Diseño y costo de una torre de destilación fraccionada y su equipo.

Descripción teórica.

La separación de un producto ó subproducto de una mezcla de compuestos debe ser llevada a cabo cuidando la pureza ó la concentración del mismo, para utilizarse como producto de venta ó como materia prima, tal es el caso típico del petróleo, el cual contiene una gran variedad de hidrocarburos que requiere todo un proceso de refinación para obtener materias primas y energéticos.

La destilación fraccionada es la operación unitaria para la separación de compuestos volátiles de una mezcla; basándose en la diferencia que existe entre los puntos de ebullición de compuestos más pesados, habiéndose logrado separaciones de compuestos de muy similares propiedades.

El proceso consiste básicamente en lograr el contacto de vapores y líquidos de los diversos componentes en una etapa de equilibrio logrando una transferencia de masa y energía. Se requiere un cierto número de estas etapas colocadas en serie hasta lograr que los vapores del compuesto ligero logren la pureza necesaria en el domo de una torre y los compuestos pesados salgan por los fondos.

Los métodos de cálculo en el diseño de una torre de destilación fraccionada deben ser rigurosos, ya que es un equipo crítico debido a los productos obtenidos, a sus requerimientos energéticos y al alto costo del equipo, por lo

que se deben evitar grandes sobrediseños.

En este trabajo se presenta un diseño y una evaluación económica preliminar de una torre de destilación basados en métodos cortos.

Descripción técnica.

Se presenta una secuencia de cálculo a fin de determinar el número de platos de la torre, su diámetro, así como las características del condensador y rehervidor, el fondo de la torre y el tanque de reflujo. Calculamos además el costo de todos estos componentes.

Esta secuencia se basa en el método corto de cálculo de una torre de destilación de Fenske-Underwood-Gilliland para determinar el aspecto de proceso de la torre. Para el cálculo de tamaños y costos de los equipos se utilizan métodos tradicionales.

Se presenta la siguiente secuencia de cálculo:

Determinación de la separación de componentes a reflujo total, así como el número mínimo de platos, por las ecuaciones de Fenske.

Determinación de la relación de reflujo mínimo a partir de la ecuación de Underwood por el Método de Ripps.

Evaluación del número de etapas teóricas a la relación de reflujo óptimo, el cual se calcula por la Ecuación de Van-Winkle-Todd, a partir de la correlación de Gilliland.

Determinación del diámetro de la torre a partir del flujo de vapor en el fondo y el domo de la torre usando la correlación de Souders-Brown para la máxima velocidad de vapor.

Cálculo de la altura de la torre a partir del número de platos, la eficiencia especificada del plato y el espaciamiento en los mismos. Se toma en cuenta además la altura de los fondos de la torre, el espacio de estabilización en los domos, y el faldón.

Cálculo del espesor de los materiales de construcción de la torre y del acumulador de reflujo de acuerdo al ASME Pressure Vessel Code, Div. I.

Se determina el costo de la torre y del acumulador de reflujo a partir de datos publicados de costo en revistas técnicas, tomando como parámetro el peso del equipo.

Se determina el tamaño del rehervidor y del condensador usando temperaturas especificadas de agua de enfriamiento y vapor, así como coeficientes globales de resistencia a la transferencia de calor especificados (U).

Se determina el costo del rehervidor, condensador, y platos a partir de datos publicados.

Estima el tamaño de bombas y motores requeridos.

Los datos requeridos en este estudio son los siguientes:

a) Composición de la alimentación.

- b) Separación deseada.
- c) Propiedades físicas: Se calcula por medio de las subrutinas enumeradas en el capítulo de Propiedades como sigue:
 - 1) Valores de constante de equilibrio por el método de Chao-Seader-Grayson-Streed.
 - 2) Densidades por el método Starling-Han.
 - 3) Tensiones superficiales por el método de Riedel.
 - 4) Calores de vaporización por el método de Riedel-Plank-Miller.
- d) Parámetros de Diseño.
 - 1) Presión.
 - 2) Eficiencia de Plato.
 - 3) Espaciamiento de Platos, faldón y espaciamiento del domo.
 - 4) Tiempos de residencia en el acumulador de reflujo y en los fondos de la torre.
 - 5) Factor de Corrosión, peso específico del metal, y eficiencias de soldadura en uniones.
 - 6) Temperaturas de agua de enfriamiento y de vapor.
 - 7) Resistencias a la transferencia de calor.
- e) Factores de costo. El índice de costo para equipo de Marshall y Stevens al año en curso.

