

Nº 37
2001



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

DISEÑO DE UNA TORRE DE ABSORCION
ADIABATICA

T E S I S
Que para obtener el Título de
INGENIERO QUIMICO
p r e s e n t a

FRANCISCO JAVIER GARFIAS VASQUEZ



México, D. F.

1992

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

INDICE

Prologo	1
----------------	----------

CAPITULO 1 ESTIMACION DE PROPIEDADES FISICAS

1	Introducción	6
1.1	Viscosidad	7
1.2	Densidad	18
1.3	Coefficiente de Difusión	18
1.4	Tensión Superficial	24
1.5	Conductividad Térmica	27
1.6	Capacidad Calorífica	28

CAPITULO 2 CALCULO DE PROPIEDADES TERMODINAMICAS

2	Introducción	31
2.1	Ecuación de Estado	33
2.2	Método de Convergencia	41

CAPITULO 3 CALCULO DE LA VELOCIDAD DE INUNDACION Y DE LA CAIDA DE PRESION EN UNA TORRE EMPACADA UTILIZANDO UN METODO ITERATIVO

3	Introducción	49
3.1	Ecuaciones Fundamentales	52
3.2	Método por Computadora	54

CAPITULO 4
TRANSFERENCIA DE MASA Y DE CALOR

4	Introducción	58
4.1	Coefficiente de Transferencia de Masa	58
4.2	Coefficiente de Transferencia de Calor	63

CAPITULO 5
DISEÑO DE LA COLUMNA DE ABSORCION ADIABATICA

5	Introducción	66
5.1	Esquema general del algoritmo	67
5.2	Descripción del método	69

	Resultados y Conclusiones	80
	Índice de Tablas	100
	Referencias	102
	Apéndice A	106
	Apéndice B	108

PROLOGO

PROLOGO

La absorción es una operación unitaria utilizada en la industria química para separar un componente de una mezcla gaseosa, por lavado con un líquido. Uno o más de los componentes de la mezcla gaseosa son disueltos preferentemente en el líquido y así separados de la mezcla gaseosa.

Con algunos sistemas, el componente gaseoso se disuelve en el líquido o disolvente para formar una solución, con otros, reacciona químicamente para producir compuestos que son diferentes al componente gaseoso y al líquido.

Lavar una corriente gaseosa y separar componentes, puede tener el propósito de purificar un gas, de recuperar un producto o saturar un líquido con gas. Ejemplo de lo anterior es la eliminación de ácido sulfhídrico (H_2S) u óxidos de nitrógeno (NO_x) del aire contaminado antes de descargarlo a la atmósfera; la recuperación de formaldehído o acetona en agua; o la absorción de dióxido de azufre (SO_2) en agua de cal para formar una suspensión de cristales de sulfato de calcio.

El equipo que se utiliza en la absorción consiste en una columna vertical conocida como absorbedor diseñada para recibir a contracorriente, al líquido por la parte superior y a la mezcla gaseosa por el fondo.

Para aumentar la superficie de contacto entre ambos fluidos se utilizan empaques de muy diferente material de construcción y de formas diversas. Por ejemplo, el material puede ser de cerámica, de plástico o de acero de acuerdo a la corrosividad y temperatura de los sistemas, hueco o sólido, de forma perfecta como la esfera o formas específicas como la silla o anillo. Para torres de gran capacidad que manejan sistemas limpios no reaccionantes se acostumbra utilizar una torre con platos, provistos de cachuchas o simplemente perforados, en donde se mantiene una cierta altura de líquido en el plato y el excedente se derrama al plato inferior; el gas por su

parte forma burbujas pequeñas al ascender en el plato, con lo cual se garantiza una gran área de contacto. Finalmente se cuenta con torres muy simples de absorción, inclusive desprovistas de empaque, en las que el líquido se dispersa mecánicamente mediante aspersores colocados en la parte superior de la torre, de tal suerte que las finas gotas formadas entran en contacto con el gas ascendente.

En el estudio de las torres de absorción generalmente se desprecian los cambios de temperatura que suceden a lo largo de la torre. Esto es, el diseño de la columna de absorción se basa en un modelo isotérmico. En el caso de la absorción en agua de las sustancias polares como amoníaco, acetona, y metanol entre otros, no es válido hacer esta simplificación en virtud de la considerable magnitud de los calores de solución y latente de vaporización de estas sustancias. Adicionalmente, cuando el disolvente es volátil, se tiene un importante efecto térmico por la evaporación del disolvente a lo largo de la columna que dificulta la operación y afecta negativamente la altura de empaque requerido.

Para desarrollar un algoritmo a partir del modelo de Stockar y Wilke, para precisar los balances de calor y materia eficientemente, así como los perfiles de temperatura y composición a lo largo de la torre, se considera una torre adiabática y se toma en cuenta la volatilidad del disolvente y del soluto. También se utiliza la ecuación de estado PRSV (Peng-Robinson modificada por Stryjek, Vera y recientemente por Sandoval), para predecir las propiedades de los sistemas polares y de sus soluciones,

En el presente trabajo se seleccionan columnas empacadas, en virtud de que una torre empacada ofrece una menor caída de presión que una de platos, lo cual representa una gran ventaja particularmente cuando se requiere trabajar al vacío. Las columnas empacadas son generalmente de menor altura que las de plato y su construcción es mucho más simple y económica. Las torres empacadas son versátiles ya que fácilmente se puede cambiar el empaque. Desde luego que una torre empacada no es aconsejable para diámetros grandes por las canalizaciones que se forman.

No obstante que el enfoque práctico de la tesis se orienta al diseño de la torre, en este ensayo no se pierde de vista la naturaleza compleja de la mayoría de los sistemas reales y es por ello que se le ha dado una gran relevancia a los modelos termodinámicos más recientes que mejor describen las propiedades de las soluciones y de las mezclas gaseosas.

Las ecuaciones que representan con cierta precisión a los sistemas requieren de un procesador matemático para facilitar la evaluación de las propiedades. El método de relajación que se seleccionó para estudiar la transferencia de materia y calor de una fase a otra también requiere de numerosas operaciones, que obligan al uso del procesador. El lenguaje que se escogió para operar el procesador fue el Turbo Pascal versión 5.5 por su rapidez, poder, versatilidad y notoriedad. El estudio se efectuó en una computadora con unidad de procesamiento Intel-80386.

CAPITULO 1

ESTIMACION DE PROPIEDADES FISICAS

ESTIMACION DE PROPIEDADES FÍSICAS

1 INTRODUCCION

En el diseño y operación de un equipo de absorción es necesario conocer diversas propiedades de los sistemas, que para la finalidad de este trabajo son la fugacidad, la entalpía y el coeficiente de compresibilidad, todos por componente.

Las propiedades físicas de la materia dependen directamente de la naturaleza de sus moléculas. El estudio del comportamiento de la materia por los investigadores ha llevado a una serie de correlaciones teóricas y empíricas que permiten evaluar con gran precisión las propiedades.

Una excelente recopilación de los métodos más usados para estimar propiedades se encuentra en el libro escrito por Reid et al [1.1].

La primera contribución al cálculo de propiedades se da a partir de la teoría cinética de los gases, que describe un gas como formado por un número muy grande de moléculas, de tamaño muy reducido en comparación con la distancia media entre las mismas, y propone a las moléculas como esferas perfectas y duras, ignorando las fuerzas intermoleculares.

Pero las considerables desviaciones del comportamiento real que presenta la teoría cinética hace inevitable el estudio de la interacción entre moléculas, fundamentado en la atracción y repulsión que ejercen entre sí. La función potencial semiempírica de Lennard-Jones y coautores describe la atracción y repulsión en forma aproximadamente cuantitativa. Más recientemente, otras funciones potenciales han sido desarrolladas, al considerar la forma y naturaleza polar de las moléculas.

Una de las formas de estimar las propiedades consiste en utilizar el concepto de

estado correspondiente. Se dice que dos gases se corresponden, si guardan entre sí las mismas propiedades reducidas. Conviene recordar que una propiedad reducida se expresa en términos de su correspondiente propiedad crítica. El concepto de estado correspondiente es la base más simple e importante para el desarrollo de las correlaciones y métodos estimativos, no solo para las moléculas más simples, sino también para las moléculas polares y aquellas que se enlazan con puente de hidrógeno.

Otro aspecto importante a considerar en ingeniería, en relación con el comportamiento de las moléculas, consiste en las propiedades de los sistemas a altas presiones. Para el diseño de columnas de absorción, en donde se opera a bajas presiones estas desviaciones no tienen relevancia.

En el cálculo de los coeficientes de transferencia de masa y de calor se requiere conocer las propiedades físicas de cada componente y de la mezcla en la fase gaseosa y en la fase líquido, bajo las condiciones de temperatura y presión del sistema. Se pueden predecir propiedades como la viscosidad, densidad, coeficiente de difusión, conductividad térmica, calor específico y tensión superficial a partir de los modelos que se mencionan adelante.

1.1 Viscosidad

Todos los fluidos poseen una resistencia al cambio de forma. Si el esfuerzo cortante por unidad de área en cualquier punto se divide por el gradiente de velocidad, la relación resultante se define como la viscosidad del medio. La viscosidad puede ser vista como una medida de la fricción interna del fluido, el cual tiende a oponerse al cambio de flujo.

Dado que la viscosidad se define como la fuerza cortante por unidad de área dividida

por un gradiente de velocidad, sus dimensiones son fuerza · tiempo · longitud² o masa · longitud · tiempo⁻¹. Ambos grupos de dimensiones se utilizan comúnmente, aún cuando en el presente trabajo, la viscosidad se expresará en poises o en cualquiera de sus submúltiplos. Un poise, P, denota una viscosidad de 1 dina · cm⁻² o 1 g · s⁻¹ · cm⁻¹. Los siguientes factores de conversión se aplican para los submúltiplos del Poise:

$$1 \text{ P} = 1 \times 10^2 \text{ cP} = 1 \times 10^6 \mu\text{P} = 0.1 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-2}$$

El estudio teórico de la viscosidad de un gas se ha fundamentado en la teoría cinética de los gases con resultados satisfactorios. Para el caso de los líquidos se utilizarán correlaciones empíricas, en virtud de que las teorías son muy complejas o bien poco precisas.

Viscosidad de Gases

Existen varios métodos de cálculo que se basan en la teoría cinética para estimar la viscosidad de un gas. La elección del modelo depende de la estructura, de la polaridad de la molécula y de las condiciones de presión y temperatura del sistema. La técnica más generalizada para estimar la viscosidad de un gas a baja presión se basa en el modelo de estados correspondientes. Conviene mencionar tres trabajos. Golubev [1.2] propuso un modelo sencillo para calcular la viscosidad del gas, el cual predice satisfactoriamente la viscosidad de sustancias no polares, pero no para las polares. Reichenberg [1.3] sugiere relaciones a partir de valores de contribución de grupo para compuestos orgánicos; en este método se predice satisfactoriamente la viscosidad pero tiene el inconveniente de requerir una base de datos con las contribuciones de cada grupo. Por último, Thodos [1.4] y coautores propusieron un modelo para determinar la viscosidad de gases polares considerando el puente de hidrógeno.

Thodos propuso las siguientes expresiones:

Con puente de hidrógeno y $T_R < 2.0$,

$$\eta_V = \frac{(0.755 T_R - 0.055) Z_c^{-\frac{5}{4}}}{\xi} \quad (1-1)$$

Sin puente de hidrógeno y $T_R < 2.5$,

$$\eta_V = \frac{(1.90 T_R - 0.29) Z_c^{-\frac{4}{5}}}{\xi} \quad (1-2)$$

en donde

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

Las ecuaciones de Thodos no deben utilizarse para el hidrógeno molecular, helio y los gases halógenos diatómicos.

En la Tabla I se comparan la viscosidad real y la calculada por los tres métodos que utilizan el concepto de estado correspondiente. El intervalo de temperatura que aparece en la tabla fluctúa entre cero y sesenta grados Celsius, que corresponde al intervalo en que opera normalmente una columna de absorción.

El método que rinde una mejor aproximación para un gas polar es el método de Thodos y coautores a partir de la ley de estados correspondientes con un error no mayor a 5.4 por ciento.

La viscosidad de una mezcla gaseosa es raramente una función lineal de la

TABLA I. Comparación de valores calculados y experimentales de viscosidad del gas a baja presión.

Compuesto	T, °C	Viscosidad μP^a	Porcentaje de error en la estimación *		
			Thodos	Golubev	Reichenberg
Acetona	0	71.0	1.13	-5.71	-1.06
	20	76.0	2.12	-5.70	-0.83
	40	80.0	4.15	-4.52	0.59
	60	84.4	5.40	-3.93	1.36
Agua	0	88.0	-1.13	-9.55	-10.88
	20	96.0	-1.34	-11.24	-12.31
	40	103.0	0.57	-11.83	-12.68
	60	110.5	-0.35	-12.75	-13.41
Amoniaco	0	91.8	-3.36	-8.62	-8.63
	20	98.2	-1.87	-8.54	-8.44
	40	105.5	-2.39	-9.27	-9.11
	60	113.0	-4.45	-10.08	-9.89
Cloroformo	0	93.6	-2.88	6.77	5.93
	20	100.0	-1.60	6.99	6.39
	40	106.7	-0.45	6.86	6.48
	60	113.3	-0.18	6.83	6.63
Etanol	0	77.2	-5.08	-8.76	3.94
	20	83.4	-4.68	-9.58	3.23
	40	89.5	-4.22	-10.20	2.71
	60	95.7	-3.93	-10.85	2.12
Nitrógeno	0	165.8	-1.06	-0.42	0.87
	27.4	178.1	-0.03	-0.57	1.01
	40	183.8	-0.33	-0.74	0.94
	60	191.9	1.18	-0.62	1.21
Oxígeno	0	189.0	-1.26	1.14	1.69
	19.1	201.8	-1.90	-0.19	0.61
	40	212.4	-1.04	-0.07	0.99
	60	222.6	-0.39	-0.14	1.14
	Error	promedio	2.07	6.16	4.82

* Porcentaje de error = $[(\text{calc.} - \text{exp.}) / \text{exp.}] \times 100$.

^a Los valores experimentales fueron obtenidos de: Weast [1.23]; Reid et al [1.1]; Perry y Chilton [1.24].

composición, ya que puede presentar un valor que exceda la viscosidad de cualquiera de los componentes puros. Esta característica no ocurre generalmente en mezclas que

contienen un compuesto polar con los no polares, siempre y cuando las viscosidades de los componentes puros no sean muy diferentes entre sí. Es un hecho que cuando el cociente de las viscosidades se aleja de la unidad, la viscosidad de la mezcla resulta ser mayor que la del compuesto más viscoso.

La teoría cinética rigurosa de Chapman-Enskog que considera las fuerzas intermoleculares, puede ser utilizada para determinar la viscosidad a baja presión en una mezcla de gases. La expresión final es relativamente complicada y consiste en una relación entre dos determinantes, los cuales contienen elementos como fracción molar, peso molecular, viscosidad de componentes puros, temperatura y varias integrales de colisión.

Olvidando los efectos de segundo orden, la solución rigurosa puede ser aproximada a una serie, según se expresa a continuación:

$$\eta_m = \sum_i^n \frac{y_i \eta_i}{\sum_i^n y_i \phi_{ij}} \quad (1-3)$$

Los métodos más exactos para estimar el parámetro ϕ_i y ϕ_p son las correlaciones de Wilke [1.5] y la de Brokaw [1.6], pero el último es preferible cuando alguno de los componentes es polar. Brokaw desarrolló un método muy exacto que requiere de los momentos dipolares para constituyentes polares y que tiene la siguiente forma,

$$\phi_{ij} = \left(\frac{\eta_i}{\eta_j} \right)^{\frac{1}{2}} S_{ij} A_{ij} \quad (1-4)$$

y ϕ_i es determinado intercambiando los subíndices.

Donde S_{ij} es igual a:

$$S_{ij} = S_{ji} = \frac{1 + (T_i^* T_j^*)^{\frac{1}{2}} + \frac{\delta_i \delta_j}{4}}{\left[1 + T_i^* + \frac{\delta^2}{4}\right]^{\frac{1}{2}} \left[1 + T_j^* + \frac{\delta^2}{4}\right]^{\frac{1}{2}}} \quad (1-5)$$

y A_{ij} es una función de la relación del peso molecular como se expresa a continuación,

$$A_{ij} = m_{ij} M_{ij}^{-\frac{1}{2}} \left[1 + \frac{M_{ij} - M_{ij}^{0.46}}{2(1 + M_{ij}) + \frac{(1 + M_{ij}^{0.46}) m_{ij}^{-\frac{1}{2}}}{1 + m_{ij}}} \right] \quad (1-6)$$

con

$$m_{ij} = \left[\frac{4}{\left(1 + \frac{1}{M_{ij}}\right) (1 + M_{ij})} \right]^{0.25}$$

$$M_{ij} = \frac{M_i}{M_j}$$

El término S_{ij} es igual a la unidad cuando i y j son componentes no polares. Para mezclas de gases con compuestos polares, los parámetros δ y T^* adimensionales deben ser calculados. El parámetro polar δ no se encuentra consignado para algunos componentes, pero puede calcularse a partir de la siguiente expresión:

$$\delta_i = 9.998244 \times 10^{-20} \frac{\mu_p^2}{2 \epsilon r^3}$$

donde μ_p es el momento dipolar expresado en unidades Debye, el parámetro de energía ϵ en Joules y el diámetro molecular r en Amstrong, los cuales están enlistados en la Tabla II.

TABLA II*.

Componente	μ_p , debyes	r , Å	ϵ/k , K*	δ
Acetona	2.90	4.600	560.2	1.0
Agua	1.85	2.641	809.1	1.0
Amoniaco	1.47	2.900	558.3	0.7
Etanol	1.69	4.530	362.6	0.3
Nitrógeno	0	3.798	71.4	0
Oxígeno	0	3.467	106.7	0

* Datos de Reid et al [1.1].

* Constante de Boltzman k , es igual a 1.3805×10^{-23} J/K.

El parámetro T^* tiene la expresión:

$$T^* = \frac{k}{\epsilon} T$$

La ecuación (1-6) solo debe usarse si δ_i o δ_j son mayores a 0.1. Si ambos son menores que 0.1, entonces S_i y S_j resultan igual a la unidad.

TABLA III. Comparación de valores experimentales y calculados de viscosidad de mezcla gaseosa a presión atmosférica.

Sistema	T, °C	Fracción mol 1er componente	Viscosidad (exp), μP	Porcentaje de error	
				Wilke	Brokaw
Hidrógeno-Amónico	33	0	105.9		
		0.323	120.0	-9.7	-4.5
		0.464	122.4	-10.9	-4.1
		0.601	123.8	-12.0	-4.2
		0.805	118.4	-10.8	-3.7
		1	90.6		
Amónico-Metilamina	150	0	130.7		
		0.250	134.5	-0.3	0
		0.750	142.2	-0.3	0.2
		1	146.0		
Nitrógeno-CO ₂	20	0	146.6		
		0.213	153.5	-1.3	-0.9
		0.495	161.8	-1.8	-1.1
		0.767	172.1	-2.7	-2.3
		1	175.8		
		Error promedio		5.5	2.3

En la Tabla III se incluye el porcentaje de desviación en los valores calculados de viscosidad para varias mezclas. Los errores encontrados por el método de Wilke son del mismo orden de magnitud, a excepción de mezclas que contienen compuestos polares, en donde el método de Brokaw es superior.

Viscosidad de Líquidos

La viscosidad de un líquido es mucho mayor que la viscosidad de un gas, aparte de que el valor numérico decrece rápidamente con el incremento en la temperatura.

En general, los métodos que mejor predicen la viscosidad de un líquido se basan en correlaciones empíricas que utilizan parámetros generados a partir de funciones de contribución de la estructura molecular o de datos experimentales que se encuentran en la literatura.

La expresión empírica de Orrick y Erbar [1.7] así como la de Thomas [1.8] y la de Morris [1.9] que se utilizan para calcular la viscosidad de un líquido, solo son útiles para compuestos orgánicos.

En virtud de que en el presente trabajo se utilizan compuestos polares, agua, amoníaco, etanol, acetona, etcétera, se usarán los métodos empíricos de Makhija y Stairs [1.10] y el de van Velzen, Cardozo y Langenkamp [1.11], que permiten estimar con precisión la viscosidad de líquidos puros. Makhija y Stairs propusieron una ecuación que es satisfactoria para líquidos asociados y polares, pero tiene la desventaja de que únicamente están publicados el valor de las constantes para 10 compuestos polares o asociados.

Van Velzen y coautores propusieron una ecuación empírica, en donde los parámetros que utilizan se calculan a partir del efecto de la estructura de la molécula en la viscosidad del líquido. En el libro de Reid et al [1.1], se encuentran tabulados para varios líquidos, los valores de los parámetros VISB y VISTO de la ecuación de van Velzen y coautores. Estos parámetros fueron determinados a partir de datos experimentales.

En la Tabla IV se compara el error que arrojan los métodos mencionados. El método que genera los mejores resultados es el de Makhija y Stairs con un porcentaje de error muy bajo, pero no se cuenta con los parámetros que demanda su ecuación, para todos los compuestos. El método de Morris, que es sólo para compuestos orgánicos, da un error hasta de 97.34% para el metanol.

TABLA IV. Comparación de valores calculados y experimentales de viscosidad del líquido a $T_R < 0.75$.

Compuesto	T, °C	Viscosidad cP ^b	Porcentaje de error en la estimación ^a			
			Makhija y Stairs	Van Velzen	Van Velzen ^c	Morris
Acetona	0	0.399	0.17	-1.81		3.73
	15	0.337	0.12	-1.05		4.19
	30	0.295	1.52	-2.24		2.62
	41	0.280	0	-6.59		2.14
Agua	0	1.787	0.86	-31.91	-3.61	
	20	1.002	1.37	-16.84	2.28	
	40	0.653	0.63	-8.27	-0.19	★
	60	0.467	0.04	-3.99	-6.22	
Amoníaco	-50	0.317	3.60	1.26		
	-40	0.276	1.42	-0.35		
	-33.5	0.255	-0.18	-1.77		★
Etanol	0	1.773	-0.82	-3.85	2.41	-1.85
	10	1.466	-2.50	-5.21	-0.46	-5.73
	20	1.200	-1.87	-4.28	-0.80	-7.08
	40	0.834	0.72	-2.41	-1.23	-9.32
Metanol	0	0.820	-3.22	-2.59		97.34
	15	0.623	1.43	0.49		86.27
	25	0.547	0.78	-1.38		73.16
	40	0.456	0.39	-3.67		56.94
Error	Promedio		1.14	5.26	2.13	29.20

^a Porcentaje de error = [(calc. - exp.) / exp.] x 100.

^b Los valores experimentales fueron obtenidos de: Weast [1.23].

^c Método con parámetros modificados.

^d El método de Morris solo se aplica para compuestos orgánicos.

Si se utilizan los parámetros publicados por Reid et al [1.1], y la ecuación de van Valzen y coautores, se encuentran resultados cercanos a los valores experimentales, con excepción del agua y etanol. En el presente trabajo se modifican los valores de los parámetros, con el propósito de disminuir el error de 5.26 a 2.13%, en promedio. Todos los métodos antes mencionados trabajan satisfactoriamente a temperaturas por

debajo de la temperatura reducida $T_R = 0.75$. La expresión de Van Velzen y coautores es la siguiente:

$$\log \eta_L = VISB \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{VISTO} \right) \quad (1-7)$$

donde la viscosidad del líquido η_L está en dada en centipoise cP, y los parámetros VISB y VISTO se encuentran enlistados en la Tabla V.

TABLA V. Parámetros para la viscosidad de líquidos a temperatura reducida menor de $T_R = 0.75$. *

Líquido	VISB	VISTO
Acetona	367.25	209.68
Agua *	902.68	294.17
Amoniaco	349.04	169.63
Etanol *	734.02	302.29
Metanol	555.30	260.64

* Los parámetros provienen de Reid et al [1.1].

* Los parámetros fueron calculados a partir de datos experimentales del Weast [1.23], para un intervalo de temperatura de 0 a 60 grados Celsius.

La correlación utilizada para calcular la viscosidad de una mezcla de líquidos tiene la siguiente forma:

$$\ln \eta_{mL} = \sum_{i=1}^n x_i \ln \eta_{Li} \quad (1-8)$$

Esta regla de mezclado da buenos resultados para los sistemas con componentes polares o asociados.

1.2 Densidad

La densidad de una sustancia se estima por varios métodos de cálculo que se basan en el concepto de estados correspondientes. Pero también se obtiene el valor de la densidad de un gas o de un líquido con la ecuación de estado:

$$\rho_i = \frac{M_i P}{z_i R T} \quad (1-9)$$

en donde la densidad ρ está en función de las propiedades de presión, temperatura y del factor de compresibilidad por componente z_i para el líquido o el vapor. El factor de compresibilidad se obtiene al resolver la ecuación de estado de Peng-Robinson modificada por Vera y Stryjek. Al calcular esta propiedad a partir de la ecuación de estado, se obtiene un valor densidad muy alejado de la realidad. Por lo tanto, se hace la corrección utilizando datos experimentales.

Para conocer la densidad de la mezcla, la relación que se utiliza es la siguiente:

$$\rho_{mL} = \sum_{i=1}^n X_i \rho_{iL} \quad \rho_{mV} = \sum_{i=1}^n Y_i \rho_{iV} \quad (1-10)$$

1.3 Coeficiente de Difusión

La difusión molecular está definida como el transporte neto de material dentro de una sola fase en ausencia de mezclado. El mezclado, conocido como difusión de remolino, es un proceso más rápido que la difusión molecular. El mezclado se logra mediante agitación mecánica o por movimiento de convección del fluido.

La difusión puede resultar de una diferencia de temperatura, de presión, de fuerzas magnéticas externas y de una diferencia de concentración. Si la difusión es isotérmica,

isobárica, sin fuerzas externas, la difusión será resultado únicamente del gradiente de concentración.

Una solución que no es uniforme en concentración alcanzará la uniformidad por difusión, al moverse el soluto de una zona de alta concentración a una de menor concentración. La rapidez con la cual se mueve el soluto depende del gradiente de concentración. Así, el coeficiente de difusión o difusividad D_i de un componente i en solución en j es una constante de proporcionalidad entre el flujo y el potencial de difusión, con dimensiones de longitud²·tiempo⁻¹, que se expresa en la mayoría de los casos en cm²·s⁻¹.

Coefficiente de Difusión de un Gas

El coeficiente de difusión o difusividad de un gas es una propiedad del sistema que depende de la temperatura, presión y de la naturaleza de los componentes. La teoría cinética de los gases predice que en mezclas binarias la composición no afecta sensiblemente el valor del coeficiente.

