

W. Flores  
A637  
25

**UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA**  
**FACULTAD DE INGENIERIA**  
**ESCUELA DE INGENIERIA QUIMICA**

**Obtención de una Ecuación Empírica para Datos de Referencia de la  
Constante de Equilibrio de Vaporización en Función de las Propiedades  
Reducidas y el Factor de Compresibilidad Crítico**

**TESIS**

**PRESENTADA A LA JUNTA DIRECTIVA DE LA  
FACULTAD DE INGENIERIA DE LA  
UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS  
DE GUATEMALA**

**POR**

**WILLIAM FLORES SAENZ**

**PREVIO A OPTAR AL TITULO DE  
INGENIERO QUIMICO**



**BIBLIOTECA CENTRAL-USAC  
DEPOSITO LEGAL  
PROHIBIDO EL PRESTAMO EXTERNO**

**Guatemala, Septiembre de 1970.**

**PROPIEDAD DE LA UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA  
Biblioteca Central**

DL  
08  
T(15)

JUNTA DIRECTIVA DE LA  
FACULTAD DE INGENIERIA  
DE LA UNIVERSIDAD DE  
SAN CARLOS DE GUATEMALA

Decano -----Ing. Mauricio Castillo C.  
Vocal Primero -----Ing. Marco Antonio Cuevas  
Vocal Segundo -----Ing. Rodolfo González M.  
Vocal Tercero -----Ing. Adolfo Behrens  
Vocal Cuarto -----Br. Alfredo Bonatti  
Vocal Quinto -----Br. Eliseo Osorio R.  
Secretario -----Ing. Héctor Centeno

TRIBUNAL QUE PRACTICO EL EXAMEN  
GENERAL PRIVADO

Decano -----Ing. Amando Vides Tobar  
Examinador -----Ing. Pablo Simón  
Examinador -----Ing. Carlos E. Rivera F.  
Examinador -----Ing. Leonel Flores E.  
Secretario -----Ing. Héctor Centeno

## DEDICO ESTE ACTO

A la memoria de mi madre

ISABEL SAENZ

A mis padres

MARIO FLORES MONTENEGRO  
BLANCA A. DE FLORES

A mis hermanos

MARIOLBINA  
CESAR ADOLFO  
EDGAR ROLANDO  
MARIO ALFONSO  
LILY GRISELDA

A mi familia en general

A mis amigos y compañeros.

## RECONOCIMIENTO

Este trabajo se realizó con los computadores 1620 y 1620/1710 de los Centros de Cálculo de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de San Carlos y de la División de Estadística del Instituto de Nutrición de Centro América y Panamá (INCAP).

Agradezco tal colaboración a la Dirección de Enseñanza del INCAP, así como el irrestricto apoyo del Dr. Miguel A. Guzmán.

Quede expreso también mi agradecimiento hacia los Ings. Carlos Rolz y Carlos Rivera, por las sugerencias pertinentes.

## CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCION	
Sumario .....	11
Consideraciones iniciales .....	13
Naturaleza de la constante de equilibrio de vaporización .....	15
PRIMERA PARTE: Obtención de la Ecuación	
Procedimiento. Desarrollo .....	17
Optimización paramétrica. Fundamentos teóricos .....	18
Estructura de la ecuación .....	22
Programación del método de optimización paramétrica .....	23
SEGUNDA PARTE: Aplicación de la Ecuación Obtenida	
Cálculo de punto de burbuja, punto de rocío y vaporización parcial	25
Información acerca del programa 4 .....	27
Conclusiones .....	29
APENDICES .....	31
TABLAS .....	34
PROGRAMAS .....	45
Operaciones del programa 4 .....	55
GRAFICAS .....	61
Referencias .....	71

## INTRODUCCION

### SUMARIO

Básicamente la exposición se divide en dos partes:

- a) Desarrollo teórico en base al principio de los cuadrados mínimos y metodología para estructurar la ecuación; y
- b) Aplicación de ésta en cálculos de equilibrio de vaporización parcial, puntos de burbuja y puntos de rocío en el proceso de destilación de sistemas de multicomponentes.

Dicha ecuación es una expresión generalizada (función de las propiedades reducidas) de la constante de equilibrio de vaporización,  $K$ , basada estrictamente en los datos totales de referencia disponibles en la tabla 63, Pág. 941, "Chemical Process Principles", tomo II, Hougen, Watson y Ragatz.