Los límites de aplicación son determinados por la validez de las propiedades calculadas, las cuales son especificadas en el Capítulo 2.

El diseño de recipientes a presión y sus costos están basados en la construcción en acero, lo mismo para los platos de la torre. Otros costos válidos pueden ser obtenidos para otros materiales teniendo los datos de esfuerzos permisibles y su peso específico. Estos costos pueden ser calculados multiplicando el costo del acero por factores publicados para otros materiales.

El programa de computadora que se utiliza para el cálculo descrito consta de dos partes principales, el diseño preliminar de la torre, el cual se hace mediante un programa desarrollado en la Facultad de Química (19), y la evaluación mecánica, el cual dimensiona los equipos y realiza el cálculo del costo de cada uno.

A continuación se presenta una descripción de las principales variables de operación, a fin de que en un momento dado el alumno pueda realizar cambios utilizando otros datos.

VARIABLES EN EL DISEÑO PRELIMINAR DE LA TORRE

- FT - Flujo en moles/hr de la corriente de alimentación.
- TA - Temperatura en °F de la corriente de alimentación.
- PA - Presión en psia de la corriente de alimentación.
- P - Presión de operación de la torre en psia.
- LK - Componente clave ligero.
- HK - Componente clave pesado.
- NCOMP - Número de componentes en la corriente de alimentación.
- PSEPL - Porcentaje de recuperación deseado del componente clave ligero en la corriente de domos.
- PSEPH - Porcentaje de recuperación deseado del componente clave pesado en la corriente de fondos.
- TC - Temperatura crítica en °R.
- PC - Presión crítica en psia.
- VW - Constante de volumen molar en c.c./gmol.
- ZF - Fracción mol en la alimentación.
- D - Parámetro de solubilidad en $(\text{calorías/c.c.})^{1/2}$.
- INOM - Índice para las constantes de Chao-Seader.
- 01 Hidrógeno
- 02 Metano
- 03 Fluído simple



- 04 Nitrógeno
- 05 Bióxido de carbono
- 06 Acido sulfhídrico

NOMBRE - Nombre del componente.

VARIABLES DE LA EVALUACION MECANICA

- CORSN - Factor de corrosión permisible.
- STRESS - Esfuerzo permisible.
- EFJNT - Eficiencia de soldadura.
- SGMET - Peso específico del metal.
- SPACE - Espaciamiento entre platos en pulgadas.
- DOMO - Espacio para separación de vapores en el domo en ft.
- FALDON - Altura del faldón de la torre en pies.
- TRACUM - Tiempo de residencia en el acumulador en minutos.
- TRFOND - Tiempo de residencia en los fondos de la torre en minutos.
- TWIN - Temperatura de entrada del agua de enfriamiento en °F.
- TWDEL - Incremento de Temperatura en el agua de enfriamiento en °F.
- RCOND1 - Resistencia de transferencia de calor en el condensador.
- RCOND2 - Resistencia de transferencia de calor en el condensador.
- RREB1 - Resistencia de transferencia de calor en el rehervidor.

- RREB2 - Resistencia de transferencia de calor en el rehervidor.
- STMHT - Calor de vaporización del vapor de agua BTU/lb mol.
- EBOMBA - Eficiencia de la bomba.
- EMOTOR - Eficiencia del motor de la bomba.
- XNO - Índice de costo para equipo de Marshall y Stevens.
- IYR - Año de diseño.