Un método para calcular el coeficiente de difusión de un gas, parte de la ecuación teórica de Boltzmann, e incluye el desarrollo de Chapman y Enskog, y la contribución de Wilke-Lee. El método es adecuado para mezclas de gases no polares, o mezclas de un gas polar con uno no polar. Se obtiene la siguiente expresión:

$$D_{ij} = \frac{\left(0.00217 - 0.0005 \left[\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j} \right]^{\frac{1}{2}} \right) \left[\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j} \right]^{\frac{1}{2}} T^{\frac{3}{2}}}{P r_{ij}^2 \Omega_D} \quad (1-11)$$

en donde, M_i es el peso molecular del componente que se difunde y M_j el peso molecular del medio en donde se difunde. El factor de colisión integral para la difusión Ω_D es función de la temperatura y del modelo de fuerzas intermoleculares. La longitud característica r_i depende también del modelo. Para calcular ϵ_{ij} y r_i se emplean las siguientes reglas:

$$\epsilon_{ij} = (\epsilon_i \epsilon_j)^{\frac{1}{2}} \quad r_{ij} = \frac{r_i + r_j}{2}$$

Si uno o ambos componentes de la mezcla de gases es polar, se utiliza el potencial de Stockmayer, en lugar del de Lennard-Jones. Se obtiene todavía un mejor resultado con gases polares al utilizar el método alternativo de Brokaw [1.12], descrito por la siguiente expresión:

$$\Omega_D = \Omega_D^* + \frac{0.19 \delta_{ij}^2}{T^*}$$

en donde

$$\delta_{ij} = (\delta_i \delta_j)^{\frac{1}{2}}$$

y

$$T^* = \frac{k T}{\epsilon_{ij}}$$

Para calcular Ω_D^* , se utiliza la ecuación empírica propuesta por Neufeld de forma:

$$\Omega_D^* = \frac{1.06036}{T^{*0.1561}} + \frac{0.193}{e^{0.47633 T^*}} + \frac{1.03587}{e^{1.52098 T^*}} + \frac{1.76474}{e^{3.69411 T^*}}$$

En la Tabla VI se muestra la desviación que presenta el método descrito para algunos

TABLA VI. Comparación de valores experimentales y calculados de coeficiente de difusión de gases puros.

Sistema	T, °C	Exp., cm ² /s ^b	Porcentaje de error calculado *		
			Chapman y Enskog	Wilke y Lee	Fuller
Aire-Agua	40.0	0.288	-18.65	-8.38	-4.71
	25.9	0.258	-14.02	-6.53	-1.96
	59.0	0.305	-10.76	-2.99	-0.33
Aire-Amoníaco	0	0.198	-5.39	2.71	5.67
	25.0	0.229	-3.12	5.17	6.50
Aire-Etanol	0	0.102	-0.08	10.31	4.00
	25.0	0.119	1.02	11.44	3.90
	40.0	0.145	-9.13	0.24	-7.08
Aire-CO ₂	3.2	0.142	-5.05	4.77	-3.30
	25.0	0.164	-5.53	4.15	-4.28
	44.2	0.177	-2.14	7.98	-1.16
Nitrógeno-Agua	25.0	0.231	-4.17	4.13	14.13
	34.5	0.256	-8.17	-0.21	8.79
	55.9	0.313	-14.44	-7.03	0.10
Nitrógeno-Amoníaco	25.0	0.230	-3.37	4.85	10.87
	85.0	0.328	-4.23	3.93	7.17
Error promedio			6.83	5.30	5.25

* Porcentaje de error = [(calc. - exp.)/exp.] x 100.

^b Los valores experimentales fueron obtenidos de: Reid et al [1.1].

sistemas binarios. La modificación de Wilke-Lee, disminuye considerablemente el error en mezclas de gases, en donde uno de los componentes es agua. El método empírico de Fuller, Schettler y Giddings [1.13] presenta el menor error, pero como se fundamenta en el volumen atómico, no es el más recomendable para el cálculo en un procesador matemático.

Difusión de Gases en Mezclas Multicomponentes

Con más de dos gases, se obtienen expresiones muy complejas y complicadas. Una situación bastante común en la absorción es aquella en donde los flujos a excepción de uno son iguales a cero, es decir, cuando todos los componentes excepto uno, están inmóviles. Entonces, el coeficiente de difusión para mezclas de multicomponentes se calcula como:

$$D_{Am} = \frac{1 - y_A}{\sum_{i=B}^n \frac{y_i}{D_{Ai}}} \quad (1-12)$$

en donde **A** es el componente que se difunde, **B** es el segundo componente de la mezcla y **i** es cualquier otro componente de la mezcla.

Coefficiente de Difusión en Líquidos

En un líquido las moléculas se encuentran más cercanas entre sí que en un gas, por lo tanto, las moléculas se ven más afectadas por las moléculas vecinas. La rapidez de difusión se ve disminuida. Los valores del coeficiente de difusión son mucho menores que para el gas a baja presión.

La teoría del estado líquido no es satisfactoria para predecir los coeficientes de difusión. Sin embargo, a menudo la forma de la ecuación sirve de esqueleto para predecir con éxito las propiedades. En particular en este caso, el análisis de la difusión de moléculas esféricas a dilución infinita resulta de utilidad. La teoría hidrodinámica de Stokes-Einstein ha servido para desarrollar diversos modelos.

Para una mezcla binaria de un soluto A en el solvente B, el coeficiente de difusión de A difundiendo en una solución infinitamente diluida de A en B, implica que cada molécula de A está rodeada de puro B. En el trabajo de ingeniería, el coeficiente de difusión a dilución infinita es considerado cuando las concentraciones de A alcanzan hasta un 10% molar.

La ecuación de Wilke-Chang [1.14], es en esencia una modificación empírica de la relación de Stokes-Einstein, la cual se expresa de la forma:

$$D_{AB}^* = 7.4 \times 10^{-8} \frac{(\Phi M_B)^{\frac{1}{2}} T}{\eta_B V_A^{0.65}} \quad (1-13)$$

en donde η_B es la viscosidad del solvente B en unidades de centipoise, cP, V_A es el volumen molar del soluto A a la temperatura de ebullición en unidades de $\text{cm}^3 \cdot \text{gmol}^{-1}$ y Φ es el factor de asociación adimensional. A falta de información experimental sobre el valor del volumen molar V_A , es mejor estimarlo en función del volumen crítico, a partir del método de Tyn y Calus [1.15], que guarda la siguiente forma:

$$V_b = 0.285 V_c^{1.048}$$

Wilke y Chang recomiendan que el factor de asociación Φ , debe ser igual a 2.26 si el solvente es agua, 1.9 para el metanol, 1.5 para etanol y 1.0 para solventes no asociados como benceno y éter etílico. Por este método el error promedio mostrado para los sistemas probados por los autores es 10%, como máximo.

Cuando el agua es el soluto y las sustancias orgánicas son el solvente, Olander [1.16] recomienda dividir entre 2.3 para los solventes metanol, etanol, 1-propanol, 2-propanol, n-butanol, isobutanol, alcohol bencílico, trietilenglicol, acetona,

furfuraldehído, etil acetato, n-butil acetato y ácido butírico. Olander atribuye este error al hecho de que el agua se difunde como un tetrámero, y por lo tanto el valor del volumen de la molécula de agua en la ecuación debería ser multiplicado por 4, que elevado a la potencia 0.6 da 2.3.

Difusión de Líquidos en Mezclas Multicomponentes

La difusión de un soluto a dilución infinita en una mezcla homogénea de solventes ha sido discutida por varios autores, los que relacionan la difusión en mezclas de líquidos en función de la viscosidad. La relación empírica de Perkins y Geankoplis [1.17] es:

$$D_{A,m} = \frac{\sum_{j=A}^n x_j D_{A,j} \eta_j^{0.6}}{\eta_m^{0.6}} \quad (1-14)$$

1.4 Tensión superficial

Las moléculas en la superficie de un líquido experimentan una fuerza de atracción por las capas internas del líquido y una atracción menor por las moléculas del gas, poniendo en tensión a la superficie del líquido. Esta fuerza es conocida como tensión superficial σ , y se define como la fuerza ejercida en el plano de la superficie por unidad de longitud. La tensión superficial se expresa en unidades de dina \cdot cm⁻¹.

La tensión superficial de un líquido es función de la temperatura, y según se incrementa la temperatura ésta disminuye, hasta que en el punto crítico la tensión superficial se hace cero. Todos los métodos de cálculo para la tensión superficial de un líquido son empíricos, a excepción del de Garfias [1.18]. Reid et al [1.1],

TABLA VII. Comparación de valores calculados y experimentales para la tensión superficial de líquidos puros.

Componente	T, °C	$\sigma(\text{exp.})$, dina/cm	Porcentaje de error	
			Correlación	Hakim y coautores
Acetona	0	26.21	-2.06	8.38
	20.0	23.70	0	6.98
	40.0	21.16	2.61	5.77
Agua	0	75.60	1.09	52.18
	10.0	74.22	0.50	49.81
	20.0	72.75	0	47.58
	40.0	69.55	-0.71	43.47
Amoniaco	0	25.4	-1.50	15.84
	11.1	23.4	-1.16	12.29
	34.1	18.1	5.82	10.64
Etanol	0	24.05	2.25	11.91
	10.0	23.61	0.26	9.88
	20.0	22.75	0	9.75
	50.0	21.89	-0.30	9.57
Metanol	0	24.49	-0.16	49.41
	20.0	22.61	0	48.16
	50.0	20.14	-1.60	43.34
Error promedio			1.17	25.58

* Porcentaje de error = $[(\text{calc.} - \text{exp.}) / \text{exp.}] \times 100$.

† Los valores experimentales fueron obtenidos de: Weast [1.23].

recomiendan dos métodos de cálculo. Para líquidos sin puente de hidrógeno, utilizan el concepto de estado correspondiente. Una correlación similar a la de estados correspondientes fue propuesta por Hakim y coautores [1.19], con el objeto de incluir líquidos polares introduciendo el factor de Stiel [1.20]. El otro método fue sugerido por Macleod-Sugden [1.21] para líquidos con puente de hidrógeno, que utiliza el Parachor [1.22] calculado a partir de contribuciones de estructura.

Los dos métodos con sus correcciones muestran considerables desviaciones,

principalmente para el agua. Se logra una mayor precisión, cuando se reduce el intervalo de temperatura. La correlación que se utiliza fue modificada recalculando el exponente para disminuir el error. La expresión tiene la siguiente forma:

$$\sigma_2 = \sigma_1 \left(\frac{1 - T_{R2}}{1 - T_{R1}} \right)^{0.897} \quad (1-15)$$

En la Tabla VII se comparan los valores reales de tensión superficial con los experimentales, al utilizar los diferentes métodos.

Tensión Superficial de soluciones acuosas

Para soluciones acuosas orgánicas polares el mejor tratamiento corresponde al postulado por Garfías [1.18], en el que se relaciona la presión superficial π , con la fracción molar del tensoactivo en la solución, x_1^w , mediante el uso del concepto de coeficiente de actividad a dilución infinita, f_1^w , con la ecuación siguiente:

$$x_1^w = \frac{x_1^s}{f_1^w} \theta^{\frac{(\pi - \gamma_o - \gamma_s) \sigma_s}{kT}} \quad (1-16)$$

en donde

$$x_1^s = 1 - \theta^{\frac{\pi \sigma_o}{kT}}$$

γ_o , γ_s , σ_o y σ_s son constantes que dependen únicamente de la temperatura, y guardan relación con la estructura de la intercara y presentan el mismo valor para cualquier sistema. La fracción molar de soluto en la intercara corresponde a x_1^s .

La tensión superficial de la solución es por lo tanto

$$\sigma = \sigma_o - \pi$$

1.5 Conductividad Térmica

Varios modelos se proponen para conocer la conductividad térmica de una sustancia pura en fase líquida o gaseosa. La teoría cinética es la base de los métodos para calcular la conductividad térmica. Estos métodos vienen descritos por Reid et al [1.1]. El comportamiento de la conductividad térmica en un intervalo pequeño de temperatura guarda una relación casi lineal. Por eso, se propone utilizar una correlación empírica para el líquido y para el gas. La ecuación para calcular la conductividad térmica de un gas o un líquido puro es la siguiente:

$$K = CTA + CTB T \quad (1-17)$$

en donde la conductividad térmica, K , tiene unidades de $\text{cal} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ y la

TABLA VIII. Constantes para la ecuación de conductividad térmica de líquidos y gases

Gas	CTA x 10 ³	CTB x 10 ⁶
Acetona	-2.435	1.741
Agua	-1.005	1.834
Amoniaco	-1.138	2.356
Aire	0.932	1.778
Etol	-1.623	1.809
Líquido	CTA x 10 ²	CTB x 10 ⁴
Acetona	6.166	-0.6431
Agua	4.051	3.5140
Amoniaco	11.990	0
Etol	15.620	-3.7210

Las constantes fueron obtenidas a partir de datos experimentales publicados por Weast [1.23].

temperatura, T , en Kelvin.

Las constantes para varios compuestos aparecen en la Tabla VIII. Para calcular la conductividad térmica de mezcla de gases o de líquidos, utilizó la siguiente regla de mezclado:

$$K_m = \frac{\sum y_i K_i M_i^{1/3}}{\sum y_i M_i^{1/3}} \quad (1-18)$$

en donde, la conductividad térmica de la mezcla está en función del peso molecular de los componentes.

1.6 Capacidad Calorífica

La capacidad calorífica de un gas real es igual a

$$Cp_v = Cp_v^{\circ} + \Delta Cp \quad (1-19)$$

en donde Cp_v° , es la capacidad calorífica de un gas que se comporta de forma ideal. La capacidad calorífica residual ΔCp , tiende a cero bajo las condiciones de temperatura y presión de operación. El valor de la capacidad calorífica de un gas ideal se puede obtener a partir de la siguiente expresión:

$$Cp^{\circ} = A + BT + CT^2 + DT^3 \quad (1-20)$$

en donde la temperatura T , es en unidades Kelvin y la capacidad calorífica en unidades $\text{cal} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$. La capacidad calorífica de un líquido se puede obtener a partir de varios métodos. Para facilitar el cálculo, se utiliza la expresión (1-20), pero como la capacidad calorífica de un líquido varía poco en un intervalo pequeño de temperatura, el emplear dos constantes A y B , es suficiente para predecir el valor adecuado.

En la Tabla IX, aparecen las constantes para obtener la capacidad calorífica de varios compuestos. Para obtener la capacidad calorífica de mezcla, la regla de mezclado que se utiliza es la siguiente expresión:

$$Cp_m = Cp_m^* + \Delta Cp \quad (1-21)$$

$$Cp_m^* = \sum y_i Cp_i^* \quad (1-22)$$

TABLA IX. Constantes para el cálculo de la capacidad calorífica de líquido y gas

Gas ^a	A	B x 10 ²	C x 10 ⁵	D x 10 ⁸
Acetona	1.505	6.22400	-2.99200	4.867
Agua	7.701	0.04595	0.25210	-0.859
Aire	7.287	-0.25598	0.59317	-2.738
Amoniaco	6.524	0.56920	0.40780	-2.830
Etol	2.153	5.11300	-2.00400	0.328
Líquido ^b	A	B		
Acetona	15.9551	0.04834		
Agua	17.9798	0.00307		
Amoniaco	7.3595	0.03760		
Etol	-7.9256	0.11743		

^a Las constantes para calcular el Cp del gas con la ecuación cúbica provienen del libro Reid et al [1.1].

^b Las constantes para calcular el Cp del líquido con la ecuación de una recta fueron calculadas a partir de datos experimentales de Cp a diferentes temperaturas en un intervalo de 0 a 70 grados Celsius. Los valores experimentales provienen del West [1.23], del Perry y Chilton [1.24].

CAPITULO **2**

CALCULO DE PROPIEDADES TERMODINAMICAS

CÁLCULO DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS

2 Introducción

Una ecuación de estado expresa propiedades en términos de otras propiedades independientes. El conocimiento de una sola ecuación de estado no es suficiente para describir completamente a un sistema, pero el conocer todas las ecuaciones de estado de un sistema equivale a la ecuación fundamental y consecuentemente a conocer todas las propiedades termodinámicas del sistema.

Van der Waals fue el primero en modificar la ecuación del gas ideal en base a un fundamento teórico para sistemas reales en el año de 1873. La ecuación de van der Waals contiene dos constantes a y b , además de la constante universal de los gases R . Las dos constantes propuestas corrigen el efecto que tienen las fuerzas intermoleculares y el volumen molecular sobre la presión y el volumen del sistema. El valor de las constantes difiere para cada gas. La ecuación de van der Waals representa una mejora considerable comparada con la ecuación del gas ideal, sin embargo no predice a elevadas presiones satisfactoriamente el comportamiento del gas ni del líquido.

Con el transcurso de los años diversas ecuaciones de estado han sido propuestas para los gases, como las de Berthelot y Dieterici en 1899. Berthelot introdujo la temperatura en el término de presión y Dieterici sugirió una ecuación de tipo exponencial, más complicada y menos exacta inclusive que la ecuación de van der Waals. Una ecuación de gran interés teórico es la virial, porque permite relacionar los coeficientes viriales de la ecuación con la magnitud de fuerzas intermoleculares, pero desgraciadamente el conocimiento de las fuerzas intermoleculares es aún limitado y además a altas presiones la ecuación virial es inexacta. Otra ecuación interesante y útil para describir a un gas es la de Redlich-Kwong [2.1], la cual utiliza también dos parámetros y es bastante exacta en un amplio intervalo de temperatura y presión.

Thodos [2.2] realizó un estudio comparativo de las ecuaciones de estado gaseoso en 1965 y llegó a la conclusión de que la de Redlich-Kwong es la ecuación de dos parámetros que predice con mayor exactitud el comportamiento de un sistema, tan buena como la ecuación de cinco constantes de Beattie-Bridgeman y la de ocho constantes de Benedict-Webb-Rubin.

Para conocer las propiedades de ambas fases: la líquida y la vapor, en equilibrio entre sí, a una determinada temperatura y presión, se utilizaron inicialmente diferentes métodos de cálculo, esto es, para el líquido se calculaba un coeficiente de actividad derivados de la energía libre de Gibbs de exceso, mientras que se reservaba la ecuación de estado para evaluar únicamente el coeficiente de fugacidad del vapor. En los últimos años se ha generalizado el uso de una sola ecuación de estado que describa el equilibrio de las dos fases de un sistema, líquido y vapor, de tal suerte, que se pueda calcular los coeficientes de fugacidad tanto para el vapor como para el líquido.

Una ecuación de dos constantes como la de Redlich-Kwong, predice bastante bien el comportamiento de algunos líquidos, pero desafortunadamente presenta desviaciones en la región del líquido. Las ecuaciones de Soave [2.3] y de Peng-Robinson [2.4] propuestas en 1972 y 1976 respectivamente, constituyen una mejora considerable a la de Redlich-Kwong ya que en las zonas de mayor interés mejoran satisfactoriamente el cálculo del volumen molar de la fase líquida para compuestos no polares y ofrecen mayor precisión con la misma simplicidad de una ecuación de dos parámetros.

En el año de 1986, Stryjek y Vera [2.5] modifican el cálculo del parámetro A de la ecuación de Peng-Robinson para incluir en el tratamiento, los compuestos polares y los asociados. Cuatro años después, Sandoval [2.6] propone reglas de mezclado (trabajo doctoral) en la expresión para el cálculo de A_i de mezcla, que permite reducir considerablemente las desviaciones que suelen presentar las mezclas de los

compuestos fuertemente polares.

El presente trabajo se basa en la ecuación de Peng-Robinson y en las modificaciones realizadas por Stryjek, Vera y Sandoval para el cálculo del equilibrio de fases líquido-vapor.

2.1 Ecuación de Estado

La ecuación PRSV de estado tiene la forma propuesta por Peng y Robinson:

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v^2 + 2bv - b^2} \quad (2-1)$$

en donde,

$$a = \frac{A(RT)^2}{P} \quad b = \frac{BRT}{P}$$

el cálculo de A y B para componentes puros está dado por las expresiones:

$$A_i = \frac{0.457235 P_{R_i} \alpha_i}{T_{R_i}^2} \quad (2-2)$$

$$\bar{B}_i = \frac{0.077796 P_{R_i}}{T_{R_i}} \quad (2-3)$$

Para conocer α_i a T_{R_i} menor o igual a la unidad, se utiliza la forma que Soave propuso en 1972,

$$\alpha_i = \left(1 + \kappa_i \left(1 - \sqrt{T_{R_i}} \right) \right)^2 \quad (2-4)$$

Para obtener el valor de α_i a $T_R > 1$, se emplea la ecuación de Mathias [2.7],

$$\alpha_i = \theta \left[\frac{2(\alpha_i - 1)}{c_i} (1 - T_{R_i}^{\theta}) \right] \quad (2-5)$$

donde c_i es

$$c_i = 1 + 0.5 \kappa_{\alpha_i} - 0.3 \kappa_i$$

$$T_{R_i} = \frac{T}{T_{c_i}}$$

$$P_{R_i} = \frac{P}{P_{c_i}}$$

en donde κ para un componente puro es considerado como una función del factor acéntrico ω .

Stryjek y Vera modificaron el valor de κ_i como una consecuencia del análisis que efectuaron de las desviaciones que sufre la presión de vapor a baja temperatura reducida. El error máximo que era de 30% con la ecuación de Peng y Robinson se disminuye a 1% utilizando la siguiente expresión:

$$\kappa_i = \kappa_{\alpha_i} + \kappa_i \left(1 + \sqrt{T_{R_i}} \right) \left(0.7 - T_{R_i} \right) \quad (2-6)$$

en donde κ_i es el parámetro característico de ajuste para cada componente puro, y κ_{α} se expresa en función del factor acéntrico según la siguiente ecuación

$$\kappa_{\alpha_i} = 0.378893 + 1.4897153 \omega_i - 0.17131848 \omega_i^2 + 0.0196554 \omega_i^3 \quad (2-7)$$

Esta corrección reduce desviaciones para el agua y los alcoholes a una temperatura reducida menor o igual al punto crítico.

Stryjek y Vera en su publicación listan los valores de T_c , P_c , ω y κ_1 para 90 compuestos de interés industrial, de los cuales 5 aparecen en la Tabla X por referirse a los compuestos de interés en el presente trabajo.

TABLA X. Constantes físicas de compuestos y mezclas

Substancia	Temperatura crítica, K	Presión crítica, atm	Factor acéntrico, ω	κ_1
Acetona	508.100	46.357	0.30667	-0.00888
Agua	647.286	218.100	0.34380	-0.06635
Aire	132.190	36.470	0.03390	0.01894
Amoniaco	405.550	111.300	0.25170	0.00100
Etolol	513.920	60.690	0.64439	-0.03374

Referencia: Datos publicados por Stryjek y Vera [2.5].

Para los demás componentes analizados por Stryjek y Vera, se obtiene una ligera mejoría en el resultado usando $\kappa_1 = 0$ para temperatura reducida por arriba de 0.7.

Stryjek y Vera evaluaron de nuevo el factor acéntrico para varias substancias puras, al usar los mejores valores de P_c y T_c encontrados en la literatura. Los valores de κ_1 fueron determinados usando la ecuación (2-6) y la ecuación (2-7) para κ , con datos de presión de vapor a baja temperatura reducida. Stryjek y Vera recomiendan utilizar los datos de la Tabla X para cálculos subsecuentes.

Para mezclas, las siguientes reglas han sido utilizadas

$$B = \sum_{i=1}^n x_i \bar{B}_i \quad (2-8)$$

$$A = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j A_{ij} \quad (2-9)$$

Stryjek y Vera hicieron una segunda modificación en el cálculo de A_i a partir de la expresión de Margules, la cual fue corregida por Sandoval recientemente tomando la siguiente forma,

$$A_{ij} = \sqrt{A_i A_j} \left[1 - (\bar{k}_{ij} + \Delta k_{ij} x_i + \Delta k_{ji} x_j) \right] \quad (2-10)$$

en donde

$$\bar{k}_{ij} = \frac{1}{2} (k_{ij} + k_{ji})$$

$$\Delta k_{ij} = k_{ij} - \bar{k}_{ij}$$

$$\Delta k_{ji} = k_{ji} - \bar{k}_{ij}$$

Los parámetros k_i y k_j son característicos de cada sistema binario y corrigen el posible error entre la presión de vapor experimental y la presión de vapor calculada para la mezcla. Estos datos fueron calculados por Sandoval para varios sistemas a presión atmosférica y se consignan en la Tabla XI. Para los compuestos del carbono el parámetro k_i es igual a k_{i^*} , por lo tanto la ecuación se modifica de tal forma que se pueden utilizar los k_i publicados en DECHEMA [2.8].