Inicialmente se fija la presión reducida y selecciona la naturaleza de la ecuación que mejor ajusta los datos disponibles, en función de la temperatura reducida (factor de compresibilidad crítico: 0.27) y se calculan los parámetros correspondientes —constantes respecto a la temperatura reducida— de acuerdo al principio de cuadrados mínimos. Cada uno de estos parámetros se adaptarán, a su vez, en términos de la presión reducida, en las ecuaciones seleccionadas para el caso. El efecto del factor de compresibilidad crítico se considera independientemente: expresado en función de la temperatura reducida.

En la segunda parte se aplica la ecuación —y su primera derivada respecto a la temperatura— en la solución, por el método de iteración de Newton, de puntos de burbuja, rocío y vaporización parcial a través del programa FORTRAN No. 4. El grado de aproximación de los resultados es aceptable ya que los valores de las temperaturas de burbuja, rocío y vaporización parcial son obtenidos con menos del 1% de desviación, en términos de temperatura absoluta.

## CONSIDERACIONES INICIALES

La importancia de la disposición de la ecuación objetivo se justifica por:

- 1.—La ingente necesidad de calcular a través de la computación electrónica procesos de destilación de multicomponentes en donde  $K$  no es constante como consecuencia de que varíe la temperatura y/o la presión.
- 2.—La no existencia en la literatura técnica específica de una ecuación similar.
- 3.—Ser una ecuación generalizada que predice valores de  $K$  para otros compuestos distintos a los hidrocarburos.
- 4.—La dificultad que entraña —en tiempo de cálculo y exactitud de reproducción— la obtención del valor de  $K$  por los distintos métodos disponibles: cartas, nomogramas, tablas y ecuaciones estructuradas con constantes experimentales.
- 5.—La inmediata disposición de las constantes críticas (temperatura crítica,  $T_c$ ; presión crítica,  $P_c$ ; factor de compresibilidad crítico,  $Z_c$ ) para distintos compuestos en la bibliografía fundamental.





LIBRARY  
UNIVERSITY OF  
MICHIGAN  
ANN ARBOR  
MICHIGAN  
48106-1000  
SERIALS ACQUISITION  
300 N ZEEB RD  
ANN ARBOR MI 48106-1500

## NATURALEZA DE LA CONSTANTE DE EQUILIBRIO DE VAPORIZACION

Para cualquier componente es definida como la razón entre sus correspondientes fracciones molares en las fases gaseosas y líquida, en condición de equilibrio, dependiendo de: la temperatura, la presión y la composición.

Métodos predictivos para calcular las composiciones en todos los tipos de sistemas no han sido obtenidos. Por lo general, se limitan a determinados compuestos hidrocarbonados. El problema estriba, fundamentalmente, en la imposibilidad de disponer de los datos volumétricos suficientes en función de la composición; se acentúa para cálculos de equilibrio de vaporización en o cerca de la región crítica.

La no existencia de un método único se debe a la necesidad de operar con estados hipotéticos de referencia que —aún siendo permisibles termodinámicamente— tendrán propiedades definidas de manera arbitraria. Esto último, a causa del método particular de extrapolación que se aplique.

Según referencia (4): "Correlaciones generalizadas han sido obtenidas para calcular constantes de vaporización basadas en la extrapolación de los estados líquido y vapor a la región ficticia o inestable. La más general de éstas es presentada por Hougen, Watson y Ragatz".

Para tal correlación son básicas las siguientes definiciones arbitrarias de las propiedades termodinámicas de vapores y líquidos en las regiones de estados hipotéticos.

- 1.—Las presiones de vapor son extrapoladas arriba de la crítica por la ecuación generalizada de presión de vapor reducida 14-59 (página 576, Hougen, Watson y Ragatz).

- 2.—El estado líquido de referencia es considerado como un líquido hipotético incomprensible que tiene la presión de vapor del líquido real y un coeficiente de expansión termal igual al del líquido real extrapolado a  $0^{\circ}$  K.
- 3.—La correlación del coeficiente de fugacidad para la fase de vapor fue gráficamente extrapolada, para altas presiones, a temperaturas más bajas que la crítica.

Estas definiciones amplían el concepto de equilibrio de vaporización a otros sistemas distintos al de hidrocarburos. Con respecto a las correlaciones empíricas también logran substancial aproximación las constantes de equilibrio de vaporización ideal de hidrocarburos en las regiones reportadas por datos experimentales.