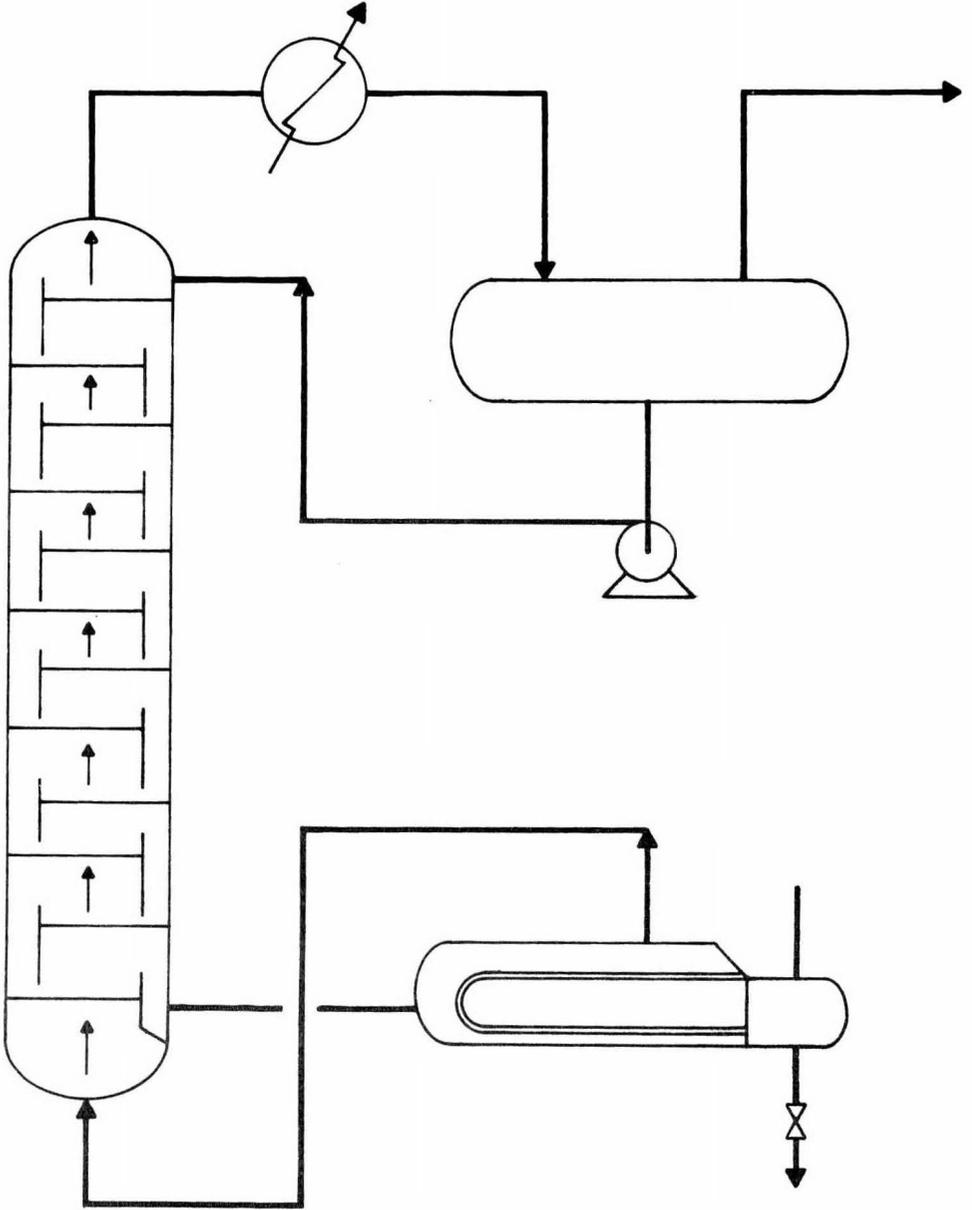


Fig. 3.11 Equipo de una torre de destilación fraccionada.

TORRE NUMERO 1

DATOS GENERALES

CORRIENTE DE ALIMENTACION	1000.0	MOLES/HORA
TEMPERATURA DE ALIMENTACION	187.2	GRD.FARH.
PRESION DE ALIMENTACION	100.0	PSIA
PRESION DE OPERACION	101.0	PSIA
COMPONENTE CLAVE LIGERO	2	
COMPONENTE CLAVE PESADO	3	
NUMERO DE COMPONENTES	4	
PORCIENTO DE SEPARACION DE LIGEROS	95.10	
PORCIENTO DE SEPARACION DE PESADOS	95.10	