TABLA XI. Constantes de parámetros binarios

Mezcla binaria	Parámetro k_{12}	Parámetro k_{21}
Acetona-Agua	-0.1141	-0.25050
Acetona-Aire	0.1000	-0.12000
Amoníaco-Agua	-0.3433	-0.24220
Amoníaco-Aire	0.1000	-0.12000
Etanol-Agua	-0.0655	-0.11246
Agua-Aire	-0.5700	-0.58000
Etanol-Aire	0.1000	-0.12000

Las propiedades termodinámicas que se calculan son la fugacidad y la entalpía molar parcial del líquido y del vapor para cada componente, las cuales están en función del factor de compresibilidad z , que se obtiene sustituyendo en la ecuación (2-1) las relaciones A y B para obtener la expresión

$$z^3 + (B - 1)z^2 + (A - 2B - 3B^2)z + B^3 + B^2 - AB = 0 \quad (2-11)$$

La relación adimensional $f/(P y_i)$ (fugacidad sobre presión parcial), es una propiedad de mezcla llamada coeficiente de fugacidad, a la que se le da el símbolo ϕ_i expresado para cada componente por la ecuación:

$$\ln \phi_i = \frac{\bar{B}_i}{B} (z - 1) - \ln(z - B) + \frac{A}{2\sqrt{2}B} \left[\frac{\bar{B}_i}{B} - \frac{\bar{A}_i}{A} \right] \ln \frac{z + (1 + \sqrt{2})B}{z + (1 - \sqrt{2})B} \quad (2-12)$$

en donde el término

$$\bar{A}_i = \frac{1}{n} \left(\frac{\delta A_i n^2}{\delta n_i} \right)_{n_p, i}$$

que en función de la regla de mezclado adquiere la siguiente forma particular

$$\bar{A}_i = 2 \sum_j x_j A_{ij} - 2 x_i \sum_j x_j \sqrt{A_i A_j} \Delta k_{ij} + \sum_{m \neq j} \sum_j x_m x_j \sqrt{A_m A_j} [x_m \Delta k_{mj} + x_j \Delta k_{jm}] \quad (2-13)$$

En el equilibrio termodinámico las fugacidades de cada componente en cada fase son igual entre si

$$f_i^V = f_i^L$$

y en términos del coeficiente de fugacidad queda la siguiente relación,

$$\varphi_i^V y_i = \varphi_i^L x_i$$

La entalpía molar parcial de cada componente en la mezcla se calcula por la siguiente ecuación

$$\bar{H}_i = H_i^* + \Delta \bar{H}_i \quad (2-14)$$

donde H_i^* es la entalpía del componente puro i como gas ideal y está dado por

$$H_i^* = \int_{T_o}^T C_{p,i}^* dT \quad (2-15)$$

Utilizando la expresión (1-20), para el $C_{p,i}^*$ del gas ideal se obtiene

$$H_i^* = A(T - T_o) + B \frac{(T^2 - T_o^2)}{2} + C \frac{(T^3 - T_o^3)}{3} + D \frac{(T^4 - T_o^4)}{4} \quad (2-16)$$

La temperatura base T_o se escoge arbitrariamente y en este trabajo se toma $T_o = 273.15$ K. La corrección para gas real ΔH_i se obtiene de la ecuación de estado y está dada por la relación,

$$\frac{\Delta \bar{H}_i}{RT} = \bar{z}_i - 1 + \frac{A}{B} \left(\bar{A}'_i - \bar{A}_i - \frac{(A' - A)}{B} \bar{B}_i \right) + \left(\frac{A' - A}{B} \right) \frac{z \bar{B}_i - B \bar{z}_i}{z^2 + 2Bz - B^2} \quad (2-17)$$

donde

$$A = \frac{1}{2\sqrt{2}} \ln \frac{z + B(1 + \sqrt{2})}{z + B(1 - \sqrt{2})} \quad (2-18)$$

$$A' = \frac{1}{2} \sum_j \sum_i x_i x_j A_{ij} [F(T)_{ij} + F(T)_{ji}] \quad (2-19)$$

$$\bar{A}'_i = \sum_j x_j A_{ij} [F(T)_i + F(T)_j] - x_j \sum_j x_j \sqrt{A_i A_j} [F(T)_i + F(T)_j] \Delta k_{ij}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_m \sum_j x_m x_j \sqrt{A_m A_j} [F(T)_j + F(T)_m] (x_j \Delta k_{jm} + x_m \Delta k_{mj}) \quad (2-20)$$

Para T_R menor o igual a la unidad,

$$F(T_R)_i = \frac{T}{a_i} \frac{da_i}{dT} = 1 + \kappa_{oi} \sqrt{\frac{T_R}{\alpha_i}} + \frac{2 \kappa_{oi} T_R}{\sqrt{\alpha_i}} (1.7 - 2 T_R)$$

Para $T_R > 1$,

$$F(T_R)_i = \frac{T}{a_i} \frac{da_i}{dT} = -2 (c_i - 1) T_R^{c_i}$$

y z_i es igual a

$$\bar{z}_i = \left(\frac{\delta n z}{\delta n_i} \right)_{n_{j \neq i}}$$

que en función de la ecuación (2-11) toma la siguiente forma

$$\bar{z}_i = \frac{z^2(1 - \bar{B}_i) - z [\bar{A}_i - 4B - (2 + 6B) \bar{B}_i] + [B \bar{A}_i + (A - 2B - 3B^2) \bar{B}_i - B^2]}{3z^2 - 2z(1 - B) + [A - 2B - 3B^2]} \quad (2-21)$$

2.2 Método de convergencia

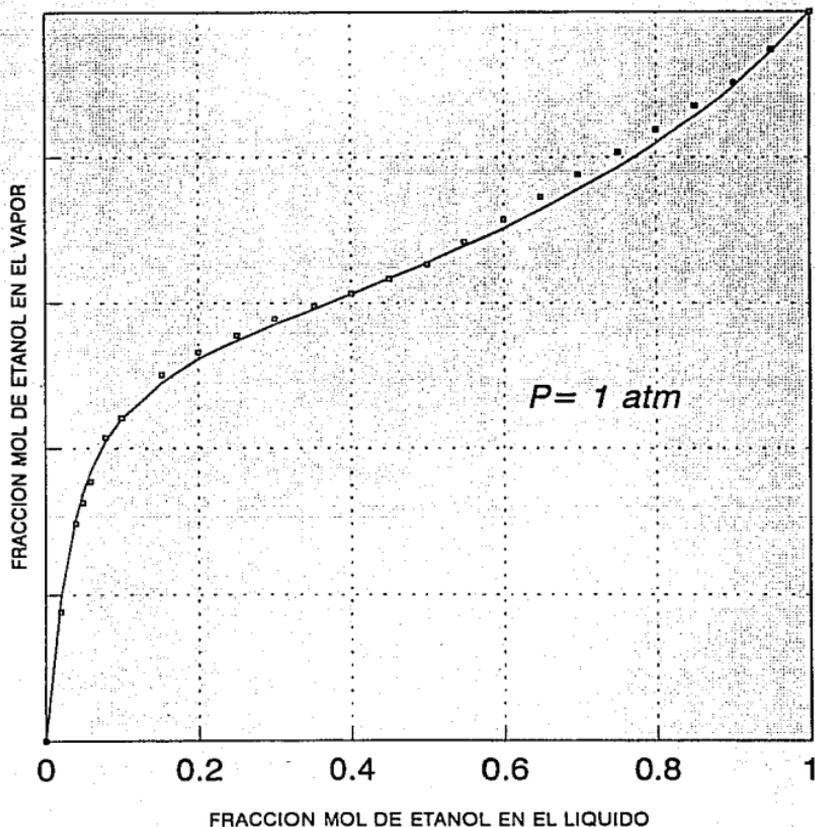
Para resolver la ecuación de estado cúbica para una mezcla se requiere de un método matemático iterativo para evaluar sus raíces. El método más conocido y de mayor uso es el método de Newton-Raphson, que es capaz de encontrar la solución en un número mínimo de iteraciones, pero con la desventaja de que en ocasiones las raíces apropiadas no existen. Un ejemplo de una raíz espuria es cuando obtenemos un valor del factor de compresibilidad para el líquido menor que el valor del covolumen B.

El método analítico propuesto por Mathías, Boston y Watanasiri [2.9] evita la solución trivial a la ecuación de estado cúbica extrapolando en caso de que la raíz no sea la adecuada.

En este trabajo se utiliza el procedimiento propuesto por Romero, Molina y Bazúa [2.10] que combina la solución analítica con el método de extrapolación de Mathías.

Para ejemplificar el comportamiento del modelo en el cálculo de la composición y temperatura en el equilibrio, se presenta a continuación varias gráficas donde se comparan los resultados de la ecuación de estado PRSV con los resultados experimentales para diferentes sistemas. Los datos experimentales provienen de la colección DECHEMA [2.11].

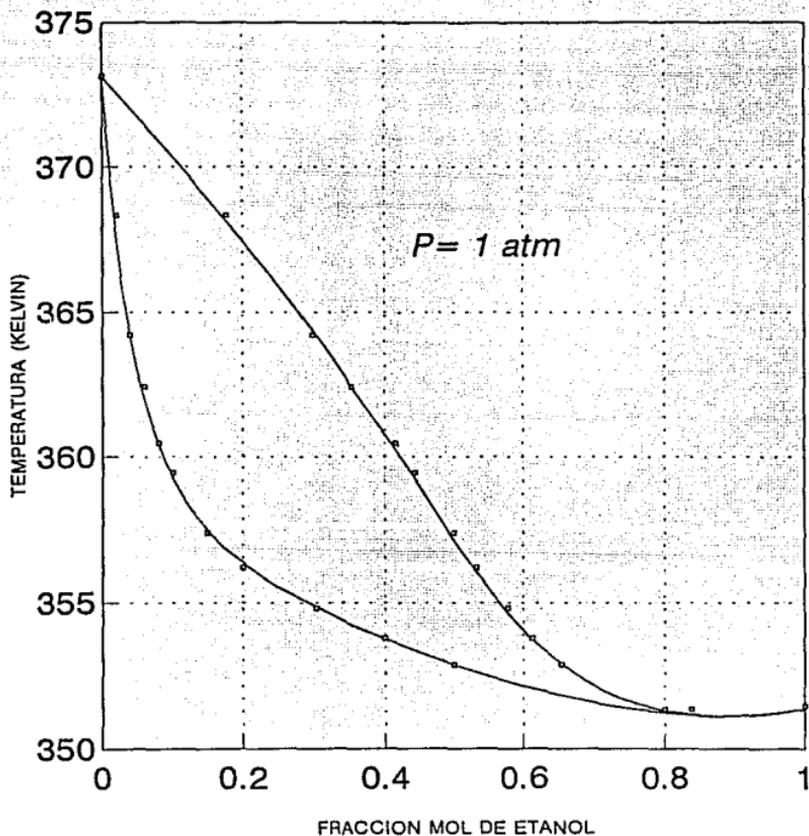
MEZCLA ETANOL-AGUA EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR



◦ EXPERIMENTAL — ECUACION PRSV

GRAFICA 2.1

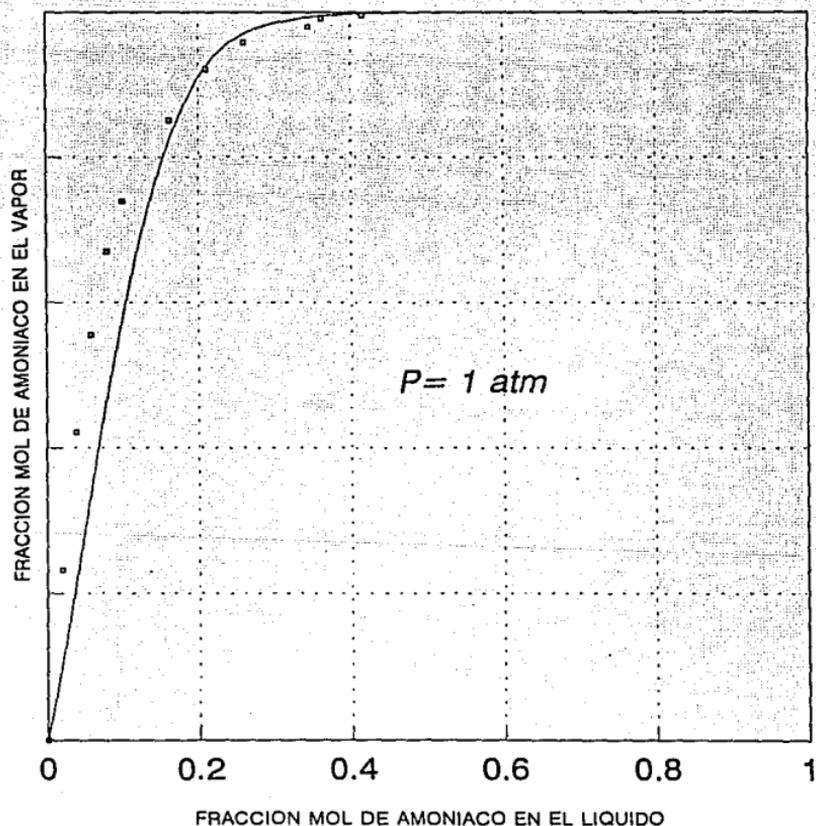
MEZCLA ETANOL-AGUA EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR



• EXPERIMENTAL — ECUACION PRSV

GRAFICA 2.2

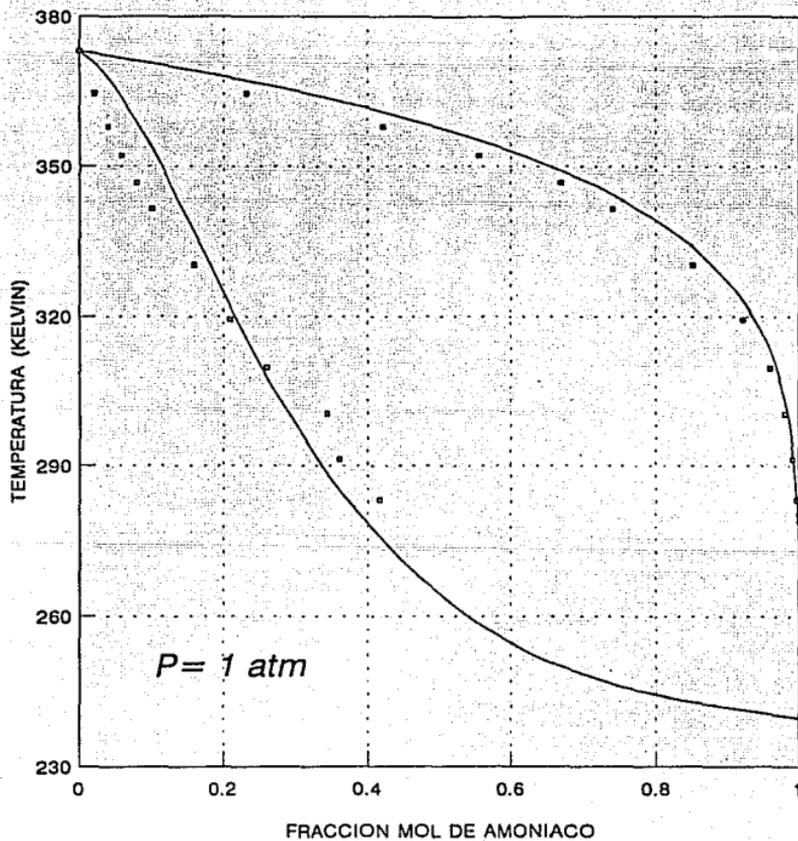
MEZCLA AMONIACO-AGUA EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR



◻ EXPERIMENTAL — ECUACION PRSV

GRAFICA 2.3

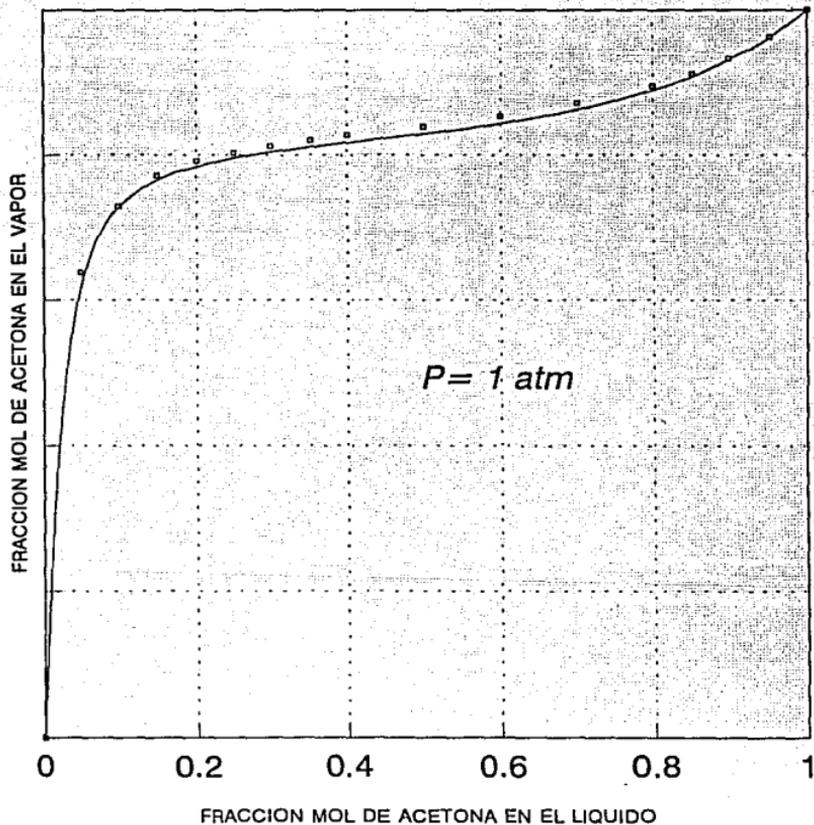
MEZCLA AMONIACO-AGUA EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR



□ EXPERIMENTAL — ECUACION PRSV

GRAFICA 2.4

MEZCLA ACETONA-AGUA EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR



◻ EXPERIMENTAL — ECUACION PRSV

GRAFICA 2.5

CAPITULO

3

**CALCULO DE LA VELOCIDAD DE INUNDACION
Y DE LA CAIDA DE PRESION EN UNA TORRE
EMPAKADA UTILIZANDO UN METODO
ITERATIVO**

CÁLCULO DE LA VELOCIDAD DE INUNDACIÓN Y DE LA CAÍDA DE PRESIÓN EN UNA TORRE EMPACADA UTILIZANDO UN MÉTODO ITERATIVO

3 Introducción

Una torre empacada muestra un comportamiento hidráulico satisfactorio siempre y cuando los fluidos que circulan a contracorriente fluyan a una velocidad razonable. Sin embargo, puede elevarse el régimen de flujo a tal nivel, que el vapor impida el flujo descendente del líquido y por lo tanto se inunda la torre.

En virtud de que la torre inundada, trabaja con una muy baja eficiencia en la absorción, la velocidad del vapor a la cual se inunda, resulta ser un parámetro fundamental en el diseño, puesto que en la operación real de una torre de absorción, jamás deberán intentarse condiciones cercanas a las de inundación.

Es obvio que la caída de presión a través de un empaque se incrementa con la velocidad de ambos fluidos. Lo que no resulta tan evidente es determinar como influye en la caída de presión la relación que guardan entre sí dichas velocidades, así como sus densidades, pero principalmente la del gas.

En la práctica se observa que si se mantiene fijo el flujo de gas, la caída de presión aumenta conforme se incrementa el flujo del líquido, lo cual conduce a que eventualmente se inunde la torre. En base a lo anterior el diseñador debe alcanzar un compromiso, entre el flujo de líquido que propicie una elevada eficiencia en la absorción y aquel que conduzca a bajas caídas de presión.

Como consecuencia de la compresibilidad de un gas, las torres de absorción que trabajan a presión sufren mayores caídas de presión y se inundan más fácilmente que aquellas que se encuentran a presión atmosférica.

Las características del empaque también influyen sobre la caída de presión en la torre de absorción, aun cuando esta variable se fija desde un principio al seleccionar el empaque.

Zens [3.1] hizo la observación de que la máxima caída de presión se registra en el punto de inundación, y de que una vez inundada, la caída de presión no se altera. Esta observación le permitió a Leva [3.2] desarrollar una correlación, que Eckert [3.3] mejoró.

Eckert propuso un método para que el diseñador obtenga de una gráfica, de forma rápida y fácil, la velocidad de inundación y la caída de presión en un proceso de absorción. Este método está fundamentado en los trabajos realizados por Sherwood [3.4] y Leva.

Sherwood sugirió una manera de calcular la masa velocidad del gas para inundar la torre, en base a las masas velocidades de los fluidos alimentados. Por otra parte, Leva estima la caída de presión con una correlación que involucra las velocidades relativas de líquido y vapor, la densidad del vapor y constantes que dependen del tipo de empaque.

Eckert en su método gráfico, coloca en las abscisas el valor de x ,

$$x = F_{LV} = \frac{L}{V} \sqrt{\frac{\rho_v}{\rho_L}}$$

en donde L , es el flujo másico del líquido y V , el flujo másico del gas. Como la densidad de los líquidos fluctúa poco, entre 0.6 y 1.0, realmente los parámetros fáciles de modificar son la relación L/V y la densidad del gas como consecuencia de la presión de trabajo. En las ordenadas, Eckert sitúa los valores de y :

$$y = \frac{G^2}{g} F_p \frac{1}{\rho_v \rho_L} \frac{\rho_w}{\rho_L} \left(\frac{\eta_L}{\eta_w} \right)^{0.2}$$

La masa velocidad por área transversal de gas G , derivada de la gráfica de Eckert, permite dimensionar el diámetro de la torre de absorción.

La empresa Norton [3.5] presenta un modelo muy similar al método gráfico de Eckert para calcular la caída de presión y la velocidad del gas cuando se inunda la torre. Norton hace una corrección que resulta significativa en torres que operan a presión elevada.

Al trabajar el diseño de una torre con el auxilio de una computadora digital, no conviene usar tablas derivadas de gráficas, puesto que se requeriría usar un espacio considerable de memoria, además del tiempo adicional que significa localizar el intervalo y efectuar interpolaciones.

Es por ello, que es aconsejable utilizar una correlación algebraica que permita encontrar la masa velocidad máxima permisible de gas en términos de las variables independientes: L/V y densidad del gas entre densidad del líquido.

En el presente trabajo se utiliza una ecuación elaborada por Barnés [3.6], similar a la propuesta por Sherwood. La ecuación da la masa velocidad por área transversal G , necesario para inundar la torre.

Para conocer el cambio en la presión por unidad de longitud, a partir de la velocidad de inundación, se utiliza la ecuación desarrollada en base a datos reportados por Eckert.

5.1 Ecuaciones Fundamentales

El modelo de Eckert, el cuál está implícito en términos de caída de presión (P_0), es:

$$y = \frac{G^2}{g} F_p \frac{1}{\rho_v \rho_L} \frac{\rho_w}{\rho_L} \left(\frac{\eta_L}{\eta_w} \right)^{0.2} = f(F_{LV}, P_0) \quad (3-1)$$

donde F_p es el factor de empaque (ver Apéndice A), P_0 es la caída de presión y F_{LV} es un parámetro que está en función de los flujos líquido-vapor y es igual a:

$$x = F_{LV} = \frac{L}{V} \sqrt{\frac{\rho_v}{\rho_L}} \quad (3-2)$$

En el modelo de Eckert, conocidas las densidades del líquido y del gas al igual que los flujos L (líquido) y V (gas), se calcula el valor de F_{LV} que corresponde al eje x , con el cual se lee un valor de y utilizando la curva de inundación como guía. Despejando el flujo G (gas) de la ecuación (3-1), calculamos la velocidad de inundación G_F y el área de inundación A_F .

La velocidad de carga G_0 tiene que ser inferior a la velocidad de inundación G_F , y hasta cuanto debe ser menor es una cuestión que será fijada por el diseñador. Generalmente, la velocidad más conveniente del gas es igual o mayor al cincuenta por ciento de la velocidad de inundación.

Obtenida la velocidad de carga G_0 y un área A_0 , se calcula una nueva y_0 y en el punto donde se cruzan con $x_0 = F_{LV}$, se lee una caída de presión.

Utilizando una computadora no sería posible emplear el modelo gráfico de Eckert. El modelo iterativo que se presenta resuelve esta dificultad utilizando dos ecuaciones.

La primera ecuación nos da la y de inundación, que la llamamos y_f , la cuál es calculada utilizando el método de Newton-Raphson. Esta ecuación se da a continuación:

$$F_{Lv} = -0.2282 + \frac{0.07811}{\sqrt{y}} + \frac{0.01635}{y} - \frac{2.716 \times 10^{-4}}{\sqrt{y^3}} \quad (3-3)$$

Conocida la velocidad de inundación, y calculada la velocidad de carga y y el área, se obtiene la caída de presión utilizando nuevamente un Newton-Raphson con la siguiente ecuación:

$$F_{Lv} = -f_1(P_g) + \frac{f_2(P_g)}{\sqrt{y}} + \frac{f_3(P_g)}{y} - \frac{f_4(P_g)}{\sqrt{y^3}} \quad (3-4)$$

en donde:

$$f_1 = 0.11883 - \frac{0.12652}{P_g} + \frac{5.3434 \times 10^{-3}}{P_g^2} - \frac{1.2082 \times 10^{-4}}{P_g^3}$$

$$f_2 = -0.016848 - \frac{0.12095}{P_g} + \frac{0.013603}{P_g^2} - \frac{4.0935 \times 10^{-4}}{P_g^3}$$

$$f_3 = 0.037105 + \frac{0.012411}{P_g} - \frac{1.9896 \times 10^{-3}}{P_g^2} + \frac{6.5805 \times 10^{-5}}{P_g^3}$$

$$f_4 = 1.4238 \times 10^{-3} + \frac{5.1837 \times 10^{-4}}{P_g} - \frac{9.159 \times 10^{-5}}{P_g^2} + \frac{3.1311 \times 10^{-8}}{P_g^3}$$

3.2 Método por Computadora

Como primer paso en el cálculo de los flujos máscicos para el líquido y el vapor por unidad de área, se procede a evaluar el parámetro F_{LV} a partir de los datos proporcionados por el diseñador. Con F_{LV} en la ecuación 3, se obtiene por iteración el valor de y_f para la condición de inundación.

La velocidad de inundación del gas G_V^f se conoce despejándola de la ecuación (3-2). El cociente entre el flujo máscico y la velocidad máscica de inundación V/G_V^f , nos da como resultado el área de inundación A_f .

La velocidad de carga máscica G_V^o para la operación de la torre, se obtiene como un porcentaje de la velocidad de inundación G_V^f , que el diseñador debe establecer. Y de igual forma para conocer el área A_o para diseñar la torre, se debe partir del área de inundación A_f entre el porcentaje.

La caída de presión P_o resulta de resolver la ecuación (3-4), iterando a partir de la y_o y de F_{LV^o} de operación.

Puede darse el caso de que con la nueva masa velocidad de carga del gas, la caída de presión sea tan grande que se inunde la torre. Se debe utilizar un porcentaje menor de la masa velocidad de inundación para modificar la velocidad de la carga de gas.

El procedimiento de cálculo para conocer la masa velocidad de operación y el área se muestra en el figura 3.1.

En la Figura 3.2, se observan puntos que representan el modelo de Eckert, y junto a estos, líneas que reproducen los cálculos con el método por computadora.

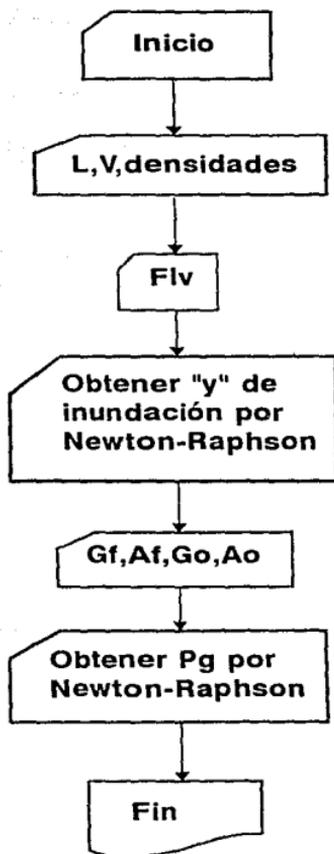


FIGURA 3.1

LINEAS DE CAIDA DE PRESION PARA TORRE EMPACADA

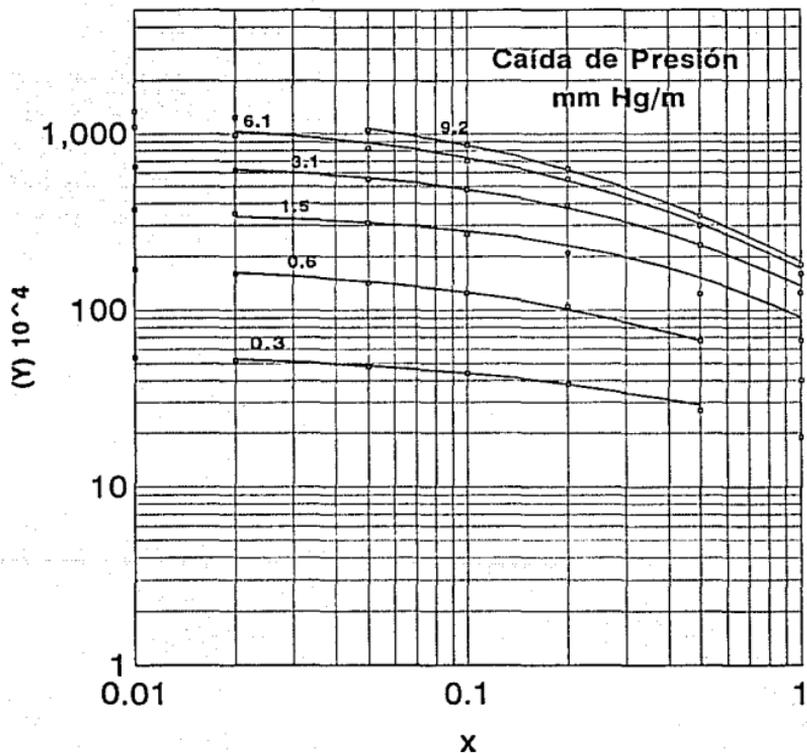


FIGURA 3.2

CAPITULO **4**

TRANSFERENCIA DE MASA Y DE CALOR

TRANSFERENCIA DE MASA Y DE CALOR

4 Introducción

La característica fundamental del algoritmo que se desarrolla en el presente trabajo consiste en el uso de las ecuaciones de transferencia de masa y de calor para calcular los flujos de soluto y disolvente a través de la interfase y como consecuencia la temperatura y composición de cada fase.

Es importante recordar que la concentración de soluto tiende a incrementarse en la fase líquida en cuanto sucede la absorción, y en forma paralela el disolvente tiende a evaporarse. La transferencia de masa y calor dependen de los coeficientes de transferencia y de los gradientes de concentración de la fase con respecto a la interfase.

Los coeficientes de transferencia son función de las condiciones hidrodinámicas del sistema y de las propiedades físicas del medio. El coeficiente de transferencia de masa, en particular, es función de la difusividad del componente en la solución. Por otra parte, la transferencia de calor es principalmente función de la conductividad térmica. Ambas son función del número de Reynolds.

4.1 Coeficiente de Transferencia de Masa

Para conocer el coeficiente de transferencia de masa de compuestos polares, se han propuesto varios métodos de cálculo que consideran propiedades tales como la difusividad, viscosidad, densidad y tensión superficial.

Uno de los primeros métodos confiables de cálculo es el de Shulman y coautores [4.1], publicado en el año de 1955. Ellos relacionan los coeficientes de transferencia

de masa con ciertas condiciones de operación. Las ecuaciones que desarrollaron para el cálculo son adecuadas para empaques del tipo anillo Raschig y silla de montar Berl, y no contemplan otro tipo de empaque. Este modelo se describe en detalle en el libro escrito por Treybal [4.2].

Otro método de cálculo, que es precisamente el que se utiliza en el presente trabajo para el diseño de la torre de absorción fue propuesto por Onda [4.3] en el año de 1968 y permite estimar los coeficientes de transferencia de masa para cualquier tipo de empaque. Así, el coeficiente de transferencia de masa en la fase líquida en términos de concentración k_L , está dado por la siguiente expresión adimensional:

$$k_L \left(\frac{\rho_L}{g \eta_L} \right)^{\frac{1}{3}} = 0.0051 \left(\frac{G_L}{a_w \eta_L} \right)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{\eta_L}{\rho_L D_L} \right)^{-\frac{1}{2}} (a_p d_p)^{0.4} \quad (4-1)$$

El coeficiente de transferencia de masa en la fase vapor en términos de presión k_v , queda dado por la siguiente expresión adimensional:

$$k_v \left(\frac{R T}{a_p D_v} \right) = 5.23 \left(\frac{G_v}{a_p \eta_v} \right)^{0.7} \left(\frac{\eta_v}{\rho_v D_v} \right)^{\frac{1}{3}} (a_p d_p)^{-2} \quad (4-2)$$

donde G_L y G_v se refieren a la masa velocidad para el líquido y el gas respectivamente.

El área interfacial de empaque húmedo a_w de acuerdo con Onda, guarda la siguiente relación:

$$a = a_w = a_p \left[1 - \exp \left\{ -1.45 R\theta_L^{0.1} Fr_L^{-0.05} W\theta_L^{0.2} \left(\frac{\sigma}{\sigma_c} \right)^{-0.75} \right\} \right] \quad (4-3)$$

en donde a_p es el área interfacial de empaque seco. Los números adimensionales de

Reynolds, Froude y Weber para el líquido se definen por:

$$Re_L = \frac{G_L}{\mu_p \eta_L} \quad Fr_L = \frac{\mu_p G_L^2}{g \rho_L^2} \quad We_L = \frac{G_L^2}{\mu_p \sigma \rho_L}$$

Conviene recordar que el valor de la tensión superficial crítica σ_c , que interviene en la ecuación (4-3), depende de la naturaleza del material del que está hecho el empaque. En la Tabla XII, se muestran algunos valores de tensión superficial crítica para ciertos materiales.

TABLA XII. Tensión superficial crítica para empaques

EMPAQUE	σ_c (dina•cm ⁻¹) ^a
Carbón	56
Porcelana	61
Vidrio	73
Acero	75
Parafina	20
Polietileno	33
Cloruro de polivinilo (PVC)	40

^a Los datos fueron obtenidos de: Perry y Chilton [1.24].

Onda también estipula las siguientes restricciones para su modelo:

$$\begin{aligned} 0.04 < Re_L < 500 \\ 1.2 \times 10^{-8} < We_L < 0.27 \\ 2.5 \times 10^{-9} < Fr_L < 1.8 \times 10^{-2} \\ 0.3 < (\sigma_c / \sigma) < 2 \end{aligned}$$

En el año de 1982, Bolles y Fair [4.4] recomendaron usar el modelo de Monsanto Co. publicado por Cornell y coautores [4.5] por ser más preciso que el modelo de Onda. Este modelo tiene el inconveniente de fundamentarse en relaciones empíricas independientes para cada empaque, representadas gráficamente, y no tan fácilmente implementable para cálculo en un procesador matemático como el método de Onda. La altura de la unidad de transferencia se describe en términos de ciertos parámetros para cada tipo de empaque, de la masa velocidad y del número de Schmidt. Este método no involucra el conocimiento de los coeficientes de transferencia de masa.

Con el propósito de comparar los valores que se obtienen mediante el uso del método de Shulman y coautores, el de Cornell y coautores y el de Onda, a continuación se listan los valores de los coeficientes de transferencia de masa para el líquido y el gas en la absorción de un soluto, cuando el flujo gaseoso es de $287 \text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$ y se absorbe en una corriente líquida que fluye a $683 \text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$. La temperatura de alimentación de ambas corrientes es de 15°C . La composición del gas es 6% en mol de soluto (amoníaco, acetona, etanol, etc), 92.32% en mol del inerte (aire) y 1.68% en mol del disolvente (agua). El empaque escogido para el cálculo es del tipo Sillas Berl de cerámica de 0.025 m de diámetro. La carga de operación es 70% del flujo de inundación.

En la Tabla XIII y XIV se presentan los valores que se obtienen de los coeficientes volumétricos de transferencia de masa en términos de fracción mol ($k_y a$) y ($k_x a$), al utilizar el modelo de Onda, de Shulman y coautores y el de Cornell y coautores.

Del análisis de las cifras consignadas en las Tablas II y III, se puede inferir que cualquiera de los tres métodos rinde coeficientes volumétricos de magnitud muy similar en el gas y con una cierta discrepancia en el líquido.

TABLA XIII. Coeficiente Volumétrico de Transferencia de Masa para el gas.

SISTEMA	$(k_g a)$, $\text{kmol} \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$		
	Onda	Shulman y coautores	Cornell y coautores ($z = 10 \text{ ft}$)
Acetona en aire	374	301	236
Agua en aire	567	777	321
Amoníaco en aire	608	939	340
Agua en aire	595	897	335
Etanol en aire	414	363	256
Agua en aire	581	776	330

TABLA XIV. Coeficiente Volumétrico de Transferencia de Masa para el líquido.

SISTEMA	$(k_{L a})$, $\text{kmol} \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$		
	Onda	Shulman y coautores	Cornell y coautores ($z = 10 \text{ ft}$)
Acetona en agua	982	1522	1517
Amoníaco en agua	1408	2773	2329
Etanol en agua	1062	1574	1672

4.2 Coeficiente de Transferencia de Calor

En una torre empacada los flujos de gas y de líquido son turbulentos. En flujos turbulentos, el movimiento de remolino que causa la transferencia de masa provoca también la transferencia de calor y cantidad de movimiento. Por ello, existe correspondencia entre la transferencia de masa, calor y cantidad de movimiento, que se describe mediante la analogía de Chilton-Colburn (4.6), que para flujo gaseoso se expresa como sigue:

$$\frac{k_y}{G} \left(\frac{\eta_V}{\rho_V D_V} \right)^{\frac{2}{3}} = J_M = \frac{h_V}{C_P G} \left(\frac{C_P \eta_V}{\kappa_V} \right)^{\frac{2}{3}} = J_H = \frac{f}{2} \quad (4-4)$$

en donde J_M y J_H se definen como los factores de transferencia de masa y calor.

Al conocerse el coeficiente de transferencia de masa y las propiedades que intervienen en la analogía de Chilton-Colburn, el coeficiente de transferencia de calor para el gas resulta ser:

$$h_V = C_{P_{mV}} k_{yA} \left(\frac{\kappa_{mV} M_V}{C_{P_{mV}} \rho_{mV} D_{AmV}} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (4-5)$$

y para el líquido:

$$h_L = C_{P_{mL}} k_{xA} \left(\frac{\kappa_{mL} M_L}{C_{P_{mL}} \rho_{mL} D_{AmL}^{\circ}} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (4-6)$$

en donde el subíndice A, se utiliza para identificar al soluto, m se refiere a la mezcla y M al peso molecular.

Anteriormente se compararon los valores obtenidos de los coeficientes volumétricos de transferencia de masa, ahora se establece la comparación entre los coeficientes volumétricos de transferencia de calor ($h_v a$) y ($h_c a$). Es de esperar una buena concordancia entre ambos métodos como se observa en la Tabla XV.

TABLA XV. Coeficiente Volumétrico de Transferencia de Calor.

SISTEMA	(h a), kcal • h ⁻¹ • m ³ • K ⁻¹		
	Onda	Shulman y coautores	Cornell y coautores (z = 10ft)
Gas:			
Acetona en aire	4064	3271	2564
Amoníaco en aire	4037	6235	2258
Etanol en aire	4088	3584	2528
Líquido:			
Acetona en agua	528054	818430	815741
Amoníaco en agua	485987	957132	803880
Etanol en agua	519901	770550	818526

CAPITULO

5

DISEÑO DE LA COLUMNA DE ABSORCION

DISEÑO DE LA COLUMNA DE ABSORCIÓN ADIABÁTICA

5 Introducción

Stockar y Wilke [5.1] propusieron un método riguroso para calcular torres de absorción. En el presente trabajo se sigue el esquema de Stockar y Wilke. Esencialmente el método consiste en efectuar balances de materia y energía en la interfase, en cada uno de los segmentos a lo largo de la torre. Sin embargo, el método tal cual como fue desarrollado por Stockar y Wilke tiene una limitación, —no permite calcular directamente la altura de torre necesaria para efectuar una determinada absorción— para ello, Stockar y Wilke estiman recuperaciones de soluto para diversos valores de alturas de torre, y por interpolación encuentran la altura de torre correcta.

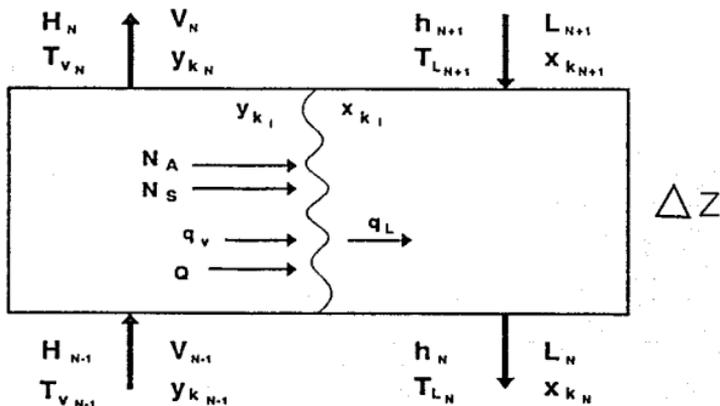
En el presente trabajo se propone un método para calcular la altura de torre en forma directa, sin necesidad de interpolaciones, que rinde la recuperación deseada. Para resolver simultáneamente las ecuaciones que representan los balances de materia y energía, esto es, para lograr que el método numérico converga, se hace uso de la técnica de Newton-Raphson multivariable. Al igual que Stockar y Wilke, se considera que la torre funciona adiabáticamente y que el empaque retiene un cierto volumen de líquido. Para contar con un algoritmo más preciso y de mayor generalidad se utiliza una ecuación de estado. Debe decirse que en el algoritmo se incluyeron los métodos probados que hacen más confiable y precisa la predicción de propiedades termodinámicas y de transporte. La disponibilidad de computadoras de alta velocidad hizo posible el manejo rápido de los algoritmos, que por razón natural se tornaron largos y complejos.

5.1 Esquema general del algoritmo

El método de cálculo se fundamenta en el trabajo desarrollado por Stockar y Wilke, con algunas modificaciones. En términos generales el método consiste en la aplicación recursiva de los siguientes pasos:

- Se divide la columna en segmentos empacados o elementos iguales de 0.1 m de altura.
- Se resuelven las ecuaciones de transferencia de materia y energía a través de la interfase en cada elemento utilizando composiciones y temperaturas promedio en el vapor y en el líquido.
- Para ello, se supone un perfil inicial constante de composición del líquido a lo largo de la columna, igual a la condición de alimentación del disolvente.
- Se inicia el cálculo en el segmento inferior y se asciende a lo largo de la columna. Se corrigen los perfiles característicos del vapor en base a los resultados de transporte de materia y energía que se efectúan en cada segmento.
- Se prosigue así hasta que la corriente de gas de salida alcance una composición igual o inferior a la estipulada en la especificación de diseño.
- Una vez que se logra lo anterior, se corrigen los perfiles de concentración y temperatura del líquido a lo largo de la columna. Para ello se efectúan nuevamente balances de materia y energía en cada segmento, pero con la salvedad de que ahora se inicia el cálculo en la parte superior de la columna, y de que se toma en cuenta el término de transición que corresponde al cambio de composición y temperatura en el inventario de líquido retenido en el empaque.
- Se repiten los cálculos anteriores hasta que las condiciones de concentración y temperatura a lo largo de la columna no sufran modificación.

BALANCE DE MATERIA Y ENERGÍA EN UN SEGMENTO



Balance de materia:

$$V_{N-1} - V_N = (N_A + N_S) a A \Delta z = L_N - L_{N+1}$$

$$y_{A_{N-1}} V_{N-1} - y_{A_N} V_N = N_A a A \Delta z = x_{A_N} L_N - x_{A_{N+1}} L_{N+1}$$

$$y_{S_{N-1}} V_{N-1} - y_{S_N} V_N = N_S a A \Delta z = x_{S_N} L_N - x_{S_{N+1}} L_{N+1}$$

Balance de energía:

$$H_{N-1} V_{N-1} - H_N V_N = (q_v + Q) a A \Delta z = q_L a A \Delta z = h_N L_N - h_{N+1} L_{N+1}$$

5.2 Descripción del método

Resolución de las ecuaciones de transporte de materia y energía en cada segmento

En la transferencia de masa, el flujo volumétrico de materia del soluto A y del disolvente S a través de la interfase en la dirección del vapor al líquido, se describe por:

$$(N_A)_a = \frac{(k_{y_A})_a}{t_A} \ln \frac{1 - y_{A_1} t_A}{1 - y_{A_2} t_A} = \frac{(k_{x_A})_a}{t_A} \ln \frac{1 - x_{A_1} t_A}{1 - x_{A_2} t_A} \quad (5-1)$$

$$(N_S)_a = \frac{(k_{y_S})_a}{t_S} \ln \frac{1 - y_{S_1} t_S}{1 - y_{S_2} t_S} = \left(\frac{t_A - 1}{t_A} \right) (k_{y_S})_a \ln \frac{1 - (1 - y_{S_1}) t_A}{1 - (1 - y_{S_2}) t_A} \quad (5-2)$$

en donde los flujos volumétricos $(N_A)_a$ y $(N_S)_a$, son función del coeficiente volumétrico de transferencia de masa y del gradiente de concentración existente entre la solución y la interfase. Las variables t_A y t_S se definen como:

$$t_A = \frac{N_A + N_S}{N_A} \quad ; \quad t_S = \frac{N_A + N_S}{N_S} \quad (5-3)$$

$$t_S = \frac{t_A}{t_A - 1}$$

En la transferencia de calor, el flujo de energía a través de la interfase se expresa por las ecuaciones:

$$(q_v a) = (h_v a) (T_v - T_f) \frac{1}{T_f} \quad (5-4)$$

$$(q_L a) = (h_L a) (T_f - T_L) \frac{1}{T_f} \quad (5-5)$$

$$\delta \quad (q_L a) = (q_v a) + (Q a) \quad (5-6)$$

en donde T_f es una función de los flujos como se advierte a continuación:

$$T_f = \frac{\theta^{Co} - 1}{Co} \quad (5-7)$$

$$Co = \frac{1}{(h_v a)} [C_{p_A} (N_A a) + C_{p_S} (N_S a)] \quad (5-8)$$

El calor que proviene de la evaporación del disolvente y de la solución del soluto se expresa como:

$$(Q a) = (N_A a) \lambda_A + (N_S a) \lambda_S \quad (5-9)$$

en donde λ_S es el calor de evaporación del disolvente y λ_A es el calor de solución del soluto considerando el calor de mezclado. λ , es igual a la entalpía molar parcial del vapor menos la entalpía molar parcial del líquido que se obtienen a partir de la ecuación (2-14), expresándose como,

$$\lambda_f = \Delta \bar{H}_f^V - \Delta \bar{H}_f^L$$

Cálculo de condiciones en la interfase de cada segmento

Las ecuaciones que se utilizan en el método de convergencia multivariable de Newton-Raphson para determinar las condiciones de la interfase en cada segmento son,

$$x_{B_i} = y_{B_i} \frac{\varphi_B^v}{\varphi_B^L}$$

$$x_{A_i} = y_{A_i} \frac{\varphi_A^v}{\varphi_A^L}$$

$$x_{S_i} = 1 - x_{A_i} - x_{B_i}$$

$$y_{S_i} = x_{S_i} \frac{\varphi_S^L}{\varphi_S^v}$$

$$y_{B_i} = 1 - y_{S_i} - y_{A_i}$$

en donde x_k y y_k corresponden a las composiciones promedio de las fases líquida y vapor en cada segmento y x_{k_i} y y_{k_i} son las composiciones en la interfase y φ_k^L y φ_k^v , los coeficientes de fugacidad para el líquido y el vapor, que se obtienen a partir de la ecuación (2-11).

Para que se cumpla la conservación de la materia y de la energía se debe satisfacer en el equilibrio,

$$(N_A a)_v = (N_A a)_L$$

Y

$$t_A (N_A a)_v = t_S (N_S a)_v = (N_A a)_v + (N_S a)_v$$

Con lo cual podemos definir las funciones error, que en el equilibrio son iguales a cero,

$$\psi_1 = (N_A a)_v - (N_A a)_L \quad (5-10)$$

$$\psi_2 = t_A (N_A a)_v - t_S (N_S a)_v \quad (5-11)$$

Las funciones ψ_1 y ψ_2 están en términos de las variables t_A y y_{A_1} . Para encontrar la solución es necesario utilizar el método de convergencia multivariable. En el libro del autor King [5.2] se explica a detalle la solución para una convergencia simultánea por el método de Newton-Raphson.

Para un problema de iteración con dos variables, el nuevo valor de y_{A_1} y t_A se encuentra mediante,

$$\Delta y_{A_1} = y_{A_1}^{(n+1)} - y_{A_1}^{(n)} = \frac{\psi_1 \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial t_A} \right) - \psi_2 \left(\frac{\partial \psi_1}{\partial t_A} \right)}{\left(\frac{\partial \psi_1}{\partial t_A} \right) \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial y_{A_1}} \right) - \left(\frac{\partial \psi_1}{\partial y_{A_1}} \right) \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial t_A} \right)} \quad (5-12)$$

$$\Delta t_A = t_A^{(n+1)} - t_A^{(n)} = \frac{\psi_1 \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial y_{A_1}} \right) - \psi_2 \left(\frac{\partial \psi_1}{\partial y_{A_1}} \right)}{\left(\frac{\partial \psi_1}{\partial y_{A_1}} \right) \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial t_A} \right) - \left(\frac{\partial \psi_1}{\partial t_A} \right) \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial y_{A_1}} \right)} \quad (5-13)$$

Las derivadas parciales de las funciones error con respecto a y_A y t_A son,

$$\left(\frac{\partial \psi_1}{\partial y_A} \right) = -t_A \left[\frac{(k_{y_A} a)}{1 - t_A y_A} + \frac{(k_{x_A} a)}{1 - t_A x_A} \frac{\varphi_A^v}{\varphi_A^L} \right] \quad (5-14)$$

$$\left(\frac{\partial \psi_1}{\partial t_A} \right) = - (k_{y_A} a) \left[\frac{y_{A_1}}{1 - t_A y_{A_1}} - \frac{y_A}{1 - t_A y_A} \right] - (k_{x_A} a) \left[\frac{x_{A_1}}{1 - t_A x_{A_1}} - \frac{x_A}{1 - t_A x_A} \right] \quad (5-15)$$

Se define

$$m = \frac{(k_{y_A} a)}{(k_{y_2} a)}$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial t_A} \right) = & -(1 - y_S) [1 - y_A t_A]^m - m y_A [1 - y_A t_A]^{(m-1)} [1 - t_A (1 - y_S)] \\ & + (1 - y_S) [1 - y_A t_A]^m + m y_A [1 - y_A t_A]^{(m-1)} [1 - t_A (1 - y_S)] \end{aligned} \quad (5-16)$$

$$\left(\frac{\partial \psi_2}{\partial y_A} \right) = -t_A \frac{\varphi_S^L}{\varphi_S^v} \frac{\varphi_A^v}{\varphi_A^L} [1 - y_A t_A]^m + t_A m [1 - y_A t_A]^{(m-1)} [1 - t_A (1 - y_S)] \quad (5-17)$$

Cuando Δy_A y Δt_A son cero, se encuentra la solución y se procede a calcular la temperatura de la interfase mediante el balance de calor dado por la ecuación (5-6),

$$(q_L a) = (q_v a) + (Q a)$$

sustituyendo el calor del líquido y del vapor expresados por las ecuaciones (5-4) y (5-5),

$$(h_v a) (T_v - T_i) \frac{1}{T_i} = (h_L a) (T_i - T_L) \frac{1}{T_i} + (Q a)$$

Como el coeficiente de transferencia de calor del lado del líquido es mucho mayor que el del vapor, podemos despreciar el término de corrección del lado del líquido T_f .

Finalmente, despejando la temperatura en la interfase se obtiene,

$$T_i = \frac{T_v + \left(\frac{h_L a}{h_v a} \right) T_L T_i + \left(\frac{Q a}{h_v a} \right) T_i}{1 + \left(\frac{h_L a}{h_v a} \right) T_i} \quad (5-18)$$

Al igual que en el caso de las composiciones, los valores de T_L y T_v utilizados corresponden a los valores promedio de la temperatura de líquido y vapor en cada segmento, calculados con los datos de la última iteración. Este procedimiento se repite en cada elemento hasta obtener las composiciones del lado del líquido y del lado del vapor y la temperatura en la interfase.

Cálculo ascendente de los perfiles de flujo, composición y temperatura de la fase gaseosa

Conocidos los flujos de la transferencia de masa y calor, los balances de masa y

energía son usados para calcular la composición y la temperatura de la corriente de vapor a la salida del elemento, dados por las siguientes expresiones:

$$V_N = V_{N-1} - (N_A + N_S) a A \Delta z \quad (5-19)$$

$$y_N V_N = y_{N-1} V_{N-1} - (N_j a) A \Delta z \quad (5-20)$$

$$H_{V_N} V_N = H_{V_{N-1}} V_{N-1} - [(q_v a) + (Q a)] A \Delta z \quad (5-21)$$

Una vez obtenida la entalpía de la corriente de vapor a la salida del segmento, la temperatura $T_{V_N}^{(n)}$ se obtiene por medio de un cálculo iterativo donde el valor inicial está dado por:

$$T_{V_N} = T_{V_{N-1}} + \frac{H_{V_N}^{(ba)} - H_{V_{N-1}}^{(n)}}{C_{P_V}} \quad (5-22)$$

y los valores subsiguientes por:

$$T_{V_N}^{(n+1)} = T_{V_N}^{(n)} + \frac{H_{V_N}^{(ba)} - H_{V_N}^{(n)}}{C_{P_V}} \quad (5-23)$$

donde $H_V^{(ba)}$ es el valor obtenido del balance de entalpía y $H_V^{(n)}$ es el valor de la entalpía a la temperatura supuesta, calculado a través de la ecuación (2-14).

Los cálculos descritos anteriormente se repiten segmento a segmento, iniciando en la parte inferior de la columna y avanzando hacia la parte superior hasta obtener la composición de salida del gas que se haya especificado como dato de diseño.

Cálculo descendente de los perfiles de flujo, composición y temperatura de la fase líquido

Una vez alcanzada la composición del gas de salida, se corrigen los perfiles de temperatura y composición del líquido supuestos inicialmente, utilizando los balances de masa y calor en cada elemento, considerando que la columna opera en estado no estacionario, procediendo ahora de lo alto de la columna hacia abajo. El perfil del líquido inicialmente supuesto corresponde al del disolvente alimentado. Ya que no puede haber variación en el inventario total de líquido, el balance total de materia corresponde a:

$$L_N = L_{N+1} + (N_A + N_S) a A \Delta z \quad (5-24)$$

Del balance de materia por componente se obtiene la composición de salida para cada elemento por la siguiente expresión:

$$\frac{U_N}{\Delta \theta} (x_{iN} - x_{iN}^*) + L_N x_{iN} = L_{N+1} x_{iN+1} + (N_j a) A \Delta z$$

donde el término $U_N/\Delta\theta$ es el líquido retenido en el empaque por tiempo de residencia, el cual, de iteración en iteración permite llegar a un estado estacionario en el diseño de la torre.

Sumando y restando $L_N x_{iN}^*$ se llega a la siguiente expresión,

$$(x_{iN} - x_{iN}^*) \left(1 + \frac{U_N}{L_N \Delta \theta} \right) L_N + L_N x_{iN}^* = L_{N+1} x_{iN+1} + (N_j a) A \Delta z$$

donde H se define como la fracción de líquido retenido,

$$H = \frac{U_N}{L_N \Delta \theta}$$

y X_{N-1}^* como la composición de la iteración anterior. Al despejar la X_N , se obtiene,

$$x_{i,N} = x_{i,N}^* + \frac{(N_j a) A \Delta z + L_{N+1} x_{i,N+1} - L_N x_{i,N}^*}{(1+H) L_N} \quad (5-25)$$

El balance de calor corresponde a:

$$\frac{U_N}{\Delta \theta} (h_N - h_N^*) = Q_{L_N} + L_{N+1} h_{N+1} + L_N h_N$$

en donde

$$Q_{L_N} = (q_{L_N} a) A \Delta z$$

pasando el término $L_N h_N$ del otro lado de la igualdad, y restando $L_N h_N^*$ de ambos lados:

$$(h_N - h_N^*) \left(1 + \frac{U_N}{L_N \Delta \theta} \right) L_N = Q_{L_N} + L_{N+1} h_{N+1} - L_{N+1} h_{N+1}^*$$

definiendo como antes la H como la fracción de líquido retenido, y despejando h_N :

$$h_N = h_N^* + \frac{Q_{L_N} + L_{N+1} h_{N+1} - L_{N+1} h_{N+1}^*}{(1+H) L_N} \quad (5-26)$$

y el nuevo valor de la temperatura de salida se calcula a partir de,

$$T_{L_N} = T_{L_N}^* + \frac{h_N - h_N^*}{C_{P_L}}$$

en donde h_N^* y $T_{L_N}^*$ son los valores de entalpia y temperatura de la fase líquido correspondiente a la iteración anterior.

Estimación del líquido total retenido en el empaque.

El líquido total retenido por el empaque H , es incorporado en las ecuaciones de transferencia de masa y de calor del lado del líquido. Se expresa en m^3 de líquido por m^3 de empaque. Este valor es estimado utilizando el método propuesto por Shulman y coautores [5.3], para sistemas acuosos y no acuosos. H es igual a:

$$H = H_s + H_o \quad (5-27)$$

en donde H_s es el líquido retenido de forma estática cuando la torre se pone fuera de funcionamiento, mientras H_o corresponde al líquido adicional retenido durante la operación de la torre.