I	COMPONENTE	FRACCION MOL
==	=====	=====
1	ISO BUTANO	0.0600
2	BUTANO N	0.1700
3	ISO PENTANO	0.3200
4	PENTANO N	0.4500

RESULTADOS

=====

I	ALFA	FRACCIÓN		FONDO
		ALIMEN- TACION	DESTI- LADO	
1	2.4364	0.0600	0.2459	0.0006
2	1.9626	0.1700	0.6676	0.0110
3	1.0000	0.3200	0.0648	0.4016
4	0.8450	0.4500	0.0218	0.5868

TEMPERATURA DE ALIMENTACION 187.2 GRD.FARH.
 TEMPERATURA DE DOMOS 152.0 GRD.FARH.
 TEMPERATURA DE FONDOS 218.4 GRD.FARH.

MOLES TOTALES EN EL DOMO 242.2 MOLES/HP.
 MOLES TOTALES EN EL FONDO 757.8 MOLES/HR.

CONDICIONES DE ALIMENTACION

=====

I	Z	X	Y
1	0.0600	0.0600	0.0000
2	0.1700	0.1700	0.0000
3	0.3200	0.3200	0.0000
4	0.4500	0.4500	0.0000

PORCENTAJE DE LIQUIDO 100.00
 PORCENTAJE DE VAPOR 0.00

DISENO DE LA TORRE

=====

NUMERO MINIMO DE ETAPAS TEORICAS 8.80
 NUMERO DE ETAPAS TEORICAS 16.52

RELACION DE REFLUJO MINIMA 3.05
 RELACION DE REFLUJO OPTIMA 3.89
 (1.27 VECES EL MINIMO)

PLATO DE ALIMENTACION TEORICO 9
 (A PARTIR DEL DOMO)

PARAMETROS DE DISEÑO Y COSTO DE LA TORRE Y EQUIPO AUXILIAR

TORRE

NUMERO DE PLATOS	37	FACTOR DE CORROSION, IN	1./16	PRESION DE DISEÑO, PSIG	115.
DIAMETRO DE LA TORRE	96.	ESPESOR DE TAPAS, IN	0.549	(125% PRESION OP.)	
ALTURA TOTAL DE LA TORRE, PIES	74.	ESPACIAMIENTO DE PLATOS, IN	18.	ESFUERZO PERMITIDO, PSI	13750.
ESPESOR DE PARED	0.625	ALTURA DEL FONDO, PIES	8.22	EFICIENCIA DE SOLDADURA	0.73
(INCLUYE FACTOR DE CORROSION)		ALTURA DEL FALDON, PIES	6.00	COSTO DE PLATOS, DOLARES	22259.
PESO DE LA TORRE, LBS	133539.	ALTURA DEL ESPACIO DE DOMO, PIES	4.00	COSTO TOTAL, BASE 1949	22190.
(INCLUYE DOS TAPAS)		DIAMETRO DE LA TORRE EN DOMOS, IN	80.74	INDICE DE COSTO 1949	165
COSTO, 1976 DOLARES	161379.	DIAMETRO DE LA TORRE EN FONDOS, IN	90.77	INDICE DE COSTO, 1976	1200

CONDENSADOR

CARGA TERMICA, BTU/HR	9118517.	TEMPERATURA AGUA ENF., F	87.	COEFICIENTE GLOBAL, U	91.
AREA, PIES CUADRADOS	1962.	INCREMENTO DE TEMPERATURA, F	20.	BTU/(HR=FT ² =F)	
COSTO, 1976, DOLARES	50212.	TEMPERATURA DE ROCIO, F	152.	FLUJO DE GASES, LB/MOL=HR	1184.
FLUJO DE AGUA DE ENF., GPM	54733.	TEMPERATURA DE BURBUJA, F	145.	CALOR LATENTE, DOMOS	130.
		LMTD, F	51.	COSTO, BASE 1949	6904
		COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA		INDICE DE COSTO 1949	165
		CORAZA, HR=FT ² =F/BTU	0.004	INDICE DE COSTO 1976	1200
		TUBOS, HR=FT ² =F/BTU	0.007		