El líquido adicional retenido de forma estática, H_s , esta dado por,

$$H_s = c \eta^m \left(\frac{1}{\rho} \right)^{0.37} \sigma^n \quad (5-28)$$

El líquido adicional retenido durante la operación, H_o es igual a,

$$H_o = a G_L^{0.57} \eta^b \left(\frac{1}{\rho} \right)^{0.84} \left(\frac{\sigma}{73} \right)^{d - 0.262 \log G_L} \quad (5-29)$$

donde G_L , es la masa velocidad del líquido, la viscosidad η en centipoise, la densidad ρ en $g \cdot ml^{-1}$ y la tensión superficial σ en $dina \cdot cm^{-1}$.

En la Tabla XVI y XVII se encuentran las constantes que sugieren Shulman y colaboradores.

TABLA XVI. Constantes de H_a para cada tipo de empaque de 0.025 m.

EMPAQUE	c	m	n
Anillos Raschig de acero	0.01850	0.02	0.23
Anillos Raschig de porcelana	0.00020	0.02	0.99
Sillas Berl de porcelana	0.00119	0.04	0.55

TABLA XVII. Constantes de H_a para cada tipo de empaque de 0.025 m.

EMPAQUE	a	b	d
Anillos Raschig			
Para $\eta < 12$ cp	0.00039	0.13	0.925
Para $\eta > 12$ cp	0.00025	0.31	0.925
Sillas Berl			
Para $\eta < 20$ cp	0.00043	0.13	1.033
Para $\eta > 20$ cp	0.00025	0.31	1.033

El cálculo se repite hasta lograr la convergencia. En este método la altura de la columna no se fija de antemano, sino, como se mencionó anteriormente, es la que resulta en el cálculo ascendente para lograr la especificación de la composición del gas de salida. Este valor es gradualmente corregido al mismo tiempo que los perfiles de temperatura y composición. En cada iteración no se requiere por tanto simular diversas columnas con diferentes alturas para después obtener por interpolación la correspondiente a la temperatura de gas de salida especificada, por lo que el método de cálculo aquí desarrollado resulta más eficiente que el originalmente propuesto por Stockar y Wilke.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

RESULTADOS

En la práctica de la profesión se presentan infinidad de condiciones de diseño de una torre de absorción. El programa aquí expuesto tiene la suficiente flexibilidad para aceptar condiciones variadas de diseño, dentro de límites muy amplios, para cualquier sistema, siempre y cuando sus propiedades físicas sean conocidas, y para torres con diferente tipo de empaque, cuyas características estén definidas. Ahora bien, en virtud de que también las condiciones de operación fluctúan a menudo, es conveniente dar un cierto margen de diseño y para ello es recomendable realizar un análisis de sensibilidad a variaciones en algunos de los parámetros, esto es, aquí se contestarán preguntas clásicas del tipo: ¿Qué sucede si en lugar de alimentar el gas a 20°C, se alimenta a 35 o a 52°C? ¿Como se afecta el funcionamiento de la torre si en lugar de sillas Berl se emplean anillos Raschig? Conocer la sensibilidad a fluctuaciones en los parámetros de diseño permite también que el operador preste especial atención a aquellas variables que más afectan el desempeño de la torre, o bien a contrarrestar la variación de unas con el control de otras. El análisis de sensibilidad de una torre es una herramienta poderosa en el diseño y operación de una torre, y es por ello que se le concede especial atención en este trabajo.

Para ejemplificar los análisis de sensibilidad, se escoge como punto de partida el problema descrito por Treybal en el Capítulo Octavo de su texto [4.2], problema que a continuación se relata:

"Se lava un gas que contiene 41.6% de un soluto A en mezcla con 58.4% de aire, con el propósito de absorber el 99% del soluto en la columna de absorción. El gas se alimenta a razón de 122.04 kmol•h⁻¹ a 20°C y 1 atm. A contracorriente se inyecta agua a razón de 975.6 kmol•h⁻¹ a 20°C. El absorbedor, que se trabaja adiabáticamente, está empacado con sillas Berl de porcelana de 38 mm. El flujo de operación del líquido corresponde al 70% del flujo de inundación de la torre".

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

COMPARACIÓN DE RESULTADOS.

Antes de iniciar el análisis de sensibilidad, conviene ratificar la bondad del método aquí empleado, para lo cual se compararán los resultados con los que informa Treybal. En la tabla siguiente se establece dicha comparación:

	<i>Treybal</i>	<i>Tesis</i>
<i>Altura</i>	<i>1.58 m</i>	<i>1.40 m</i>
<i>Temperatura de salida del gas</i>	<i>23.05°C</i>	<i>22.04°C</i>
<i>Temperatura de salida del líquido</i>	<i>42.70°C</i>	<i>37.17°C</i>

De la tabla se infiere que el método aquí desarrollado rinde resultados semejantes a los de Treybal. Las pequeñas diferencias existentes entre ambos métodos de cálculo se adscriben a que Treybal utiliza el método de Shulman para calcular los coeficientes de transferencia de masa, mientras que en esta tesis se emplea el método de Onda. El método de Onda es un método generalizado, mientras que el de Shulman se restringe a anillos de Raschig y sillas de Berl.

SENSIBILIDAD A LA NATURALEZA DEL SOLUTO.

De acuerdo al enunciado del problema, se utiliza el algoritmo aquí desarrollado para calcular la altura y el diámetro de la columna de absorción para satisfacer las restricciones que impone el problema, pero se extiende el trabajo para incluir los siguientes sistemas:

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Amoniaco-Aire-Agua

Etanol-Aire-Agua

Acetona-Aire-Agua

donde el primer componente de cada mezcla es el soluto a separar por absorción. Los resultados generales del cálculo se consignan en la figura 5.1, donde los principales parámetros se comparan entre sí.

De manera similar, y con el objeto de ilustrar las condiciones de operación de la torre, al variar la naturaleza del soluto, se incluyen las gráficas 5.1 a la 5.6, las tres primeras muestran el perfil de temperatura a lo largo de la torre, y las segundas tres ejemplifican las líneas de operación y de equilibrio para cada uno de los sistemas.

SENSIBILIDAD A LA TEMPERATURA DE ALIMENTACION DEL VAPOR.

Con el propósito de conocer como se afecta el diseño de una torre al modificar la temperatura de alimentación del vapor, se resuelve el mismo problema enunciado con anterioridad, pero ahora se efectúan estimaciones adicionales al suponer que el gas se alimenta a una temperatura que incide en el intervalo de 0 a 100°C. De la gráfica se infiere con claridad, que la altura de la torre disminuye al aumentar la temperatura del vapor de alimentación. Esto es, a mayor temperatura se absorbe una mayor cantidad de soluto por segmento de torre. En la gráfica 5.7 se ilustra el comportamiento anteriormente descrito para el sistema amoniaco-agua.

SENSIBILIDAD A LA RELACION DE FLUJO LIQUIDO/VAPOR.

La altura de una torre de absorción queda influida por la relación que guardan, a lo

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

largo de la torre, los flujos a contracorriente del líquido y vapor (relación L/V). En este caso particular, y como consecuencia de la presión de vapor elevada que ejerce el amoníaco en soluciones concentradas, la altura de la torre se torna asintótica cuando la relación L/V se acerca a 4. Por otra parte, se observa que al incrementar la relación L/V , por debajo del flujo de inundación, disminuye la altura de torre requerida para efectuar la absorción.

SENSIBILIDAD A LA FRACCIÓN MOLAR DEL SOLUTO.

La fracción molar de soluto que se alimenta en la corriente de vapor en la torre de absorción, afecta principalmente la altura requerida de torre y la temperatura de salida del líquido. Los resultados obtenidos para diferentes valores de fracción molar de soluto en la alimentación, indican que en el caso particular del amoníaco, manteniendo constante la fracción mol de amoníaco en la salida de la corriente gaseosa, la altura de la torre aumenta con la concentración de soluto hasta un punto máximo donde empieza a decrecer. Por otro lado, la temperatura del líquido a la salida de la torre aumenta casi de forma directa al incrementarse la fracción molar de amoníaco en la alimentación.

SENSIBILIDAD AL DIÁMETRO DEL EMPAQUE.

El empaque que se utiliza en la torre, para incrementar la superficie de contacto entre líquido y vapor, es otra variable clave en el diseño de una columna de absorción, misma que no debe pasar desapercibida. El diámetro y el tipo de empaque modifican principalmente, entre otras parámetros, la altura de la torre y la caída de presión a lo largo de la torre. En la gráfica 5.10 se ilustra como la altura y la caída de presión se alteran al emplear diferentes tamaños de empaque tipo sillas de Berl de porcelana. Para el sistema amoníaco-agua, la altura y la caída de presión aumentan al incrementar el diámetro de las sillas Berl de porcelana.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Para el sistema amoníaco-agua, la altura y la caída de presión aumentan al incrementar el diámetro de las sillas Berl de porcelana.

SENSIBILIDAD AL DISEÑO DEL EMPAQUE.

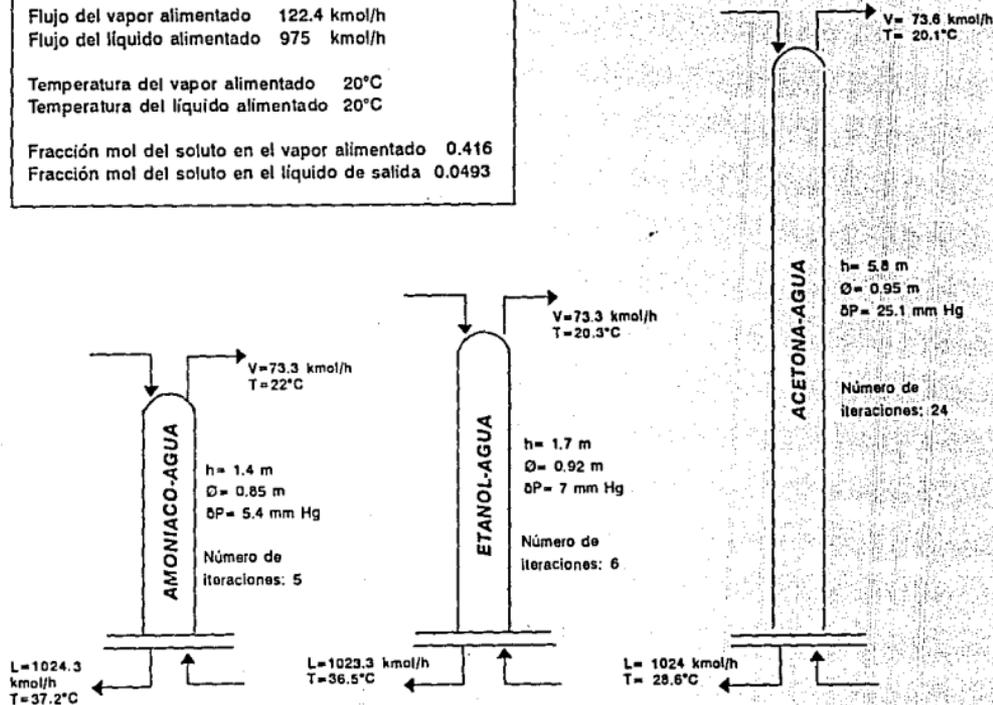
Es conveniente hacer una comparación entre los diferentes diseños de empaque, así como del material de que están conformados, para seleccionar en un momento dado el más adecuado en la construcción de la torre de absorción. En las gráficas 5.11 y 5.12 se ilustra el efecto que tienen en la altura de la torre y en la caída de presión, los diversos diseños de empaque, de los que se dispone de información completa respecto a sus características físicas. Conviene hacer notar que para un mismo empaque, independientemente de su naturaleza física, la altura de la torre aumenta con el diámetro del empaque. Al comparar entre sí, los diferentes diseños de empaque de un mismo diámetro, se observa que en general, los anillos Raschig de porcelana son los más eficientes y por lo tanto requieren de una menor altura de torre, mientras que al utilizar sillas Intalox de PVC, se requiere la mayor altura de torre.

FIGURA 5.1 EFECTO DE LA NATURALEZA DEL SOLUTO

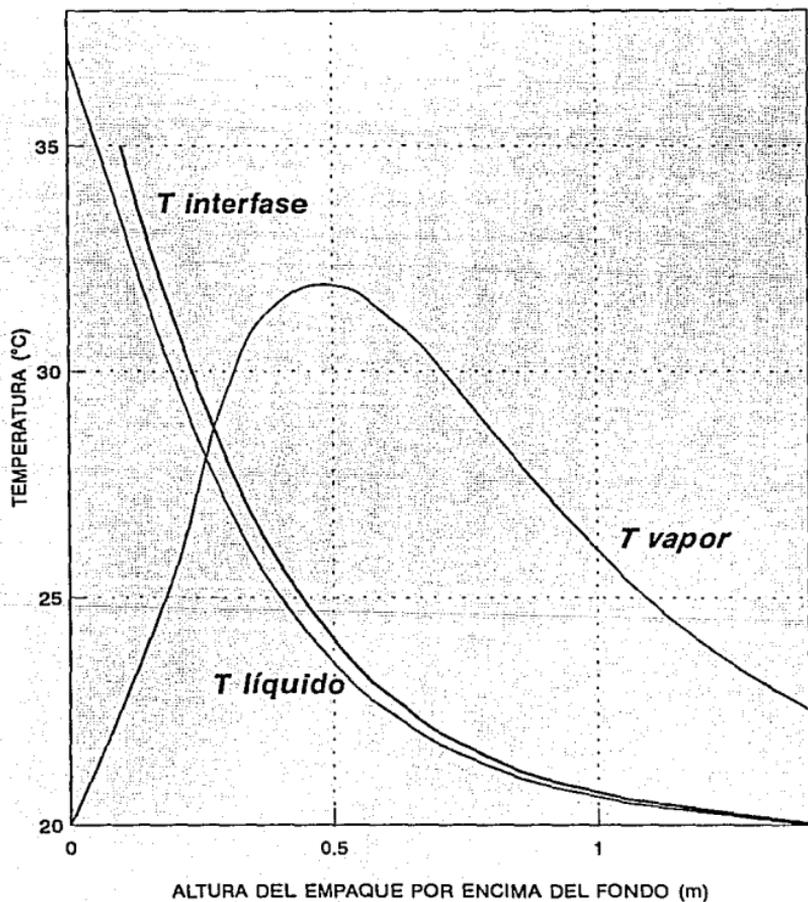
Flujo del vapor alimentado 122.4 kmol/h
 Flujo del líquido alimentado 975 kmol/h

Temperatura del vapor alimentado 20°C
 Temperatura del líquido alimentado 20°C

Fracción mol del soluto en el vapor alimentado 0.416
 Fracción mol del soluto en el líquido de salida 0.0493

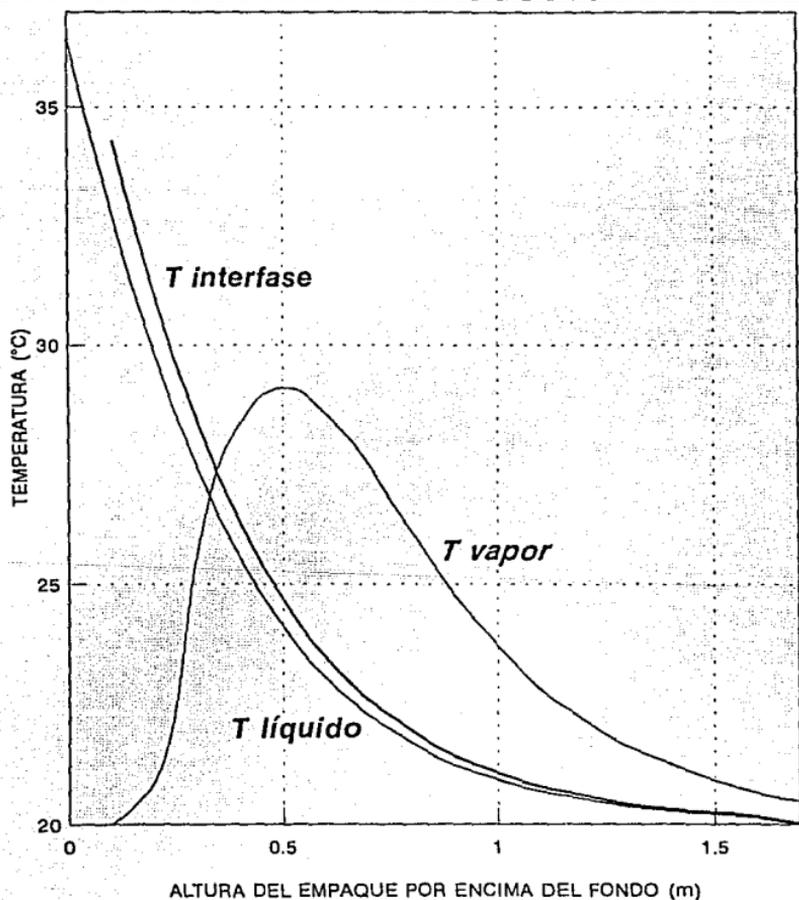


PERFIL DE TEMPERATURA PARA LA ABSORCION DE AMONIACO EN AGUA



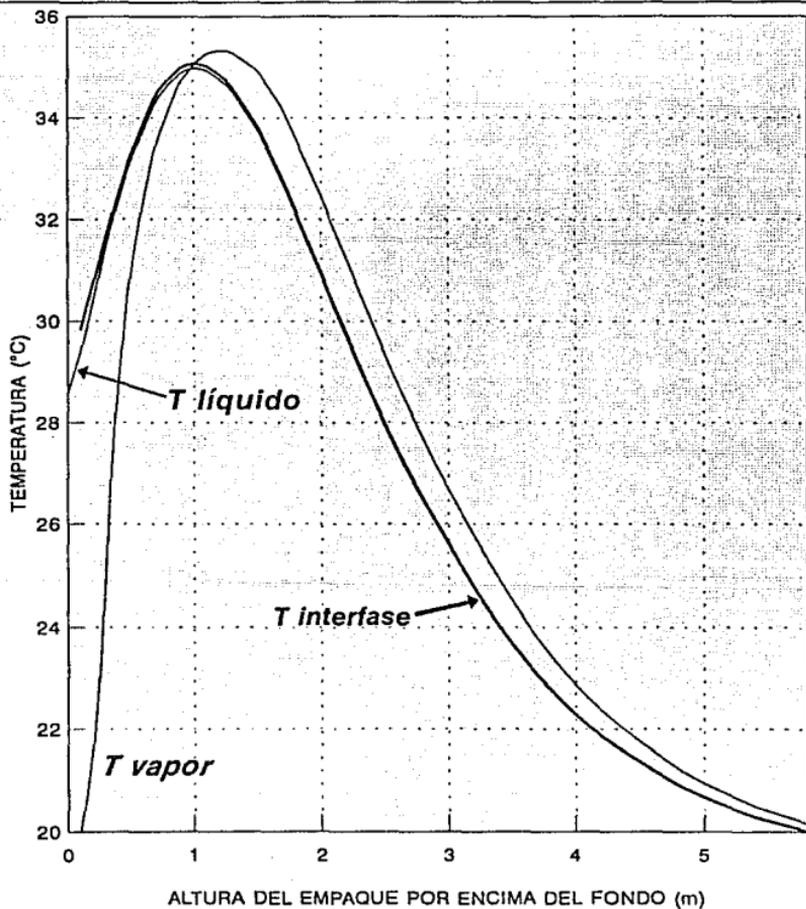
GRAFICA 5.1

PERFIL DE TEMPERATURA PARA LA ABSORCION DE ETANOL EN AGUA



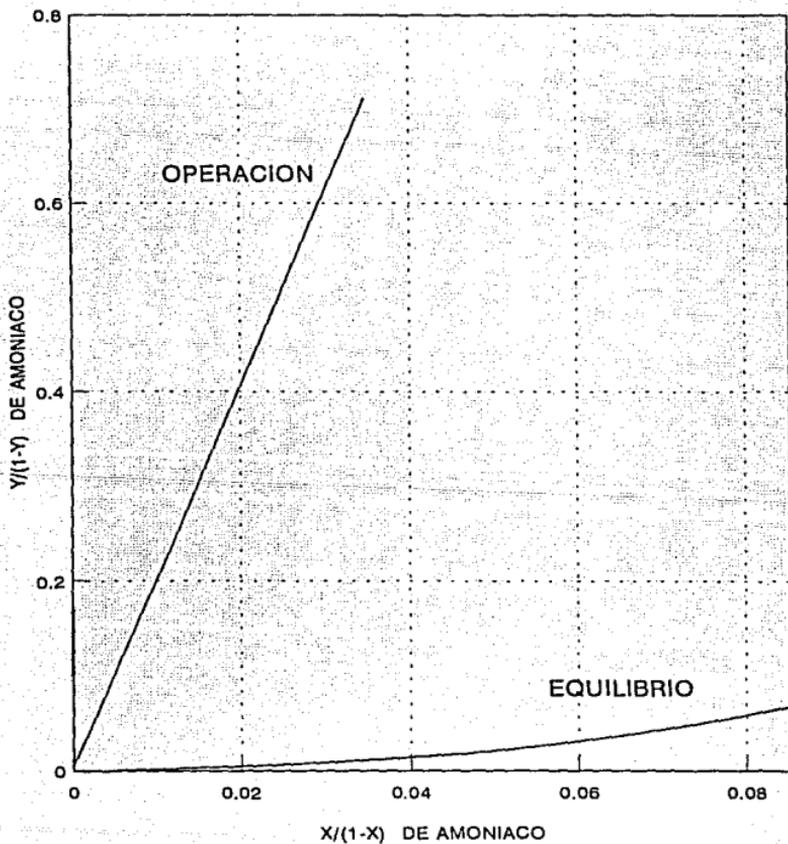
GRAFICA 5.2

PERFIL DE TEMPERATURA PARA LA ABSORCION DE ACETONA EN AGUA



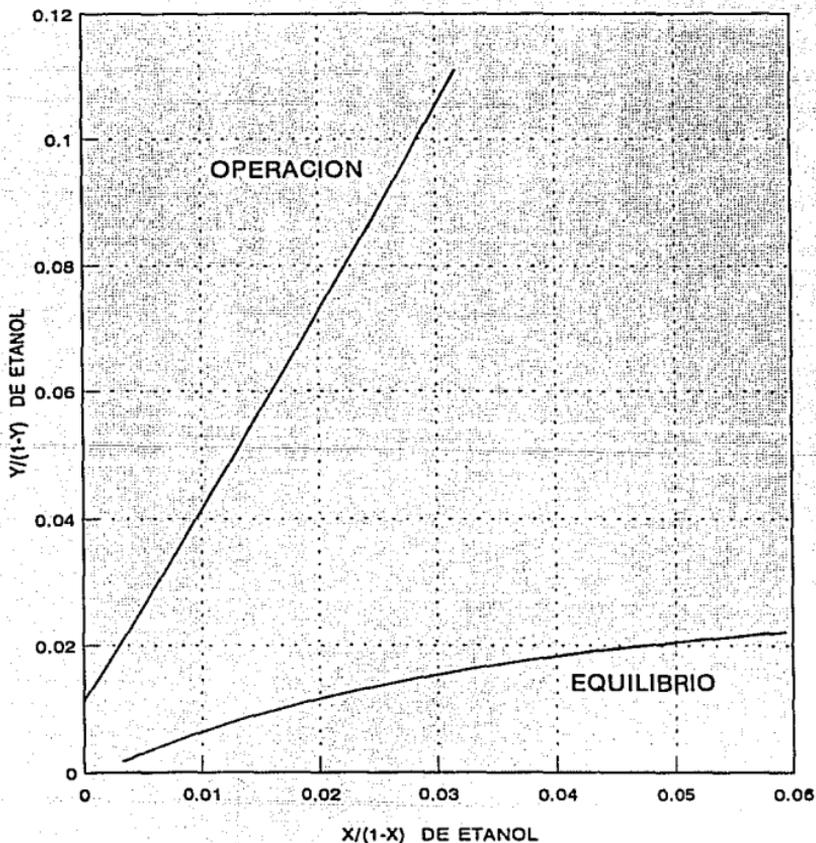
GRAFICA 5.3

LINEA DE EQUILIBRIO Y CURVA DE OPERACION DEL SISTEMA AMONIACO-AGUA



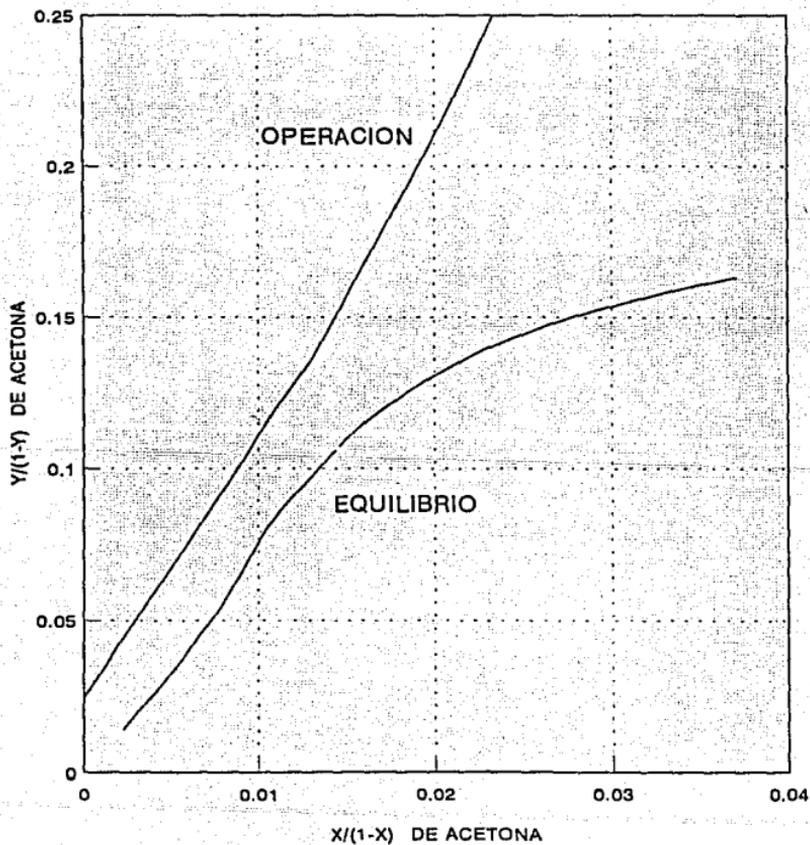
GRAFICA 5.4

LINEA DE EQUILIBRIO Y CURVA DE OPERACION DEL SISTEMA ETANOL-AGUA



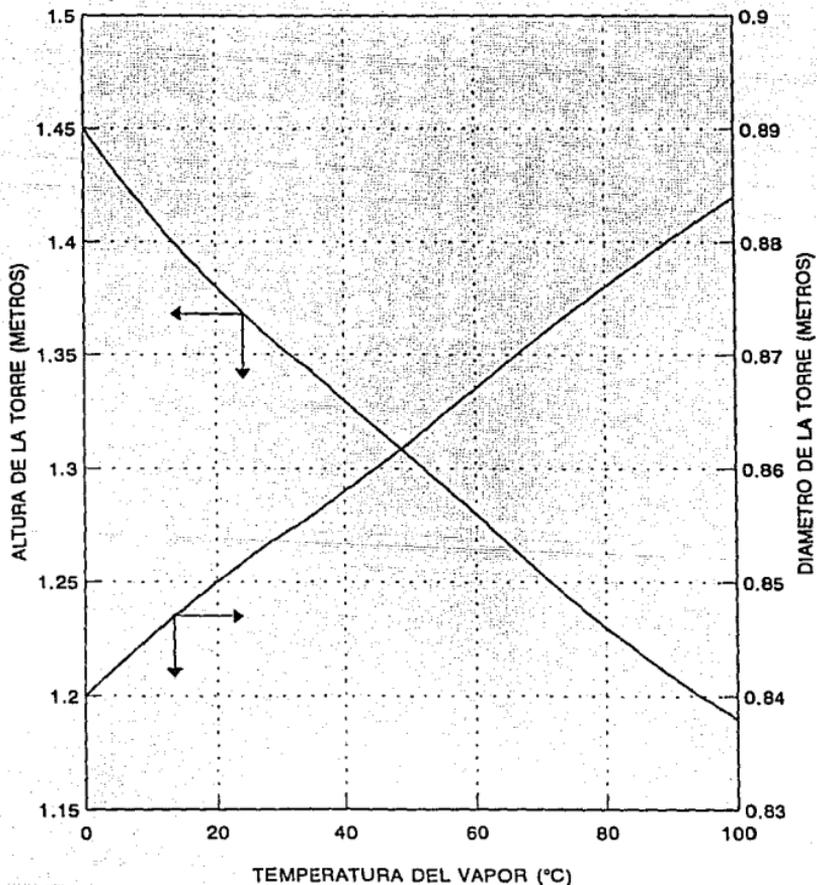
GRAFICA 5.5

LINEA DE EQUILIBRIO Y CURVA DE OPERACION DEL SISTEMA ACETONA-AGUA



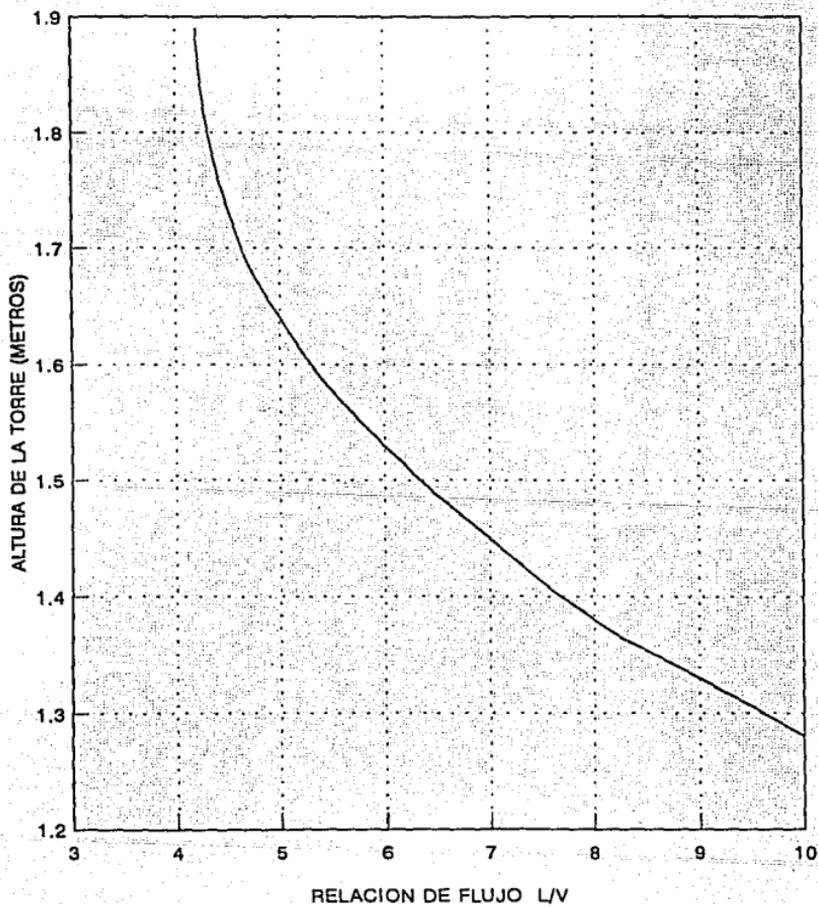
GRAFICA 5.6

EFFECTO DE LA TEMPERATURA DEL VAPOR ALIMENTADO EN LA ALTURA Y EL DIAMETRO



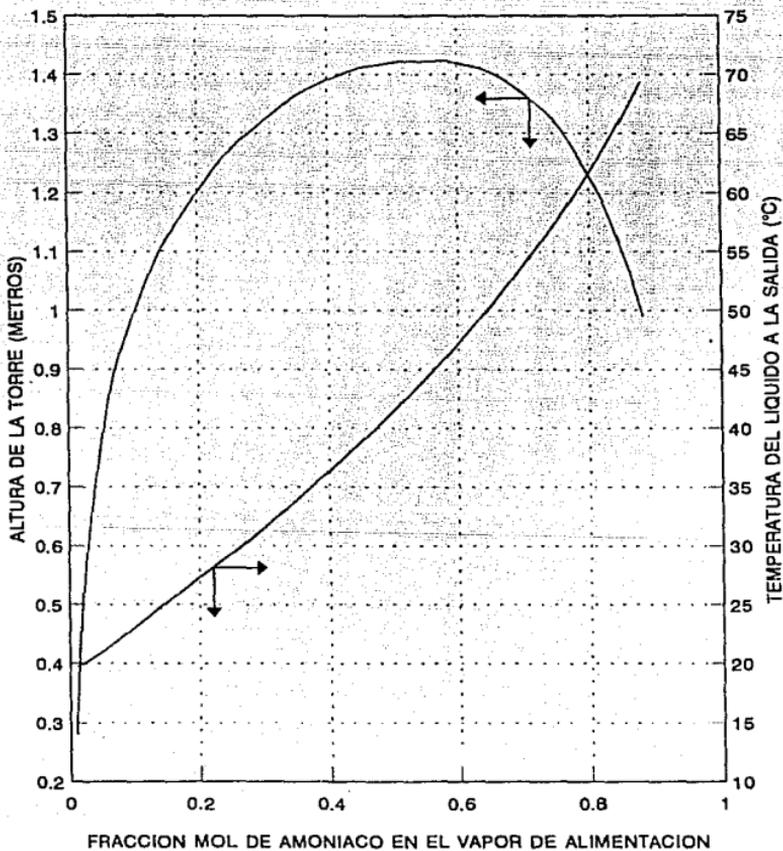
SISTEMA AMONIACO-AGUA
GRAFICA 5.7

EFFECTO DE LA RELACION L/V EN LA ALTURA SISTEMA AMONIACO-AGUA



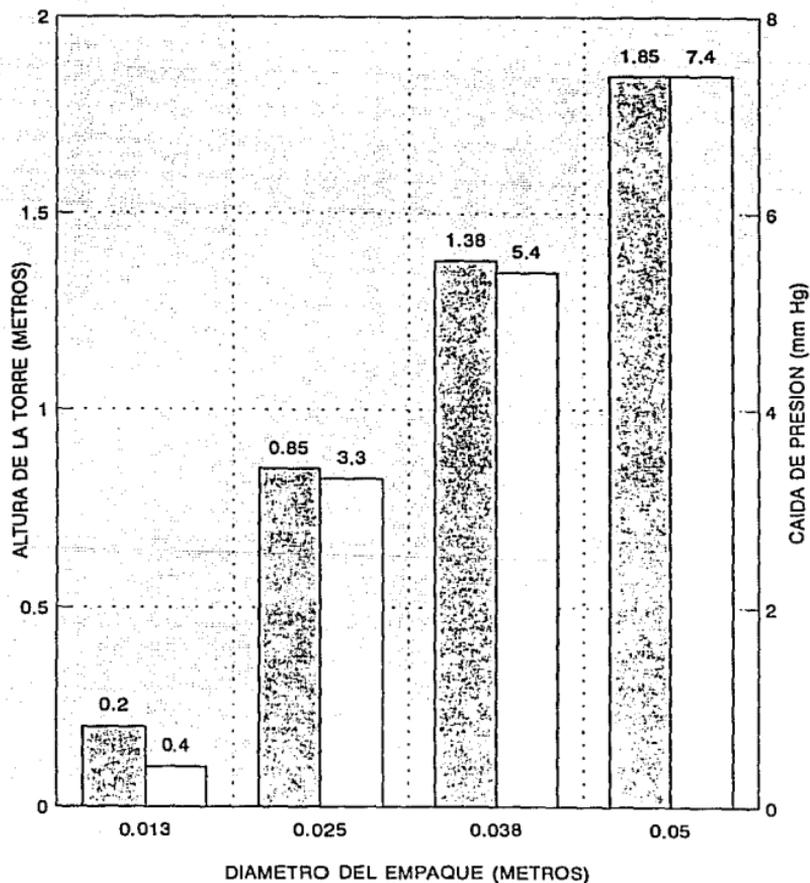
GRAFICA 5.8

EFFECTO DE LA FRACCION MOLAR EN LA ALTURA Y TEMPERATURA



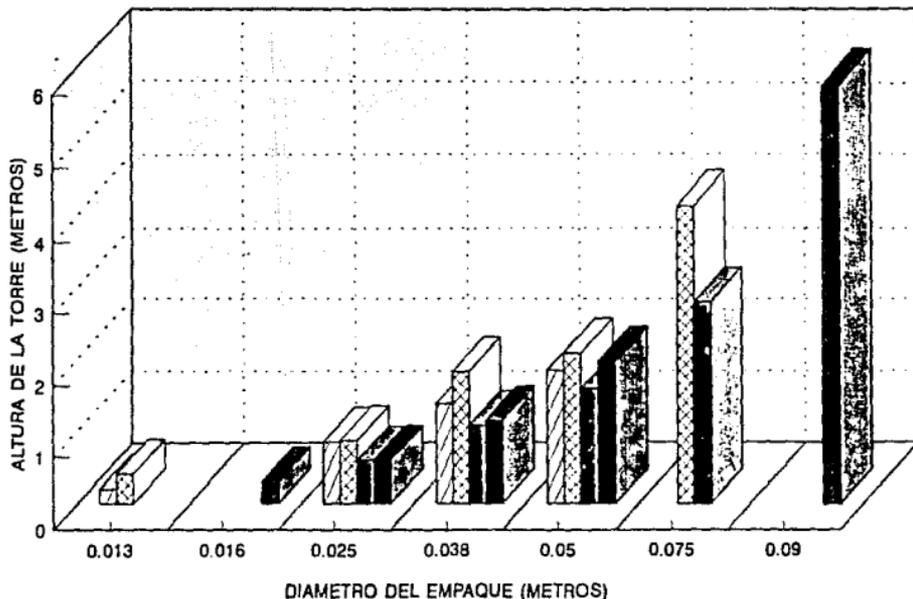
SISTEMA AMONIACO-AGUA
GRAFICA 5.9

EFFECTO DEL TAMAÑO DE EMPAQUE EN LA ALTURA Y EN LA CAIDA DE PRESION PARA EL SISTEMA AMONIACO-AGUA



SILLAS BERL DE CERAMICA
GRAFICA 5.10

EFECTO DEL TIPO DE EMPAQUE Y DIAMETRO EN LA ALTURA PARA EL SISTEMA AMONIACO-AGUA



TIPO DE EMPAQUE

SILLA BERL PORCELANA

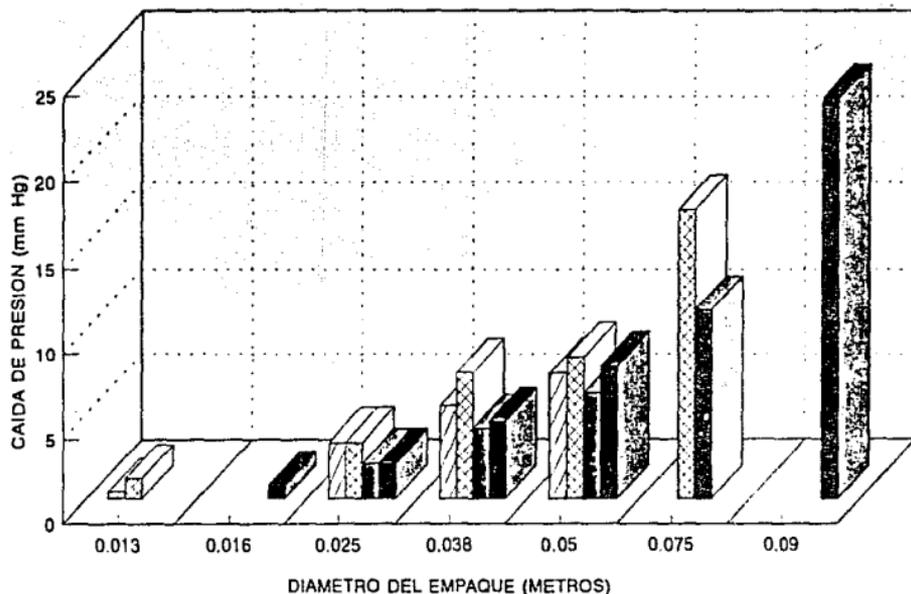
 SILLA INTALOX PORCEL

 ANILLO RASCHIG PORCEL

 ANILLO PALL ACERO

GRAFICA 5.11

EFFECTO DEL TIPO DE EMPAQUE Y DIAMETRO EN LA CAIDA DE PRESION PARA EL SISTEMA AMONIACO-AGUA



TIPO DE EMPAQUE

SILLA BERL PORCELANA
 ANILLO RASCHIG PORCEL
 ANILLO PALL ACERO

GRAFICA 5.12

RESULTADOS Y CONCLUSIONES**CONCLUSIONES**

En el presente trabajo se describe un algoritmo para dimensionar torres de absorción, que contiene las siguientes contribuciones:

- Se incorpora una ecuación de estado de reciente desarrollo para conocer con mayor precisión las condiciones en la interfase. Esta ecuación de estado permite predecir propiedades termodinámicas tales como la fugacidad y la entalpia.
- Se desarrolla un método de convergencia que es indispensable para resolver las ecuaciones simultáneas que resultan de los balances de materia y de energía que se efectúan a través de la interfase, en cada elemento de la torre.
- Se puede calcular indistintamente la altura de la torre o la recuperación del soluto.
- Se calcula directamente la altura de la torre, a diferencia de métodos anteriores que partían de supuestas alturas, para encontrar por interpolación aquella que rendía la recuperación deseada.
- Se desarrolla un nuevo método analítico que permite estimar la velocidad de inundación y la caída de presión. Se integra el algoritmo que se desarrolló para estimar la caída de presión, al algoritmo general utilizado en el cálculo de la altura de la torre.

INDICE DE TABLAS

INDICE DE TABLAS

TABLA	CAPITULO 1.	PAGINA
I	Comparación de los valores calculados y experimentales de viscosidad de un gas a baja presión.	10
II	Momento dipolar, parámetro polar, parámetro de energía y diámetro molecular.	13
III	Comparación entre los valores calculados y experimentales de viscosidad de mezclas gaseosas a presión atmosférica.	14
IV	Comparación de los valores calculados y experimentales de viscosidad de líquidos a $T_r < 0.75$.	16
V	Parámetros requeridos en el cálculo de viscosidad de líquidos a temperatura reducida $T_r \leq 0.75$.	17
VI	Comparación entre los valores calculados y experimentales de coeficientes de difusión de gases puros.	21
VII	Comparación entre los valores calculados y experimentales de tensión superficial de líquidos puros.	25
VIII	Constantes que se utilizan en la ecuación de conductividad térmica de líquidos y gases.	28
IX	Constantes que se utilizan en el cálculo de la capacidad calorífica de líquidos y gases.	30
	CAPITULO 2	
X	Constantes físicas de compuestos y mezclas.	36
XI	Constantes de parámetros binarios.	38
	CAPITULO 4	
XII	Tensión superficial crítica para empaques.	61
XIII	Coefficiente Volumétrico de Transferencia de Masa para el gas.	63
XIV	Coefficiente Volumétrico de Transferencia de Masa para el líquido.	63
XV	Coefficiente Volumétrico de Transferencia de Calor.	65

REFERENCIAS

REFERENCIAS

Capítulo 1

- 1.1.- Reid R. C., Prausnitz J. M., and Sherwood T. K. *The Properties of Gases and Liquids*; McGraw Hill: New York, 1977; 3rd ed.
- 1.2.- Golubev, I. F., Viscosity of Gases and Gas Mixtures, *A Handbook, Natl. Tech. Inf. Serv. TT 70, 50022, 1959.*
- 1.3.- Reichenberg, D.; (a) *DCS Rep. II, National Physical Laboratory, Teddington, England, August 1971*; (b) *AIChE J.*, 19, 854, 1973; (c) 21, 181, 1975.
- 1.4.- Flynn, L. W., and G. Thodos; (a) *J. Chem. Eng. Data*, 6, 457, 1961; (b) Mathur, G. P., and G. Thodos, *AIChE J.*, 9, 596, 1963; (c) Stiel, L. I., and G. Thodos, *AIChE J.*, 7, 611, 1961, 8, 229, 1962, 10, 266, 1964.
- 1.5.- Wilke, C. R., *J. Chem. Phys.*, 18, 517, 1950.
- 1.6.- Brokaw, R. S.; (a) *NASA Tech. Note D-4496, April 1968*; (b) *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 8, 240, 1969.
- 1.7.- Orrick, C., and J.H. Erbar; comunicación personal con Reid, Sherwood y Prausnitz en diciembre de 1974.
- 1.8.- Thomas, L. H., *J. Chem. Soc.*, 573, 1946.
- 1.9.- Morris, P. S., M. S. thesis, *Polytechnic Institute of Brooklyn, Brooklyn, N. Y.*, 1964.
- 1.10.- Makhija, R. C., and R. A. Stairs, *Can. J. Chem. Fundam.*, 8, 701, 1969.
- 1.11.- van Velzen, D., R. L. Cardozo, and H. Langenkamp; (a) *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 11, 20, 1972; (b) *Liquid Viscosity and Chemical Constitution of Organic Compounds, A New Correlation and a Compilation of Literature Data, Euratom 4735e, Joint Nuclear Research Centre, Ispra Establishment, Italy, 1972.*
- 1.12.- Brokaw, R. S., *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 8, 240, 1969.
- 1.13.- Fuller, E. N., and J. C. Giddings, *J. Gas Chromatogr.*, 3, 222, 1965.
- 1.14.- Wilke, C. R., and P. Chang, *AIChE J.*, 1, 264, 1955.
- 1.15.- Tyn, M. T., and W. F. Calus, *Processing*, 21 (4), 16, 1975.
- 1.16.- Olander, D. R., *AIChE J.* 7, 175, 1961.
- 1.17.- Perkins, L. R., and C. J. Geankoplis, *Chem. Eng. Sci.*, 24, 1035, 1969.
- 1.18.- Garfias y Ayala, F. J., *J. Phys. Chem.*, 84, 2297, 1980; 75(7), 3617, 1981.
- 1.19.- Hakim, D. I., D. Steinberg, and L. I. Stiel, *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 10, 174, 1971.
- 1.20.- Halm, R. L., and L. I. Stiel, *AIChE J.*, 16, 3, 1970; 17, 259, 1971.
- 1.21.- Macleod, D. B., *Trans. Faraday Soc.*, 19, 38, 1923.

- 1.22.- Sugden, S., *J. Chem. Soc.*, 32 y 1177, 1924.
- 1.23.- Weast, Robert C., *Handbook of Chemistry and Physics*, 55th Edition, CRC Press Published.
- 1.24.- Perry y Chilton, *Manual del Ingeniero Químico*, 5a edición, McGraw-Hill.

Capítulo 2

- 2.1.- O. Redlich y J.N.S. Kwong, *Chem. Rev.*, 44, 233(1949).
- 2.2.- K.K. Shah y G. Thodos, *Ind. Eng. Chem.*, 57(3), 30(1965).
- 2.3.- G. Soave, *Chem. Eng. Sci.*, 27, 1197(1972).
- 2.4.- D.Y. Peng y D.B. Robinson, *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 15, 59(1976).
- 2.5.- R. Stryjek y J.H. Vera, *Can. J. Chem. Eng.*, 64, 323, 334(1986).
- 2.6.- R. Sandoval, comunicación personal.
- 2.7.- P.M. Mathias, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 22, 385(1983).
- 2.8.- DECHEMA
- 2.9.- P.M. Mathias, J.F. Boston y S. Watanasiri, *AIChE Journal*, 30, 182(1984).
- 2.10.- Romero A., Molina E., *Tesis*; Notas del Dr. Enrique Bazúa Rueda.
- 2.11.- DECHEMA, Vol. 6, Knap.

Capítulo 3

- 3.1.- Zenz, F. A., 1953, *Chem. Eng.*, 60(7), 176.
- 3.2.- Leva, M., 1954, *Chem. Eng. Progr. Symp. Ser.*, 50(10), 51.
- 3.3.- Eckert, J. S., 1970, *Chem. Eng. Prog.*, 66(3), 39.
- 3.4.- Sherwood, T. K., Shipley, G. H., and Holloway, F. A. L., 1938, *Ind. Eng. Chem.*, 30, 765.
- 3.5.- Norton Company, 1976, "Design Information for Packed Towers", *Bulletin DC-11, Akron, Ohio, USA*.
- 3.6.- Barnés, F. J., Comunicación personal.

Capítulo 4

- 4.1.- Shulman, H.L. et al, 1955, *AIChE J.*, 1, 247, 253, 259.
- 4.2.- Treybal, Robert E., 1989, *Operaciones de Transferencia de Masa*, Segunda edición.
- 4.3.- Onda, K, Takeuchi, H., and Okumoto, Y., 1968, *Jour. Ch. E. Japan*, 1(1), 56.
- 4.4.- Bolles, W.L., Fair, J.R., 1982, *Chem. Eng.*, 89, 109.
- 4.5.- Cornell, D., Knapp, W.G., and Fair, J.R., 1960, *Chem. Eng. Prog.*, 56(7), 68.

4.6.- Chilton, T.H., and Colburn A.P., 1934, *Ind. Eng. Chem.*, 26, 1183.

Capítulo 5

5.1.- Wilke C.R., and Stocker U.v., 1977, *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 16(2), 88, 94.

5.2.- King C.J., 1980, *Separation Processes*, Second edition, 781.

5.3.- Shulman, H.L. et al, 1955, *AIChE J.*, 1, 259.

APENDICE A

APÉNDICE A

Propiedades de empaques.

Tipo de empaque	Diámetro (m)	Área superficial (m ² /m ³)	Factor de empaque F _p (m ⁻¹)
Sillas Intalox (cerámica)	0.013	625	660
	0.025	255	320
	0.038	195	170
	0.050	118	130
	0.075	92	70
Sillas Intalox (metal)	0.025	-	135
	0.040	-	82
	0.050	-	52
	0.070	-	43
Anillos Pall (metal)	0.016	360	230
	0.025	205	157
	0.038	130	92
	0.050	115	66
	0.090	92	53
Anillos Raschig (cerámica)	0.013	370	2000
	0.025	190	510
	0.038	120	310
	0.050	92	215
	0.075	62	120
Sillas Berl (cerámica)	0.013	465	790
	0.025	250	360
	0.038	150	215
	0.050	105	150
Sillas Intalox (plástico)	0.025	206	105
	0.050	108	69
	0.075	88	50
Anillos Pall (plástico)	0.016	341	310
	0.025	207	170
	0.050	100	82

Los datos fueron obtenidos de *Handbook of Separation Process Technology*; 1987, Edited by Ronald W. Rousseau; Wiley-Interscience.

APENDICE B

Program Diseño_de_una_torre_de_absorcion;

Uses crt,vent,compbin,constant,constgas,constliq,empaques;

Var

```
cca,cas,e:char;
altura,salida:string;
z,zv,zl,a,b,bo,lnva,Tf,T,P,L,cc,ro,porcin:real;
liq,gas,ap,dp,tsupc,fp,flv,f1,f2,f3,f4,df1,df2,df3: real;
Hsca,Hsma,Hsna,Hoaa,Hoba,Hoda:real;
df4,y0,cdp,vap,flq,fgas,pmgas,pmliq: real;
area,dtorre,aw,cpvap,cpliq,xa,ta: real;
altfija,htr,coeflv,ctcl,ctcv,ctmv,ctml,entalpia:real;
presion,sumacomp,Co,ysal,porrec,ErrorT,ErrorX,apr,dtotal:real;
j,i,n,ng,met,k,it,h,v,nseg,nta,segmax,m,nlet: integer;
aparcial,aparcial,cfug,zi,deltahi,difuliq,hi: array [1..5,1..5] of real;
kbin,kprom,deltak: array [1..5,1..5] of real;
comp,letrero: array[1..8] of string[50];
ki,tca,pca,omegas,k1a,vca,zca,pma,tsupr,fas: array [1..5] of real;
tr,pr,ko,alfa,aai,bi,y,x,dnliq,di,epsilon,ek,longi: array [1..5] of real;
fbs,CONSTa,CONSTb,CONSTc,ctliq,clgas,cpv,cpl,fact: array [1..5] of real;
dh,kii,cpga,cpgb,cpgc,cpgd,cpta,cplb: array [1..5] of real;
ctga,ctgb,ctla,ctlb,clatr,clat: array [1..5] of real;
aij,xy: array [1..5,1..7] of real;
yalim,flux: array [1..5,0..100] of real;
ht,tas,q1at,qva,vapor,entalpv,Tvap: array [0..100] of real;
qla,liquido,entalpl,Ti,Tliq,vismgas,denmgas:array [1..100] of real;
vismliq,denmliq,tensupm,hutseg,nutseg,hut: array [1..100] of real;
xalim,viscosgas,dengas,difmgas,visliq: array [1..5,1..100] of real;
difmliq: array [1..5,1..100] of real;

const roo=0.2530765866; aoo=5.877359948;
conv2=1.271376e8; conv=1.31371282e12;
R=0.0820567; Tref=273.15; raiz=1.414213562;
```

```
function g(ro:real):real;
```

```
begin
  g:=1/SQR(1-ro)-cc*ro*(2+2*ro)/SQR(1+2*ro-ro*ro);
end;
```

```
function dg(ro:real):real;
```

```
begin
  dg:=2/(SQR(1-ro)*(1-ro))-cc*2*(1+ro*ro*(3+2*ro))/EXP(3*LN(1+2*ro-ro*ro));
end;
```

```
function ff(yi: real);
```

```
var ry:real;
begin
  ry:=1/sqrt(yi);
  ff:=((-0.0002716*ry+0.01635)*ry+0.07811)*ry-0.2282-flv;
end;
```

```
function dff(yi: real): real;
```

```
var ry:real;
begin
  ry:=1/sqrt(yi);
```

```
dff: = ((0.0004074*ry-0.01635)*ry-0.039055)*ry/ry;  
end;
```

```
function gg(dp: real): real;  
var rdp,ry0:real;  
begin  
  rdp:= 1/dp; ry0:= 1/sqrt(y0);  
  f1:= ((-0.0001208246*rdp + 0.0053433525)*rdp-0.1265221859)*rdp + 0.1188300924;  
  f2:= ((-0.0004093485*rdp + 0.0136032241)*rdp-0.1209508427)*rdp-0.0168475367;  
  f3:= ((0.000065805*rdp-0.0019896148)*rdp + 0.0124113715)*rdp + 0.0371047483;  
  f4:= ((0.0000031311*rdp-0.0000915904)*rdp + 0.0005183741)*rdp + 0.0014237938;  
  gg:= ((-f4*ry0 + f3)*ry0 + f2)*ry0-f1-fv1;  
end;
```

```
function dgg(dp: real): real;  
var rdp,ry0:real;  
begin  
  rdp:= 1/dp; ry0:= 1/sqrt(y0);  
  df1:= ((0.0003624738*rdp-0.010686705)*rdp + 0.1265221859)*rdp;  
  df2:= ((0.0012280455*rdp-0.0272064482)*rdp + 0.1209508427)*rdp;  
  df3:= ((-0.000197415*rdp + 0.0039792296)*rdp-0.0124113715)*rdp;  
  df4:= ((-0.0000093933*rdp + 0.0001831808)*rdp-0.0005183741)*rdp;  
  dgg:= ((-df4*ry0 + df3)*ry0 + df1)*ry0-df1;  
end;
```

```
function fa(xa:real):real;  
var multfa:real;  
begin  
  multfa:= exp((ctliq[2]/ctgas[2])*ln((1-xalim[2,nseg + 1]*ta)/(1-xa*ta)));  
  fa:= (1-xa*ta*cfug[2,2]/cfug[1,2])-(1-yalim[2,nseg-1]*ta)*multfa;  
end;
```

```
function dfa(xa:real):real;  
var mtdfa,mdfa,ct: real;  
begin  
  ct:= ctliq[2]/ctgas[2];  
  mtdfa:= exp((ct-1)*ln((1-xalim[2,nseg + 1]*ta)/(1-xa*ta)));  
  mdfa:= ((1-xalim[2,nseg + 1]*ta)*ta/sqr(1-xa*ta))*mtdfa;  
  dfa:= -ta*cfug[2,2]/cfug[1,2]-(1-yalim[2,nseg-1]*ta)*ct*mdfa;  
end;
```

```
Procedure arriba;  
begin  
  if met= 1 then  
  begin  
    write(chr(7));  
    exit;  
  end;  
  color(7,0);  
  gotoxy(1,3 + met);  
  write(letters[met]);  
  met:= met-1;  
  color(6,3);  
  gotoxy(1,3 + met);  
  write(letters[met]);  
  color(7,0);
```

end;