REHERVIDOR

CARGA TERMICA, BTU/HR	8005920.	TEMPERATURA DEL VAPOR, F	298.	COEFICIENTE GLOBAL, U	125.
AREA, PIES CUADRADOS	811.	CALOR LATENTE, BTU/LB	911.	BTU/(HR=FT ² =F)	
COSTO, 1976, DOLARES	30189.	TEMPERATURA DE ROCIO, F	220.	FLUJO DE GASES, LB/MOL=HR	1184.
FLUJO DE VAPOR, LBS/HR	8787.	TEMPERATURA DE BURBUJA, F	218.	CALOR LATENTE, FONDOS	114.
		LMTD, F	79.	COSTO, BASE 1949	4151
		COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA		INDICE DE COSTO 1949	165
		CORAZA, HR=FT ² =F/BTU	0.007	INDICE DE COSTO 1976	1200
		TUBOS, HR=FT ² =F/BTU	0.001		

ACUMULADOR DE REFLUJO

TIEMPO DE RESIDENCIA, MIN	= 10.	PRESION DE DISEÑO, PSIG	= 126.
DIAMETRO, IN	= 60.	ESPESOR, IN	= 0.438
LONGITUD, PIES	= 55.	(INCLUYE CORROSION)	
COSTO, 1976, DOLARES	= 29030.	PESO DEL METAL, LBS	= 40472.

BOMBAS Y MOTORES

EFICIENCIA DE LA BOMBA = 50.0 % EFICIENCIA DEL MOTOR = 90.0 %

	ALIMENTACION	REFLUJO	FONDOS
CAPACIDAD DE LA BOMBA, GPM	286.	284.	309.
PRESION DE DESCARGA, PSIG	109.	272.	229.
PRESION DE SUCCION, PSIG	30.	101.	83.
POTENCIA DEL MOTOR, HP	69.2	62.9	58.6

3.7 Diseño de un reactor catalítico de lecho fijo para la síntesis de acetato de vinilo.

Descripción teórica.

El diseño y la operación de equipo para llevar a cabo reacciones químicas requiere analizar los procesos químicos y físicos que ocurren dentro del equipo. Los principios que gobiernan la transferencia de masa y de energía son tan importantes como aquellos que gobiernan la cinética química.

Para diseñar un reactor tenemos que considerar los siguientes factores: el tipo y el tamaño requerido, las necesidades para el intercambio de energía con el medio ambiente, y las condiciones de operación (temperatura, presión, concentraciones y flujos másicos).

Para el diseño de un reactor, los conocimientos que debemos tener al alcance son:

Las ecuaciones para la velocidad de reacción, en el caso que no se conozcan, se pueden encontrar por medio del análisis de datos experimentales.

Junto con la cinética, debemos conocer los principios de conservación de masa y energía y las ecuaciones para los procesos físicos.

Normalmente, en los reactores catalíticos, se utiliza la velocidad de reacción global, en la cual se han considerado la cinética química y las resisten-

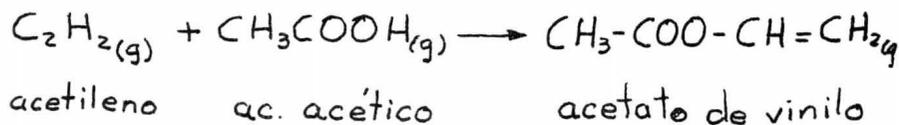
cias que se presentan en los procesos físicos, de tal forma que podemos usar las mismas ecuaciones de diseño para reactores homogéneos no catalíticos que para reactores heterogéneos, sean catalíticos o no.

Usando la información anterior se evalúa la composición del efluente de un reactor para un juego de condiciones de diseño específicas.

Las condiciones de diseño que se deben especificar son la temperatura, presión y composición de la corriente de alimentación, las dimensiones del reactor y de las pastillas de catalizador, y los datos del medio ambiente para evaluar el flujo de calor a través de las paredes del reactor.

Descripción técnica.

Problema: Síntesis del acetato de vinilo por medio de la siguiente --
reacción catalítica:



La reacción se lleva a cabo en un reactor tubular de lecho fijo.

Suposiciones:

- 1) Régimen continuo.
- 2) Gas ideal.
- 3) Simetría radial.

- 4) Flujo tapón.
- 5) Temperatura de la pared constante.
- 6) Sistema homogéneo.

Datos:

- 1) Velocidad de reacción.

$$r = \text{lb mol de acetato de vinilo formado/hr (lb cat.)}$$

$$= 2.46 \times 10^5 \exp(-17300/RT) P_{C_2H_2}$$

$$T = {}^\circ R$$

$$P'_{ac.} = \text{Presión parcial del acetileno, atm.}$$

$$R = 1.98 \text{ cal/(gmol) } ({}^\circ K)$$

- 2) Capacidad calorífica de la mezcla (constante)

$$C_p = 0.46 \text{ BTU/lb } {}^\circ F$$

- 3) Calor de reacción (constante)

$$H_r = -44,470 \text{ BTU / lb mol } C_2H_2 \text{ reaccionado.}$$

- 4) Propiedades del catalizador

$$\rho_c = 45 \text{ lb/ft}^3$$

$$dP = 0.01305 \text{ ft}$$

$$\xi = 0.6$$

- 5) Coeficiente de transferencia de calor en la pared (constante).

$$h_w = 4.33 \text{ BTU/hr -ft}^2\text{-}{}^\circ F$$

6) Viscosidad.

$$\begin{aligned}
 \mu_{C_2H_2} &= 0.0054 + 3.66 \times 10^{-5} T \\
 \mu_{\text{ac. Acet.}} &= -0.0013 + 4.05 \times 10^{-5} T \\
 \mu_{\text{ac. vinilo}} &= 0.0004 + 3.55 \times 10^{-5} T \\
 \mu_{N_2} &= 0.0145 + 5.25 \times 10^{-5} T \\
 T &= \text{°R} \\
 \mu &= \text{lb/ft hr.}
 \end{aligned}
 \tag{3.74}$$

Análisis técnico.

Las ecuaciones de conservación de materia y energía formuladas para este sistema son:

Balance de materia por componente:

$$\frac{dx_i}{dz} = \frac{M_i}{G} a_i r
 \tag{3.75}$$

$$a_{C_2H_2} = -1 \qquad a_{\text{ac. vinilo}} = 1$$

$$a_{\text{ac. acét.}} = -1 \qquad M_i = \text{Peso molecular}$$

Balance de Energía:

$$\frac{dT}{dz} = \frac{h a_i C}{A G C_p} (T - T_w) + \frac{1}{G C_p} r \Delta H_r / c
 \tag{3.76}$$

A = Área transversal del reactor, ft²

C = Perímetro del reactor, ft

Ecuación de presión.

$$\frac{dP}{dz} = \frac{-f}{2120} \frac{G^2}{g_c \rho d_p}$$

$$f = \frac{1-\xi}{\xi^3} \left[1.75 + 1.5 \frac{1-\xi}{Re} \right] \quad (3.77)$$

$$Re = \frac{d_p G}{\mu}$$

$$\mu = \frac{\sum y_i M_i M_i^{0.5}}{\sum y_i M_i^{0.5}}$$

y_i = Fracción mol del componente i .

ρ = densidad del fluido, lb/ft³

Método de solución.

Los balances de materia de los tres componentes, el balance de energía y la ecuación de presión se resolvieron para las fracciones masa de cada componente, temperatura y presión en función de la longitud del reactor. Para resolver las ecuaciones diferenciales se utiliza el algoritmo de Runge-Kutta-Gill.

Resultados.

Como resultado del cálculo se obtienen los perfiles de composición, temperatura y presión como función de la longitud del reactor.