Procedure abajo;

```
begin
  if met = nlet then
    begin
      write(chr(7));
      exit;
    end;
  gotoxy(1,3 + met);
  write(letrero[met]);
  met: = met + 1;
  color(6,3);
  gotoxy(1,3 + met);
  write(letrero[met]);
  color(7,0);
end;
```

Procedure calor_latente;

```
begin
  qlat[nseg]: = 0; clat[1]: = 0;
  for i: = ng to n do
    begin
      clat[i]: = (deltah[i,1]-deltah[i,2])*1.987*T;
      qlat[nseg]: = qlat[nseg] + Flux[i,nseg]*clat[i];
    end;
  end;
end;
```

Procedure zih1;

*CALCULO DEL FACTOR DE COMPRESIBILIDAD *
Y DE LA ENTALPIA POR COMPONENTE

var zarr,zaba,aa,ab,bb,suma,dz: real;

```
begin
  aa: = a-b*(2+3*b); bb: = 1-b;
  ab: = z*z+2*b*z-b*b; zaba: = 3*z*z-2*z*ab+aa;
  dh[v]: = (z-1) + (apr-a)/b*L;
  for i: = 1 to n do
    begin
      zarr: = z*(1-bi[i])-(aparcial[v,i]-2*b-bi[i]*(2+6*b))+b*(aparcial[v,i]-b)+aa*bi[i];
      zi[i,v]: = zarr/zaba; dz: = zi[i,v]-1;
      suma: = (apr-a)/b*(bi[i]*z-zi[i,v]*b)/ab;
      deltah[i,v]: = dz + (aparcial[v,i]-aparcial[v,i]-(apr-a)*bi[i]/b)*L/b + suma;
    end;
  end;
end;
```

Procedure coef_de_fugacidad;

*CALCULO DEL COEFICIENTE DE FUGACIDAD *
DEL LIQUIDO Y DEL VAPOR POR COMPONENTE

var cf1,sum1,sum2,sum3,sumar,sump1,sump2,sump3,cf2,mult2,mult3: real;

```
s: integer;
begin
  cf1: = (z-1)/b;
  cf2: = ln(z-b);
  L: = ln((z+(1+raiz)*b)/(z+(1-raiz)*b))/(2*raiz);
  for h: = 1 to n do
    begin
      sum1: = 0; sump1: = 0;
```

```

sum2:=0; sump2:=0;
sum3:=0; sump3:=0;
for j:=1 to n do
begin
sumar:=xy[j,k]*aij[h,j];
sum1:=sum1+sumar;
sump1:=sump1+sumar*(fact[j]+fact[h]);
if j<>h then
begin
sumar:=xy[h,k]*xy[j,k]*sqrt(aii[j]*aii[h])*deltak[h,j];
sum2:=sum2+sumar;
sump2:=sump2+sumar*(fact[h]+fact[j]);
if j<n then
begin
for s:=j+1 to n do
begin
mult3:=xy[j,k]*xy[s,k]*sqrt(aii[j]*aii[s]);
sumar:=mult3*(deltak[s,j]*xy[s,k]+deltak[j,s]*xy[j,k]);
sum3:=sum3+sumar;
sump3:=sump3+sumar*(fact[h]+fact[s]);
end;
end;
end;
end;
aparcial(v,h):=2*sum1-2*sum2+sum3;
cfug(v,h):=bo*exp(bi[h])*cf1-cf2-L*a/b*(aparcial(v,h)/a-bi[h]/bi);
aparcial(v,h):=sump1-sump2+0.5*sump3;
end;
end;

```

```

Procedure nr; *EXTRAPOLACION DE RO*
var dr,gr,ro,f2,f3,f0,oper:real;

```

```

function fr(ro:real):real;
begin
fr:=ro/(1-ro)-cc*ro*ro/(1+2*ro-ro*ro);
end;
begin
it:=0; {---EXTRAPOLANDO PARA F=0.1---}
repeat
dr:=-g(ro)/dg(ro);
ro:=ro+dr;
if v=1 then
begin
if ro>roo then ro:=(ro-dr+roo)/2;
if ro<0 then ro:=(ro-dr)/2;
end
else
begin
if ro<roo then ro:=(ro-dr+roo)/2;
if ro>1 then ro:=(ro-dr+1)/2;
end;
it:=it+1;
if it>25 then
begin
ro:=roo;

```

```

writeIn('EL CALCULO DE RO PARA LA EXTRAP., NO CONVERGE EN 25 ITERAC.1');
exit;
end;
until abs(-dr-0.1)<0.0001;
gr:=g(ro); fro:=f(ro);
if v=1 then
begin
f2:=(gr*(ro-ro)/2-fro)/sqrt(fro*(ro-ro)/2);
f3:=2*f2*ro+gr/sqrt(fro);
f0:=1/fro+f3*ro-f2*sqrt(ro);
ro:=(f3-sqrt(sqrt(f3)-4*f2*(f0-1/b)))/(2*f2);
z:=b/ro;
end
else
begin
oper:=0.7*ro;
f2:=(ro-oper)*gr;
f0:=fro-f2*ln(ro-oper);
ro:=exp((b-f0)/f2)+oper;
z:=b/ro;
bo:=f(ro)/b;
end;
end;
end;

```

```

Procedure raiz_zs;
begin
if v=1 then {Vapor}
begin
if cc>=aoo then
begin
if (ro>roo) or (g(ro)<0.1) then
begin
ro:=0.1;
nr;
end;
end;
else {Liquido}
begin
if (ro<roo) or (g(ro)<0.1) then
begin
ro:=0.8;
nr;
end;
end;
end;
end;

```

```

Procedure zs; *CALCULO DE Z POR METODO ANALITICO*
var tet,c,rc,d,qq,qr,sd,qma,qme,aqma,aqme,da,db,dc,sumaz:real;
begin
bo:=1; cc:=a/b;
da:=1-b; db:=a-2*b-3*b*b; dc:=a*b-b*b*(1+b); c:=3*db-sqr(da);
d:=-sqr(da)*da+4.5*da*db-13.5*dc; qq:=c*c*c+d*d;
if qq>0 then {Una raiz}
begin
sd:=sqrt(qq); qma:=-d+sd; qme:=-d-sd; aqma:=abs(qma); aqme:=abs(qme);

```

```

sumaz = (qme/aqme)*exp((1/3)*ln(aqme));
z = (da + (qma/aqma)*exp((1/3)*ln(aqma)) + sumaz)/3;
ro = b/z; raiz_zs;
end
else {Tres raices}
begin
rc = sqrt(-c); qr = -d/sqrt(-c*c*c); tet = 90*pi/180-arctan(qr/sqrt(1-qr*qr));
if v = 1 then z = (da + 2*rc*cos(tet/3))/3;
else z = (da + 2*rc*cos(tet/3 + 120*pi/180))/3;
if (v = 2) and (z < b) then z = (da + 2*rc*cos(tet/3 + 120*pi/180))/3;
ro = b/z; raiz_zs;
end;
end;

```

```

Procedure ctes_a_b;          * CALCULO DE A, A' Y B DE LA ECUACION DE ESTADO *
var sumar,multaij: real;
begin
for i = 1 to n do
begin
if T > tca[i] then
begin
fact[i] := -2*(kii[i]-1)*exp(kii[i])*ln(tr[i]);
end
else
begin
fact[i] := -1/sqrt(alfa[i])*(kofi)*sqrt(tr[i]) + 2*k1a[i]*tr[i]*(1.7-2*tr[i]);
end;
end;
a := 0; b := 0; apr := 0;
for i = 1 to n do
begin
for j = 1 to n do
begin;
if i < j then
begin
multaij := {1-(kprom[i,j] + deltak[i,j])*xy[i,k] + deltak[j,i]*xy[j,k]};
aij[i,j] := sqrt(aii[i]*aii[j])*multaij; aij[j,i] := aij[i,j];
end
else
begin
aij[i,j] := aii[i];
end;
sumar := xy[i,k]*xy[j,k]*aij[i,j];
a := a + sumar;
apr := apr + 0.5*sumar*(fact[i] + fact[j]);
end;
b := b + xy[i,k]*bi[j];
end;
end;
end;

```

```

Procedure ctesgral;          * CALCULO DE CONSTANTES GENERALES DE LOS *
var w:real;                  * SISTEMAS
begin
for i = 1 to n do
begin

```

```

if T <= 0 then T := 273.15;
tr(i) := T/tca(i); pr(i) := P/pca(i);
w := omegas(i);
ko(i) := ((0.0196554*w-0.17131848)*w + 1.4897153)*w + 0.378893;
if T > tca(i) then
begin
kii(i) := 1 + 0.5*ko(i)-0.3*k1a(i);
alfa(i) := exp(2*(kii(i)-1)/kii(i)*(1-exp(kii(i)*ln(tr(i)))));
end
else
begin
alfa(i) := sqr(1 + ko(i)*(1-sqrt(tr(i))) + k1a(i)*(1-tr(i))*(0.7-tr(i)));
end;
aii(i) := 0.457235*pr(i)*alfa(i)/sqr(tr(i));
bii(i) := 0.077796*pr(i)/tr(i);
end;
end;

```

Procedure empaque_aleatorio;

type *LECTURA DE BASE DE DATOS EMPAQUES*

```

registro = record
    nc:integer;
    diamnom:real;
    areasup:real;
    factemp:real;
    tencrit:real;
    Hsc :real;
    Hsm :real;
    Hsn :real;
    Hoa :real;
    Hob :real;
    Hod :real;
end;
archivo = file of registro;
var
dato:registro;
archy:archivo;
nd,i,nop,n:integer;
e:char;
empaque: string[11];
nombemp: string[30];
cont:integer;
res:char;
numop:integer;

```

```

begin
clrscr;
textcolor(14);
gotoxy(10,4); write('MENU DE EMPAQUES ALEATORIOS');
textcolor(15);
gotoxy(6,8); write(' 1.- Sillas Intalox de porcelana');
gotoxy(6,9); write(' 2.- Sillas Intalox de PVC');
gotoxy(6,10); write(' 3.- Sillas Intalox de acero al carbón');
gotoxy(6,11); write(' 4.- Sillas Berl de porcelana');
gotoxy(6,12); write(' 5.- Anillos Pall de PVC');
gotoxy(6,13); write(' 6.- Anillos Pall de acero al carbón');

```

```

gotoxy(6,14); write(' 7.- Anillos Raschig de porcelana');
textcolor(12);
gotoxy(6,18); write('Seleccionar el empaque para la columna : ');
textcolor(15);
readln(numop);
case numop of
  1:begin
    empaque = 'a:\Intaloxc'; nombemp = 'Sillas Intalox de porcelana';
    end;
  2:begin
    empaque = 'a:\Intaloxp'; nombemp = 'Sillas Intalox de PVC';
    end;
  3:begin
    empaque = 'a:\Intaloxm'; nombemp = 'Sillas Intalox de acero al carb n';
    end;
  4:begin
    empaque = 'a:\Berlc'; nombemp = 'Sillas Berl de porcelana';
    end;
  5:begin
    empaque = 'a:\Pallp'; nombemp = 'Anillos Pall de PVC';
    end;
  6:begin
    empaque = 'a:\Pallm'; nombemp = 'Anillos Pall de acero al carb n';
    end;
  7:begin
    empaque = 'a:\Raschigc'; nombemp = 'Anillos Raschig de porcelana';
    end
  else
    begin
      clrscr; gotoxy(10,10);
      write('- Opci n mal seleccionada, intente de nuevo !');
      write(#7,#7); delay(1500);
    end;
end;
begin
assign(archy,empaque);
reset(archy);
textcolor(14);
clrscr;
gotoxy(10,4); write('Escoger el n mero de la opci n :');
textcolor(15);
nd := filesize(archy);
n := nd-1;
cont := 6;
for i := 0 to n do
begin
with dato do
begin
nc := i;
read(archy,dato);
gotoxy(10,cont); writeln(nc+1:2,'.- Di metro ',diamnom:0:3,' m');
cont := cont + 1;
end;
end;
begin
writeln;

```

```

cont: = cont + 2;
textcolor(12);
gotoxy(10,cont); write('Opción : ');
textcolor(15);
readln(n);
if (n <= nd) and (n > 0) then
begin
  reset(archy);
  with dato do
  begin
    nc: = n-1;
    seek(archy,nc);
    read(archy,dato);
    dp: = diamnom;
    ap: = areasup;
    fp: = factemp;
    tsupc: = tencrit;
    Hsca: = Hsc;
    Hsma: = Hsm;
    Hsna: = Hsn;
    Hoaa: = Hoa;
    Hoba: = Hob;
    Hoda: = Hod;
  end;
  close(archy);
end
else
begin
  clrscr;
  gotoxy(10,10); write('-Opción mal seleccionada, intente de nuevo!');
  write(#7,#7); delay(1500);
end;
end;
end;
end;

```

```

Procedure lectura_datos;
type

```

LECTURA DATOS DE PROPIEDADES FISICAS

```

registro = record
  nc:integer;
  nombre:string[20];
  tc:real;
  pc:real;
  vc:real;
  omega:real;
  zc:real;
  pm:real;
  k1:real;
  cl:real;
end;
archivo = file of registro;

reggas = record
  nc:integer;
  nombre:string[20];
  din:real;

```

```

    eks:real;
    long:real;
    cpgasa:real;
    cpgasb:real;
    cpgasc:real;
    cpgasd:real;
    cterga:real;
    ctergb:real;
end;
archigas = file of reggas;

regliq = record
    nc:integer;
    nombre:string[20];
    fa:real;
    fb:real;
    ca:real;
    cb:real;
    cc:real;
    cpliq:real;
    cpliqb:real;
    denl:real;
    cterla:real;
    cterlb:real;
    tsr:real;
end;
archiliq = file of regliq;

regbin = record
    nc:integer;
    mezcla:string[35];
    k12:real;
    k21:real;
end;
archibin = file of regbin;

var dato:registro;
    archy:archivo;
    datgas:reggas;
    archygas:archigas;
    datliq:regliq;
    archyliq:archiliq;
    datbin:regbin;
    archybin:archibin;
    nomb:string[20];
    nd,nop,nn,valor:integer;
    mezcly:string[50];

begin
    assign(archy,'a:\datos_A'); { Datos generales }
    reset(archy);
    nd := filesize(archy);
    for i := 1 to n do
    begin
        nomb := compli;
        with dato do

```

```

begin
nc = 0;
repeat
seek(archy,nc);
read(archy,dato);
if nombre < > nomb then nc = nc + 1;
until nombre = nomb;
seek(archy,nc);
read(archy,dato);
tca[i] = tc;
pca[i] = pc;
vca[i] = vc;
omogasil = omega;
zca[i] = zc;
pma[i] = pm;
k1a[i] = k1;
clatr[i] = cl;
end;
end;
close(archy);
assign(archygas,'a:\datos_B'); { Datos del gas }
reset(archygas);
nd = filesize(archygas);
for i = 1 to n do
begin
nomb = comp[i];
with datgas do
begin
nc = 0;
repeat
seek(archygas,nc);
read(archygas,datgas);
if nombre < > nomb then nc = nc + 1;
until nombre = nomb;
seek(archygas,nc);
read(archygas,datgas);
d[i] = din;
ek[i] = eks;
longi[i] = long;
cpgai[i] = cpgasa;
cpgbi[i] = cpgasb;
cpgci[i] = cpgasc;
cpgdi[i] = cpgasd;
ctgai[i] = cterga;
ctgbi[i] = ctergb;
end;
end;
close(archygas);
assign(archyliq,'a:\datos_C'); { Datos del liquido }
reset(archyliq);
nd = filesize(archyliq);
for i = 1 to n do
begin
nomb = comp[i];
with datliq do
begin

```

```

nc:=0;
repeat
  seek(archyliq,nc);
  read(archyliq,datliq);
  if nombre<>nomb then nc:=nc+1;
until nombre=nomb;
seek(archyliq,nc);
read(archyliq,datliq);
fas[i]:=fa;
fbs[i]:=fb;
consta[i]:=ca;
constb[i]:=cb;
constc[i]:=cc;
cplai[i]:=cpliaq;
cpbli[i]:=cpliqb;
denliq[i]:=denl;
ctla[i]:=cterla;
ctlb[i]:=cterlb;
tsupr[i]:=tsr;
end;
end;
close(archyliq);
assign(archybin,'a:\bin_a'); { Datos binarios }
reset(archybin);
nd:=filesize(archybin);
for i:=1 to n-1 do
for j:=i+1 to n do
begin
mezcly:=concat(comp[i],'-',comp[j]);
with datbin do
begin
nc:=0;
valor:=1;
repeat
seek(archybin,nc);
read(archybin,datbin);
if mezcla<>mezcly then nc:=nc+1;
if nc=nd then
begin
mezcly:=concat(comp[j],'-',comp[i]);
nc:=0; valor:=valor+1;
end;
until (mezcla=mezcly) or (valor>2);
if valor>2 then
begin
clrscr; gotoxy(10,10);
write('! Faltan datos de parmetros binarios !',#7,#7,#7);
delay(3000); exit;
end;
seek(archybin,nc);
read(archybin,datbin);
kbin[i,j]:=k12;
kbin[j,i]:=k21;
end;
kprom[i,j]:=(kbin[i,j]+kbin[j,i])/2;
kprom[j,i]:=kprom[i,j];

```

```

deltak(i,j): = kbin(i,j)-kprom(i,j);
deltak(j,i): = kbin(j,i)-kprom(i,j);
end;
close(archybin);
empaque_aleatorio;
end;

```

```

Procedure propfisicas_liquido; *CALCULO PROPIEDADES FISICAS*
var vismln,paramcero,paramuno,faspm,vissol,term: real; *DEL LIQUIDO*
sumten: real;
conterl,vb,tensup: array [1..5] of real;

```

```

begin
vismln:= 0; denmliq[nseg]:= 0; sumten:= 0;
cpliq:= 0; ctml:= 0;
for i:= 1 to n do
begin
tr(i):= T/tca(i);
term:= consta(i) + constb(i)/(T-constc(i)); {Viscosidad del liquido}
visliq[i,nseg]:= (exp(term*ln(10)))^3.6;
vismln:= vismln + x(i)*ln(visliq[i,nseg]);
denmliq[nseg]:= denmliq[nseg] + x(i)*denliq(i); {Densidad del liquido}
cpl(i):= cpla(i) + T*cplb(i); {Cp del liquido}
cpliq:= cpliq + cpl(i)*xalim(i,nseg + 1);
conterl(i):= (ctla(i) + ctlb(i)*T)^3.6; {Capacidad térmica kcal/h m K}
ctml:= ctml + conterl(i)*xalim(i,nseg + 1);
end;
vismliq[nseg]:= exp(vismln);
for i:= 1 to n do
begin
faspm:= fas[n]*pma[n]; {Difusividad de líquidos}
vissol:= visliq[n,nseg]/3.6;
if n>3 then
begin
faspm:= 0; vissol:= 0;
for j:= ng + 1 to n do
begin
faspm:= faspm + xalim(j,nseg)*fas(j)*pma(j);
vissol:= vissol + xalim(j,nseg)*visliq(j,nseg)/3.6;
end;
end;
vb(i):= 0.285*exp(1.048*ln(vcai)*1000);
difmliq(i,nseg):= 7.4e-8*sqrt(faspm)*T/(vissol*exp(0.6*ln(vb(i))*fbs(n)))*0.36;
end;
for i:= ng to n do {Ciclo de la tensión superficial}
begin
tensup(i):= tsupr(i)*exp(0.897*ln((1-T/tca(i))/(1-293.15/Tca(i))))*12960;
sumten:= sumten + x(i)*exp(0.25*ln(tensup(i)))/denliq(i);
end;
tensupm[nseg]:= exp(4*ln(denmliq[nseg]*sumten));
end;

```

```

Procedure propfisicas_gas; *PROPIEDADES FISICAS DEL GAS*

```

```

var porcion,segmento,arriba,abajo,deno,sumdif: real;
prompm,modWL,sob,extra,mas: real;

```

```

conterv,coef: array [1..5] of real;
pmbin,coefa,coefs,fi,energprom,diprom: array [1..5,1..5] of real;
coet,collision,radio,difus,mmez: array [1..5,1..5] of real;

begin
for i:= 1 to n do { Cálculo viscosidad del gas }
begin
coef[i]:= T/ek[i];
tr[i]:= T/tca[i];
epsilon[i]:= exp(ln(tca[i])/6)/(exp(2*ln(pcal[i])/3)*sqrt(pma[i]));
if fas[i]> 1 then
begin
viscosgas[i,nseg]:= (0.755*tr[i]-0.055)/(epsilon[i]*exp((5/4)*ln(zca[i])))*3.6e-4;
end
else
begin
viscosgas[i,nseg]:= exp(0.8*ln(1.9*tr[i]-0.29))/(epsilon[i]*exp(2/3*ln(zcal[i])))*3.6e-4;
end;
end;
for i:= 1 to n do
for j:= 1 to n do
begin
pmbin[i,j]:= pma[i]/pma[j];
mmez[i,j]:= exp(0.25*ln(4/((1+1/pmbin[i,j])*(1+pmbin[i,j]))));
porcion:= (1+exp(0.45*ln(pmbin[i,j])))/(1+mmez[i,j])*sqrt(mmez[i,j]);
segmento:= (1+(pmbin[i,j]-exp(0.45*ln(pmbin[i,j])))/(2*(1+pmbin[i,j])+porcion));
coefa[i,j]:= mmez[i,j]*segmento/exp(0.5*ln(pmbin[i,j]));
arriba:= 1+sqrt(coef[i]*coef[j])+ (di[i]*di[j])/4;
abajo:= sqrt(1+coef[i]+sqrt(di[i])/4)*sqrt(1+coef[j]+sqrt(di[j])/4);
coefs[i,j]:= arriba/abajo;
fi[i,j]:= sqrt(viscosgas[i,nseg]/viscosgas[j,nseg])*coefs[i,j]*coefa[i,j];
end;
vismgas[nseg]:= 0;
for i:= 1 to n do
begin
deno:= 0;
for j:= 1 to n do
begin
deno:= deno+vi[j]*fi[i,j];
end;
vismgas[nseg]:= vismgas[nseg]+vi[i]*viscosgas[i,nseg]/deno;
end;
{ Cálculo de densidad del gas }
denmgas[nseg]:= 0;
for i:= 1 to n do
begin
dengas[i,nseg]:= pma[i]*Tref/(22.4*T);
denmgas[nseg]:= denmgas[nseg]+vi[i]*dengas[i,nseg];
end;
{ Cálculo del coef. de difusión en el gas }
for i:= 1 to n do { El componente i es el que se difunde en los demás }
for j:= 1 to n do
begin
if i<>j then
begin
energprom[i,j]:= sqrt(ek[i]*ek[j]);
coet[i,j]:= T/energprom[i,j];
diprom[i,j]:= di[i]*di[j];

```

```

extra:= 1.76474/exp(3.89411*coetf[i,j])+0.19*diprom[i,j]/coetf[i,j];
sob:= 1.03587/exp(1.52996*coetf[i,j])+extra;
mas:=0.193/exp(0.47635*coetf[i,j]);
collisionf[i,j]:= 1.06036/exp(0.1561*ln(coetf[i,j]))+mas+sob;
radiof[i,j]:=(longf[i]+longf[j])/2;
promp[m]:=sqrt(1/pmaf[i]+1/pmaf[j]);
modWL:=(0.00217-0.0005*promp[m]);
difusf[i,j]:=modWL*exp((1.5)*ln(T))*promp[m]/(P*sqr(radiof[i,j]))*collisionf[i,j];
end;
for i:= 1 to n do
begin
sumdif:= 0;
if i= 1 then
begin
for j:= i+ 1 to n do
begin
sumdif:= sumdif+yfj/difusf[i,j];
end;
end
else
begin
for j:= 1 to i-1 do
begin
sumdif:= sumdif+yfj/difusf[i,j];
end;
end;
for j:= i+ 1 to n do
begin
sumdif:= sumdif+yfj/difusf[i,j];
end;
end;
difmgasf[i,nseg]:=(1-yf[i])/sumdif*0.36;
end;
cpvap:= 0;
ctmv:= 0;
for i:= 1 to n do
begin
cpvf[i]:= cpgef[i]+T*(cpgef[i]+T*(cpgef[i]+cpgef[i]*T)); {kcal/kmol K}
cpvap:= cpvap+cpvf[i]*yalimf[i,nseg-1];
contervf[i]:=(ctgef[i]+ctgef[i]*T)*3.6; {conductividad trmica kcal/h m K}
ctmv:= ctmv+contervf[i]*yalimf[i,nseg-1];
end;
end;

```

```

Procedure coef_de_transf;                                *CALCULO DE LOS COEFICIENTES*
var rel,frf,wel,rewf,cdgg,reg: real;                    *DE TRANSFERENCIA DE MASA*
    scl,scg,conrtd,conc.denagua,visagua,adp.ctekv,ctekj: real;
    ctcv2,ctcv3,ctcl2,ctcl3,ctekv2,ctekv3,ctekl2,ctekl3: real;
begin
fgas:= vapor[nseg-1]*pmgas/area;
fliq:= liquido[nseg+1]*pmliq/area;
rel:= flq/(ap*vismliq[nseg]);
frf:= ap*sqr(fliq)/(conv2*sqr(denmliq[nseg]));
wel:= sqr(fliq)/(ap*tensupm[nseg]*denmliq[nseg]);
aw:= ap*(1-exp(-1.45*exp(0.1*ln(rel)-0.05*ln(frf)+0.2*ln(wel)-
0.75*ln(tensupm[nseg]/tsupc/12960))));