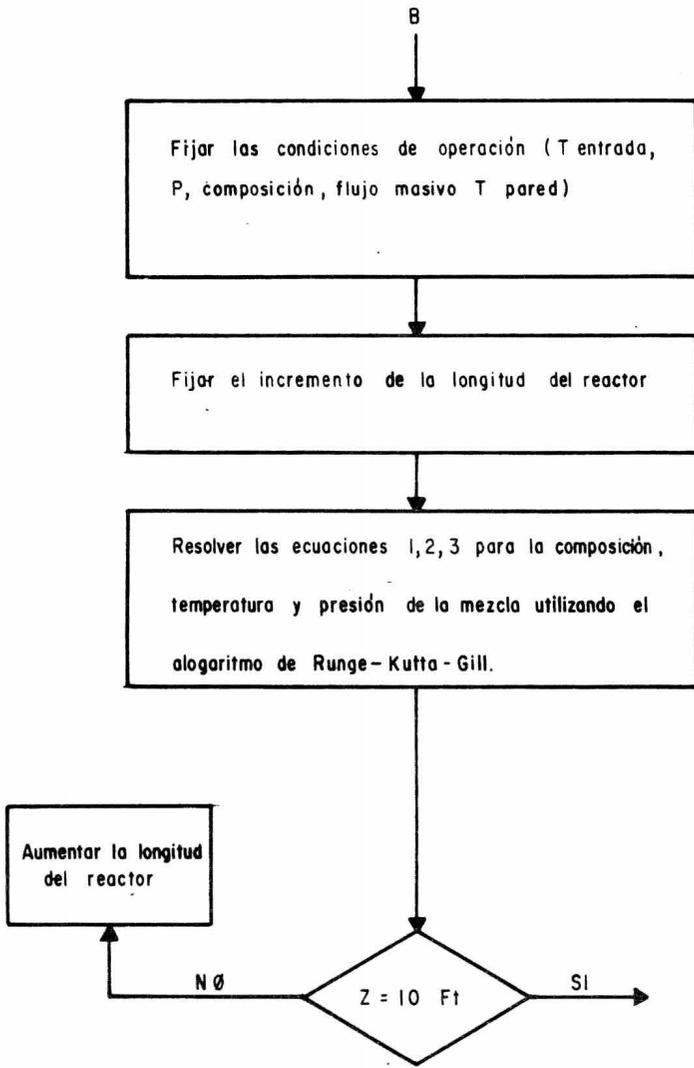


Fig. 3.12 Diagrama de Bloques.

IMPRESION DE DATOS ALIMENTADOS

NUMERO DE ECUACIONES = 5

FRACCION MASA DE ACETILENO (LB/LBT) = .51110000E+00
FRACCION MASA DE ACIDO ACETICO (LB/LBT) = .41670000E+00
FRACCION MASA DE ACETATO DE VINILO (LB/LBT) = 0.

PRESION INICIAL (ATM) = .20200000E+01
TEMPERATURA INICIAL (GR.R) = .76600000E+03

LOS PESOS ERROR SON

0.32000 0.32000 0.32000 0.02000 0.02000

LIMITE INFERIOR = 0. LIMITE SUPERIOR = .10000000E+02
INCREMENTO INICIAL = .10000000E+01 LIMITE DE ERROR = .10000000E+00
PRMT (5) = 0.0

PERFIL DEL REACTOR DE ACETATO DE VINILO

LONGITUD (FT)	ACETILENO (LB/LBT)	ACIDO ACETICO (LB/LBT)	ACETATO DE VINILO (LB/LBT)	TEMPERATURA (GR.F)	PRESION (ATM)
0.00	.511100E+00	.416700E+00	0.	.306000F+03	.202000E+01
1.00	.508969E+00	.411783E+00	.704782F+02	.319858F+03	.201975E+01
2.00	.506247E+00	.405501E+00	.160523F+01	.326400F+03	.201950E+01
3.00	.503186E+00	.398436E+00	.261785F+01	.329743F+03	.201925E+01
4.00	.499944E+00	.390955E+00	.369012F+01	.331415F+03	.201899E+01
5.00	.496611E+00	.383265E+00	.479237F+01	.332245F+03	.201874E+01
6.00	.493237E+00	.375478E+00	.590848F+01	.332652E+03	.201849E+01
7.00	.489847E+00	.367654E+00	.702988F+01	.332841F+03	.201824E+01
8.00	.486454E+00	.359825E+00	.815206F+01	.332917F+03	.201799E+01
9.00	.483066E+00	.352007E+00	.927266F+01	.332933F+03	.201774E+01
10.00	.479687E+00	.344208E+00	.103904F+00	.332919F+03	.201750E+01

CAPITULO IV

CONCLUSIONES

El objeto de la descripción de los métodos seleccionados para la evaluación de propiedades fué el de proporcionar información teórica y dar una idea de la confiabilidad de cada cálculo, ya que continuamente se presentan nuevos métodos, usualmente en la forma de modificaciones o ajustes a los ya conocidos.

Se logró realizar un simulador de corrientes de hidrocarburos con límites de operación y una exactitud aceptables para los fines que se pretenden; siendo su operación bastante simple aún cuando el estudiante no cuente con conocimientos en computación.

Los problemas presentados en el capítulo 3 fueron consultados con el Area de Ingeniería Química, a fin de que fueran representativos y congruentes con los diferentes cursos que se imparten; están diseñados de tal manera que el usuario pueda alimentar los datos de un problema específico; excepción hecha del caso que se presenta de un reactor de lecho fijo.

Pensamos que la conclusión básica del contenido de este trabajo es dar una idea clara de la utilidad de la computación en la enseñanza de la Ingeniería Química, como complemento del criterio y ampliación de los recursos del

alumno para el inicio y ejercicio de su vida profesional.

CAPITULO 5

BIBLIOGRAFIA

- (1) Bird, R. B., Stewart, W. E., y E. N. Lightfoot "Transport Fenomena". John Wiley & Sons, Inc. New York, 1960.
- (2) Carnahan, B.. "Applied Numerical Methods". Ed. John Wiley & Sons. New York (1969).
- (3) Cooper, H. W. y I. C. Goldfrank, Hydrocarbon Processing (1967). 46 (12) 141.
- (4) Chao, K. C. y J. D. Seader, AIChE Journal Vol. 7 pag. 598 (1961).
- (5) Denbigh, K. G. y J. C. R. Turner. "Chemical Reactor Theory. An Introduction" 2a. Edición Cambridge University Press (1971).
- (6) Edmister, W. C. "Applied Hydrocarbon Thermodynamics". Hydrocarbon Processing (1968), Vol. 47 (9) p.p. 239.
- (7) Edmister, W. C., "Thermodynamics, Composition and Enthalpy Prediction for Coexisting Vapor and Liquid Mixtures". The College of Engi-

- neering, Oklahoma. State University, (1971).
- (8) Grayson, H. G. y C. W. Streed, Sixth World Petroleum Congress Frankfurt Main (June 19-26, 1963).
- (9) Jelink, R. "Computer Programs for Chemical Engineering Education". University of Syracuse, Editor (1972).
- (10) Kern, D. Q. "Procesos de Transferencia de Calor". C.E.C.S.A., México (1973).
- (11) King, C. J., "Separation Processes". Mc Graw-Hill Chemical Engineering Series, New York (1971).
- (12) Mc Cabe, W. L. y J. C. Smith, "Operaciones Básicas de Ingeniería Química", Ed. Reverte. México (1972).
- (13) Perry, J. H. (Ed.), "Chemical Engineers, Handbook", 4th Edition, - Mc Graw-Hill Book Company, New York (1963).
- (14) Peters, M. S. y K. D. Timmerhaus, "Plant Design and Economics -- for Chemical Engineers". Mc Graw-Hill Book Company, New York (1968).
- (15) Prausnitz, J. M., Chueh, P. L., "Computer Calculations for High-

- Pressure Vapor-Liquid Equilibria", Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, (1968).
- (16) Rase, H. F. y M. H. Barrow, "Project Engineering of Process Plants". John Wiley & Sons, Inc, New York (1959).
- (17) Reid, R. C. y T.K. Sherwood, "Propiedades de los Gases y Líquidos. Su Estimación y Correlación". Ed. UTEHA. México (1968).
- (18) Schmidt, A. X. y H. L. List, "Material and Energy Balances". Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs New-Jersey (1962).
- (19) Smith, S. M., "Chemical Engineering Kinetics", 2a. Edición. Mc Graw-Hill. Kogakusha LTD. Tokyo (1970).
- (20) Sosa, J. y A. J. Ostos, "Programa de Computadora para el Estudio Preliminar de Torres de Destilación Fraccionada a partir de Métodos Cortos". Tesis Profesional (1976).
- (21) Starling, K. F., "Fluid Thermodynamic Properties for Light Petroleum Systems, Gulf Publishing Company. Houston, Texas (1971).
- (22) Van Winckle, M. "Distillation", Chemical Engineering Series, Mc Graw-Hill Book Company Inc., New York (1969)