```

```

conc:= denmliq[nseg]/pmliq;
adp:= ap * dp; reg:= fgas/lap * vismgas[nseg]];
rewl:= flq/(aw * vismliq[nseg]);
ctgas[1]:= 0; cqliq[1]:= 0;
for i:= ng to n do
begin
  scg:= vismgas[nseg]/(denmgas[nseg] * difmgas[i,nseg]);
  conrtd:= R * T/(ap * difmgas[i,nseg]); { ky= [kmol/(atm m2 h)] }
  ctgas[i]:= 5.23 * aw * exp(0.7 * ln(reg) + (1/3) * ln(scg) - 2 * ln(adp))/conrtd;
  ctgas[i]:= ctgas[i] * P;
  scl:= vismliq[nseg]/(denmliq[nseg] * difmliq[i,nseg]); { kx= [kmol/(m2 h)] }
  cdgg:= denmliq[nseg]/(conv2 * vismliq[nseg]);
  cqliq[i]:= 0.0051 * aw * conc * exp((2/3) * ln(rewl) - 0.5 * ln(scl) + 0.4 * ln(adp) - (1/3) * ln(cdgg));
end;
ctekv:= exp((2/3) * ln(ctmv * pmgas/(difmgas[ng,nseg] * cpvap * denmgas[nseg]]));
ctekl:= exp((2/3) * ln(ctml * pmliq/(difmliq[ng,nseg] * cqliq * denmliq[nseg]]));
ctcv:= cpvap * ctgas[ng] * ctekv;
ctcl:= cqliq * cqliq[ng] * ctekl;
end;

```

```

Procedure caída_de_presión; *CALCULO DE LA CAIDA DE PRESION*
var denagua,visagua,yi,gf,af,g0,dp: real; *Y EL FLUJO DE INUNDACION*

```

```

begin
  pmgas:= 0; pmliq:= 0;
  for i:= 1 to n do
  begin
    pmgas:= pmgas + yalim[i,nseg-1] * pma[i];
    pmliq:= pmliq + xalim[i,nseg + 1] * pma[i];
  end;
  denagua:= 1000; visagua:= exp((-1.5668 + 230.298/(T-146.797)) * ln(10)) * 3.6;
  gas:= vapor[nseg-1] * pmgas;
  liq:= liquido[nseg + 1] * pmliq;
  fvl:= liq * sqrt(denmgas[nseg]/denmliq[nseg])/gas;
  yi:= 0.01;
  while abs(ff(yi)) > 0.0001 do
  begin
    yi:= yi - ff(yi)/dff(yi);
    if yi < 0 then yi:= 0.001;
  end;
  gf:= (yi * conv2 * sqrt(denmliq[nseg]) * denmgas[nseg] * exp(0.2 * ln(visagua/vismliq[nseg]]));
  gf:= sqrt(gf/(fp * denagua));
  af:= vap * pmgas/gf; g0:= porcin * gf/100;
  area:= af * 100/porcin;
  y0:= sqrt(g0) * fp * denagua * (exp(0.2 * ln(vismliq[nseg]/visagua)))/(conv2 * sqrt(denmliq[nseg]));
  y0:= y0 * denmgas[nseg];
  yi:= y0; dp:= 0.25;
  while abs(gg(dp)) > 0.0001 do
  begin
    dp:= dp - gg(dp)/dgg(dp);
    if dp < 0 then dp:= 0.05;
  end;
  gas:= g0; cdp:= dp/123.88 * hut[nseg]; { caída de presión en atm }
  liq:= liq/pmliq; vap:= gas * area/pmgas;
  dtotal:= sqrt(4 * area/pi);
end;

```

```

Procedure liquido_retenido;
var hs1,hs,ho1,ho2,ho: real;
begin
  hs1 := Hsma*ln(vismliq[nseg]/3.6) + Hsna*ln(tensupm[nseg]/946080);
  hs1 := hs1 + 0.37*ln(1000/denmliq[nseg]);
  hs := Hsca*exp(hs1);
  ho1 := 0.57*ln(liquido[nseg]/pmlq/area*0.2049) + Hoba*ln(vismliq[nseg]/3.6);
  ho := ho1 + 0.84*ln(1000/denmliq[nseg]);
  ho2 := (Hoda-0.262/2.302585*ln(liquido[nseg]/pmlq/area*0.2049))*ln(tensupm[nseg]/946080);
  ho := Haaa*exp(ho1 + ho2);
  htr := hs + ho;
end;
Procedure calculo_de_entalpia_liquido(T:real);
var hio,Ho,dT:real;
begin
  Ho := 0;
  dT := T-Tref;
  for i:= 1 to n do
  begin
    hio := cpl[i]*dT;
    Ho := Ho + xalim[i,nseg]*hio;
    hi[i,2] := hio + deltah[i,2]*1.987*T;
  end;
  entalpia := Ho + dh[2]*1.987*T;
end;

Procedure calculo_de_entalpia_vapor_entrada(T:real);
var hio,Ho,dT:real;
begin
  Ho := 0;
  dT := T-Tref;
  for i:= 1 to n do
  begin
    hio := (((cpgd[i]*dT/4 + cpgc[i]/3)*dT + cpgeb[i]/2)*dT + cpgal[i])*dT;
    Ho := Ho + yalim[i,0]*hio;
    hi[i,1] := hio + deltah[i,1]*1.987*T;
  end;
  entalpia := Ho + dh[1]*1.987*T;
end;

Procedure calculo_de_entalpia_vapor(T:real);
var hio,Ho,dT:real;
begin
  Ho := 0;
  dT := T-Tref;
  for i:= 1 to n do
  begin
    hio := (((cpgd[i]*dT/4 + cpgc[i]/3)*dT + cpgeb[i]/2)*dT + cpgal[i])*dT;
    Ho := Ho + xy[i,2]*hio;
    hi[i,1] := hio + deltah[i,1]*1.987*T;
  end;
  entalpia := Ho + dh[1]*1.987*T;
end;
Procedure iteracion_de_entalpia_vapor;
var H,T,dT:real;
begin

```

* CALCULO DEL LIQUIDO RETENIDO *
 * EN EL EMPAQUE

* CALCULO DE LA ENTALPIA DEL *
 * LIQUIDO

* CALCULO DE LA ENTALPIA *
 * DEL VAPOR *

```

H:= qva[nseg]*area*hut[nseg];
entalpv[nseg]:=(entalpv[nseg-1]*vapor[nseg-1]-H)/vapor[nseg];
T:= Tvp[nseg-1]+(entalpv[nseg]-entalpv[nseg-1])/cpvap;
repeat
  calculo_do_entalpia_vapor(T);
  dT:=(entalpv[nseg]-entalpia)/cpvap;
  T:=T+dT;
until abs(dT)<0.01;
Tvp[nseg]:=T;
end;

```

Procedure segmento_liquido:

```

var numtotseg,sux,xarr,xaba,entarr,entaba,xant,hant,da,db,dc,dd:real;
begin
  ErrorX:=0; ErrorT:=0;          * CALCULO DE LA COMPOSICION Y
  numtotseg:=nseg-1;            * TEMPERATURA EN LA TORRE DEL LADO
  if m<=1 then                  * DEL LIQUIDO
  begin
    calculo_de_entalpia_liquido(Tliq[nseg]);
    for i:=nseg to segmax do
      begin
        entalpi[i]:=entalpia;
      end;
    end;
    nseg:=nseg-1;
    while nseg>=1 do
      begin
        clrscr;
        liquido[nseg]:=liquido[nseg+1]+(flux[2,nseg]+flux[3,nseg])*area*hut[nseg];
        writeln('Iteración número ',m);
        writeln('Liq',nseg,')= ',liquido[nseg]:3:3,' Kmol/h');
        liquido_retenido;
        xant:=xalim[2,nseg];
        sux:=0;
        for i:=ng to n do
          begin
            xarr:=flux[i,nseg]*area*hut[nseg]/liquido[nseg];
            xarr:=xarr+liquido[nseg+1]*xalim[i,nseg+1]/liquido[nseg]-xalim[i,nseg];
            xaba:=1+htr/0.85;
            xalim[i,nseg]:=xalim[i,nseg]+xarr/xaba;
            sux:=sux+xalim[i,nseg];
          end;
        xalim[1,nseg]:=1-(xalim[2,nseg]+xalim[3,nseg]);
        for i:=ng to n do
          begin
            xalim[i,nseg]:=xalim[i,nseg]/sux;
            writeln('X(',i,')= ',xalim[i,nseg]:1:8);
          end;
        xalim[1,nseg]:=1-(xalim[2,nseg]+xalim[3,nseg]);
        ErrorX:=ErrorX+(xalim[2,nseg]-xant)*liquido[nseg]/(Flux[2,nseg]*area*hut[nseg]);
        qla[nseg]:=qva[nseg]+qlat[nseg]; {kcal/h m3}
        if m<=1 then entalpl[nseg]:=entalpl[nseg+1];
        hant:=entalpl[nseg];
        entarr:=qla[nseg]*area*hut[nseg]+liquido[nseg+1]*entalpl[nseg+1]-
        liquido[nseg]*entalpl[nseg];
        entaba:=(1+htr/0.85)*liquido[nseg];
      end;
    end;
  end;

```

```

entalp[nseg] := entalp[inseg] + entarr/entaba;
writeln('dh = ', entarr/entaba:2:5);
writeln('hliq = ', entalp[inseg]:4:2);
Tliq[nseg] := Tliq[inseg] + (entalp[inseg]-hant)/cpliq; {-ojo!!}
writeln('Tliq = ', Tliq[inseg]-273.15:2:2);
ErrorT := ErrorT + (entalp[inseg]-hant)*liquido[nseg]/(qla[nseg]*area*hut[nseg]);
delay(400); nseg := nseg-1;
end;
ErrorX := ErrorX/numtotseg;
ErrorT := ErrorT/numtotseg;
writeln('ErrorX = ', errorx:1:6, ' ErrorT = ', errorT:1:4);
delay(800);
end;

```

Procedura convergencia;

```

var Tant, ts, Na, Ns, dya, dys, F, dF: real;
    xa, ya, ys, xai, fxa, fya, fys, yult, Infys: real;
    s: integer;

```

METODO ITERATIVO PARA ENCONTRAR
*EL VALOR DE ta Y ya EN EL CASO DE *
QUE ta TIENDA A CERO

begin

```

s := 1;
ta := tasinseg;
ts := 0;
xyl[2,1] := xalim[2, nseg + 1];
xa := xyl[2,1];
for i := 1 to n do
begin
    cfugl[1,i] := 1;
end;
repeat
repeat
repeat
Tant := T; xyl[2,1] := xa;
xal := xyl[2,1]; xyl[3,1] := 1-xyl[2,1];
xyl[1,1] := 0;
ctesgral;
k := 1; v := 2;
ctes_a_b; zs;
coef_de_fugacidad;
zihi; zi := z;
xyl[3,2] := xyl[3,1]*cfugl[2,3]/cfugl[1,3];
xyl[2,2] := xyl[2,1]*cfugl[2,2]/cfugl[1,2];
ya := xyl[2,2];
xyl[1,2] := 1-(ya + xyl[3,2]);
k := 2; v := 1;
ctes_a_b; zs;
coef_de_fugacidad;
zihi; zv := z;
fya := 1; fxa := 1;
if abs(ta) > 5 then ta := tasinseg;
if abs(ta) > 1e-3 then
begin
fya := ln((1-ta*ya)/(1-ta*yalim[2, nseg-1]))/ta/(yalim[2, nseg-1]-ya);
if abs(xa-xalim[2, nseg + 1]) > 1e-3 then
fxa := ln((1-ta*xal)/(1-ta*xalim[2, nseg + 1]))/ta/(xalim[2, nseg + 1]-xa);
end;
xa := (fya*ctgasl[2]*yalim[2, nseg-1] + fxa*ctliq[2]*xalim[2, nseg + 1]);

```

```

xa = xa/(fya*ctgas[2]*cfug[2,2]/cfug[1,2] + fxa*ctliq[2]);
until abs(xa-xai) <= 1e-6;
xy[2,1] = xa;
ys = xy[3,2]; ts = 0; fys = 0;
dys = yalim[3,nseg-1]-ys;
dya = yalim[2,nseg-1]-ya;
if abs(ta-1) > 1e-3 then
begin
ts = ta/(ta-1); fys = 1;
if abs(ts) > 1e-3 then
begin
Infys = (1-ts*ys)/(1-ts*yalim[3,nseg-1]);
if Infys > 1e-10 then
fys = ln(Infys)/ts/dys;
end;
end;
Ns = fys*ctgas[3]*dys;
Na = fya*ctgas[2]*dya;
F = (1-ta)*Na + Ns;
dF = (1-ta)*ctgas[2]*dya/(1-ta*ya)/(1-ta*yalim[2,nseg-1])-Na;
dF = dF + 1/(1-ta)*(Ns-ctgas[3]*dys/(1-ts*ys))/(1-ts*yalim[3,nseg-1]);
if abs(ta) > 0.001 then ta = ta*(1-F/dF);
if abs(ta) <= 0.001 then
begin
exit;
end;
s = s + 1;
if s > 45 then
begin
s = 1;
exit;
end;
until abs(F/dF) <= 1e-6;
Co = (cpv[2]*Na + cpv[3]*Ns)/ctcv;
Tf = (exp(Co)-1)/Co;
Flux[2,nseg] = Na;
Flux[3,nseg] = Ns;
Flux[1,nseg] = 0;
calor_latente: { Qlat = kcal/h m̄ }
coeflv = ctcl/ctcv;
T = (Tvap[nseg-1] + coeflv*Tf*Tliq[nseg] + 11 + qlat[nseg]/ctcv*Tf)/(1 + coeflv*Tf);
until abs(T-Tant) <= 0.001;
end;

```

Procedure segmento_vapor;

```

var yant,nag,nal,nsg,df1dy,adf1,df1dt,cf2dy,df2dy,adf2,bdf2,df2dt,yult:real;
deno,cya,lnyt1,yt1,lnyt2,yt2,xt1,xt2,ty1,ty2,ped,dya,dtā,fln,pnn: real;
ya: array[1..100] of real;
ss,s: integer;

```

```

begin
clrscr;
for i:= 1 to n do
begin
y[i]:= yalim[i,nseg-1];
x[i]:= xalim[i,nseg+1];
end;

```

```

* CALCULO DE LA COMPOSICION Y LA *
* TEMPERATURA DEL LADO DEL VA- *
* POR POR BALANCES DE MASA Y *
* ENERGIA *

```

```

T:=Tvap[nseg-1];      { Vapor }
ctesgral;
propfisicas_gas;
T:=Tliq[nseg+1];     { Lliquido }
ctesgral;
propfisicas_liquido;
ht[m]:=ht[m]+hut[nseg];
if nseg < 2 then caida_de_presion;
coef_de_transf;
kbin[1,3]:=-1.81935+4.4886e-3*T;
kbin[3,1]:=kbin[1,3];
kprom[1,3]:=(kbin[1,3]+kbin[3,1])/2;
deltak[1,3]:=kbin[1,3]-kprom[1,3];
deltak[3,1]:=kbin[3,1]-kprom[1,3];
pnn:=ctgas[2]/ctgas[3];
ta:=tas[nseg];
if (m <= 1) or (ht[m-1]<ht[m]) then ya[nseg]:=xy[2,2];
xy[2,2]:=ya[nseg];
ss:=1;
repeat
  yant:=xy[2,2];
  T:=Tilnseg;
  ctesgral; k:=2; v:=1;
  ctes_a_b; zs;
  coef_de_fugacidad;
  zih; zv:=z; k:=1; v:=2;
  ctes_a_b; zs;
  coef_de_fugacidad;
  zih; zl:=z; s:=1;
  repeat
    xy[1,1]=0;
    if (s <= 1) and (m <= 1) then
      begin
        xa:=xy[2,1];
        while abs(fa(xa))>0.0001 do { Corrige en x amoniaco }
          begin
            xa:=xa-fa(xa)/dfa(xa);
            end;
            xy[2,1]:=xa; xy[2,2]:=xy[2,1]*cfug[2,2]/cfug[1,2];
            end
          else
            begin
              xy[2,1]:=xy[2,2]*cfug[1,2]/cfug[2,2];
              end;
            if xy[2,1]>0.8 then
              begin
                xa:=0.1;
                ta:=tas[nseg];
                while abs(fa(xa))>0.0001 do { Corrige en x amoniaco }
                  begin
                    xa:=xa-fa(xa)/dfa(xa);
                    end;
                    xy[2,1]:=xa;
                    xy[2,2]:=xy[2,1]*cfug[2,2]/cfug[1,2];
                    end;
                    xy[3,1]:=1-(xy[1,1]+xy[2,1]);

```

```

xy[3,2]:=xy[3,1]*cfug[2,3]/cfug[1,3];
xy[1,2]:=1-(xy[2,2]+xy[3,2]);
cya:=1-yalim[2,nseg-1]*ta;
if cya < 0 then ta:=0.5;
yt1:=1-yalim[2,nseg-1]*ta; lny1:=ln(yt1);
xt1:=1-xalim[2,nseg+1]*ta;
yt2:=1-xy[2,2]*ta;
if yt2 < 0 then yt2:=1;
lny2:=ln(yt2); xt2:=1-xy[2,1]*ta;
ty1:=1-ta*(1-yalim[3,nseg-1]);
ty2:=1-ta*(1-xy[3,2]);
nag:=ctgas[2]*ln(yt2/yt1);
nal:=ctliq[2]*ln(xt1/xt2);
f1:=nag-nal;
f2:=ty2*exp(pnn*lny1)-ty1*exp(pnn*lny2);
ped:=cfug[1,2]/cfug[2,2];
df1dy:=-ta*(ctgas[2]/yt2+ctliq[2]/xt2*ped);
adf1:=-ctgas[2]*(xy[2,2]/yt2-yalim[2,nseg-1]/yt1);
df1dt:=adf1-ctliq[2]*(xy[2,1]/xt2-xalim[2,nseg+1]/xt1);
cf2dy:=cfug[2,3]*ped/cfug[1,3];
df2dy:=-ta*cf2dy*exp(pnn*lny1)+ta*pnn*exp((pnn-1)*lny2)*ty1;
adf2:=-((1-xy[3,2])*exp(pnn*lny1)-pnn*yalim[2,nseg-1]*exp((pnn-1)*lny2))*ty2;
bdf2:=(1-yalim[3,nseg-1])*exp(pnn*lny2)+pnn*xy[2,2]*exp((pnn-1)*lny2)*ty1;
df2dt:=adf2+bdf2; deno:=df1dt*df2dy-df1dy*df2dt;
dya:=(f1*df2dt-f2*df1dt)/deno;
xy[2,2]:=xy[2,2]+dya;
dta:=(f1*df2dy-f2*df1dy)/(-deno);
ta:=ta+dta;
if abs(ta)<0.0001 then
begin
convergencia;
end;
if s>35 then
begin
ta:=tas[nseg]; exit;
end;
s:=s+1;
until (abs(f1+f2)<1e-6) and (abs(dta)<1e-6) and (abs(dya)<1e-6);
if abs(ta)>=0.0001 then
begin
nag:=ctgas[2]*ln((1-xy[2,2]*ta)/(1-yalim[2,nseg-1]*ta));
Flux[2,nseg]:=nag/ta;
nsg:=ctgas[3]*ln((1-(1-xy[3,2])*ta)/((1-yalim[3,nseg-1])*ta));
Flux[3,nseg]:=nsg*(ta-1)/ta;
Co:=(cpv[2]*Flux[2,nseg]+cpv[3]*Flux[3,nseg])/ctcv;
Tf:=(exp(Co)-1)/Co; calor_latente; { Qlat= kcal/h m^3 }
coefiv:=ctcl/ctcv;
T:=(Tvap[nseg-1]+coefiv*Tf*Tliq[nseg+1]+qlat[nseg]/ctcv*Tf)/(1+coefiv*Tf);
end;
Ti[nseg]:=T;
if ss>35 then
begin
ta:=tas[nseg]; exit;
end;
ss:=ss+1;
until abs(yant-xy[2,2])<1e-6;

```

```

ya[nseg]: = xy[2,2];
tas[nseg]: = ta; Flux[1,nseg]: = 0;
vapor[nseg]: = vapor[nseg-1]-(flux[2,nseg] + flux[3,nseg])*area*hut[nseg];
for i:= ng to n do
begin
  yalim[i,nseg]: = (yalim[i,nseg-1]*vapor[nseg-1]-flux[i,nseg]*area*hut[nseg])/vapor[nseg];
end;
yalim[1,nseg]: = 1-(yalim[2,nseg] + yalim[3,nseg]);
qva[nseg]: = ctcv*(Tvap[nseg-1]-T)/Tf; {kcal/h m2}
if (nseg<= 1) and (m<= 1) then
begin
  calculo_de_entalpia_vapor_entrada(Tvap[nseg-1]);
  entalp[nseg-1]: = entalpia;
end;
iteracion_de_entalpia_vapor;
pantalla; delay(800); P:= P-cdp; nseg:= nseg + 1;
end;

```

Procedure sistemas;

SELECCION DEL SISTEMA

```

begin
  clrscr;
  nlet:= 5;
  letrero[1]: = ' (1)Metanol - (2)Aire - (3)Agua ';
  letrero[2]: = ' (1)Etanol - (2)Aire - (3)Agua ';
  letrero[3]: = ' (1)Amoniaco - (2)Aire - (3)Agua ';
  letrero[4]: = ' (1)Acetona - (2)Aire - (3)Agua ';
  letrero[5]: = ' Ninguna opción ';
  cca:= 'P'; cas:= ' '; salida:= ' ';
  gotoxy(3,1);
  color(1,4);
  writeln(' Seleccione sistema : ');
  color(7,0);
  for i:= 1 to 5 do
  writeln(letrero[i]);
  write('SELECCIONE SISTEMA CON FLECHAS VERTICALES; ACTIVE CON ENTER ');
  met:= 1;
  color(6,3); gotoxy(1,3 + met);
  write(letrero[met]); color(7,0);
  while cas<>chr(13) do
  begin
    cas:= readkey;
    if cas= chr(0) then
    begin
      cas:= readkey;
      case cas of
        'H': arriba; 'P': abajo;
        else write(chr(7));
      end;
    end;
  end;
  case met of
  1: begin
    ng:= 2; n:= 3;
    comp[1]: = 'Aire'; comp[2]: = 'Metanol'; comp[3]: = 'Agua';
    lectura_datos;
  end;

```

```

2:begin
  ng:= 2; n:= 3;
  comp[1]:= 'Aire'; comp[2]:= 'Etanol'; comp[3]:= 'Agua';
  lectura_datos;
end;
3:begin
  ng:= 2; n:= 3;
  comp[1]:= 'Aire'; comp[2]:= 'Amoniaco'; comp[3]:= 'Agua';
  lectura_datos;
end;
4:begin
  ng:= 2; n:= 3;
  comp[1]:= 'Aire'; comp[2]:= 'Acetona'; comp[3]:= 'Agua';
  lectura_datos;
end;
5:begin
  clrscr; cca:= 'x'; salida:= 'fin'; exit;
end;
end;
end;

```

Procedure principal;

var res:string[2];

 yult:real;

begin

 *SELECCION DE CONDICIONES DE *

 *OPERACION PARA EL DISEÑO *

 clrscr;

 if salida <> 'fin' then

 begin

 res:= ' ';

 while (res <> 'S') and (res <> 's') do

 begin

 clrscr; textcolor(14);

 gotoxy(10,1); write('DATOS REQUERIDOS PARA EL DISEÑO');

 textcolor(15);

 gotoxy(10,5); write('Flujo molar del vapor (kmol/h) : ');

 readln(vap);

 sumacomp:= 0;

 for i:= 1 to n-1 do

 begin

 gotoxy(10,5+i); write('Fracción molar del ',comp[i],' en la alimentación gaseosa : ');

 readln(yalim[i,0]);

 sumacomp:= sumacomp + yalim[i,0]; xyl[i,2]:= yalim[i,0];

 end;

 yalim[n,0]:= 1-sumacomp;

 xy[n,2]:= yalim[n,0];

 gotoxy(10,8); write('Temperatura del vapor alimentado (Celsius) : ');

 readln(Tvap[0]); Tvp[0]:= Tvp[0] + 273.15;

 gotoxy(10,10); write('Proporcionar el flujo molar del '); textcolor(9);

 gotoxy(42,10); write('liquido'); textcolor(15);

 gotoxy(49,10); write(' (kmol/h) : ');

 readln(liquidol[1]);

 sumacomp:= 0;

 for i:= 1 to n-1 do

 begin

 gotoxy(10,10+i); write('Fracción molar del ',comp[i],' en la alimentación liquida : ');

 readln(xalim[i,2]);

```

hut[nseg]: = 0.1;
if (m > 1) and (ht[m] > (ht[m-1]-0.2)) then
begin
  yult: = sqrt(yalim[2,nseg-2]-yalim[2,nseg-1])/(yalim[2,nseg-3]-yalim[2,nseg-2]);
  if abs(yalim[2,nseg-1]-yult) < ysal then
  begin
    hut[nseg]: = (yalim[2,nseg-1]-ysal)*hut[nseg-1]/yult*1.01;
  end;
end;
segmento_vapor;
end;
segmento_liquido;
end
else
begin
  nseg: = 1; m: = m + 1; ht[m]: = 0;
  while altfija > ht[m] do
  begin
    hut[nseg]: = 0.1;
    segmento_vapor;
  end;
  segmento_liquido;
end;
until (abs(ErrorT) < 0.01) and (abs(ErrorX) < 0.001);
textcolor(9);
gotoxy(30,25); write('PARA CONTINUAR PRESIONE CUALQUIER TECLA');
readln;
end;
end;

begin
  (Aquí empieza el programa)
  presentacion;
  salida: = ' ';
  while salida <> 'fin' do
  begin
    nlet: = 8;
    clrscr;
    letrero[1]: = ' DISEÑO DE LA TORRE DE ABSORCION CON ALTURA LIBRE';
    letrero[2]: = ' DISEÑO DE LA TORRE DE ABSORCION CON ALTURA FIJA ';
    letrero[3]: = ' CONSTANTES FISICAS DE EMPAQUES ';
    letrero[4]: = ' CONSTANTES FISICAS DEL LIQUIDO ';
    letrero[5]: = ' CONSTANTES FISICAS DEL VAPOR ';
    letrero[6]: = ' CONSTANTES FISICAS GENERALES ';
    letrero[7]: = ' PARAMETROS BINARIOS ';
    letrero[8]: = ' Regresar a sistema operativo ';
    cca: = 'P'; cas: = ' '; salida: = ' '; gotoxy(31,1);
    color(1,4); writeln(' MENU : '); color(7,0);
    for i: = 1 to 8 do
    writeln(letrero[i]);
    write('SELECCIONE LA OPCION CON FLECHAS VERTICALES; ACTIVE CON ENTER ');
    met: = 1;
    color(6,3);
    gotoxy(1,3 + met); write(letrero[met]);
    color(7,0);
    while cas <> chr(13) do
    begin

```

```
cas:=readkey;
if cas=chr(0) then
begin
cas:=readkey;
case cas of
'H':arriba; 'P':abajo;
else write(chr(7));
end;
end;
end;
case met of
1:begin
altura='libre'; sistemas; principal; salida=' ';
end;
2:begin
altura=' '; sistemas; principal; salida=' ';
end;
3:begin
empaques_;
end;
4:begin
constliq_;
end;
5:begin
constgas_;
end;
6:begin
constant_;
end;
7:begin
comp_bin;
end;
8:begin
clrscr;
textmode(1); gotoxy(14,12); write('FIN DE SESION');
delay(4000); textmode(3); cca:='x'; salida:='fin'; exit;
end;
end;
end;
end.
```