## PRIMERA PARTE:

### OBTENCION DE LA ECUACION

Es aplicado el "principio de los cuadrados mínimos" y el valor de la constante de equilibrio de vaporización,  $K$ , es predicho en función de la presión reducida ( $Pr$ ), la temperatura reducida ( $Tr$ ) y el factor de compresibilidad crítico ( $Z_c$ ).

#### *Procedimiento*

- I.—Para  $Z_c = 0.27$  considerar, inicialmente,  $Pr$  o  $Tr =$  constante e investigar  $K = f(Tr)$  o  $K = f(Pr)$ , respectivamente. Dicha investigación comprende:
  - i) A partir del tipo de distribución gráfica —en coordenadas ordinarias rectangulares— de la familia de curvas, elección de posibles funciones matemáticas (modelos).
  - ii) Cálculo de parámetros aplicando el principio de los cuadrados mínimos.
- II.—Investigar, del mismo modo, la funcionalidad de cada parámetro con respecto a  $Pr$  o  $Tr$  luego de cambiar su orden de constancia y variación.
- III.—Para  $Z_c \neq 0.27$ , analizar: factor de desviación  $= f(Tr)$  y estructurar la ecuación completa.

## DESARROLLO

I.—Investigación de  $K = f(Tr)$  con  $Pr = \text{constante}$  y  $Z_c = 0.27$ .

Se elige esta alternativa porque las curvas de  $K = f(Tr)$  — para cada valor fijo de  $Pr$  — tienen una distribución más uniforme que  $K = f(Pr)$  (ver Figura 252, Pág. 942, Ref. 1) y, por lo mismo, factible de representar en un patrón funcional común (ver Gráficas 1 y 2).

En el apéndice se listan algunos de los modelos analizados. Inicialmente se da preferencia a aquellos con funcionalidad de tipo exponencial dada la naturaleza de la ecuación original de  $K$  (ec. 8, Hougen, Watson y Ragatz, pág. 940). Fueron examinadas, también, funciones de serie de potencias con variaciones íntimas de estructura. El principal escollo se presentó al analizar algunos modelos no lineares, aunque, en otros, su linealización por sustituciones y/o transformación de sistema de coordenadas fue simple.

El análisis por medio del modelo de Antoine (función de tipo exponencial) se programó a partir de su forma linealizada según referencia (5).

Después de comparar porcentajes de desviación absoluta promedio máximo se elige la siguiente estructura parabólica:

$$Y = A.(X-C)^B + D$$

en donde  $Y$  será sustituido por  $K$  y  $X$  por  $Tr$ .

### OPTIMIZACION PARAMETRICA

#### Fundamentos teóricos

La notación funcional:

$$K_i = f(Tr_i; A, B, \dots)$$

indica dependencia de la constante de equilibrio de vaporización con respecto a la temperatura reducida y los parámetros  $A, B$ , etc. Para el modelo parabólico escogido (a presión reducida constante):

$$K_i = f(Tr_i; A, B, C, D)$$

El principio de los cuadrados mínimos tiene la propiedad —para una serie de datos y estructura funcional determinada— de predecir los valores *únicos* y “más probables”

de los parámetros considerados. En tal sentido, efectuamos el siguiente desarrollo:

En el modelo:

$$K_i = A \cdot (\text{Tri}-C)^B + D$$

tenemos:

- a) Una ecuación no lineal;
- b) Cuatro parámetros cuyo valor se ha de calcular.

En coordenadas logarítmicas se tendrá una línea recta:

$$\ln(K_i-D) = B \cdot \ln(\text{Tri}-C) + \ln A$$

Por analogía, B y  $\ln A$  serán, respectivamente, la pendiente y el intercepto. Así:

$K_i, \text{Tri}$  : valores fijos conocidos (datos) en el análisis.

C, D : valores variables desconocidos (parámetros a determinar)

A, B : valores que serán fijados, automáticamente, por aquellos atribuidos a C y D a través del análisis.

Ahora tenemos sólo dos variables, C y D, cuya interpretación geométrica las define como parámetros de ajuste en el proceso de translación de ejes hacia el "probable" vértice de la curva parabólica.

Puesto que:

$$A, B = f[\ln(\bar{K}_i-D), \ln(\text{Tri}-C)] \quad (1)$$

la notación funcional queda:

$$K_i = f(\text{Tri}; C, D)$$

Aplicando el principio de los cuadrados mínimos:

$$S \equiv \sum_{i=1}^n (K_i - \bar{K}_i)^2$$

en donde:

- $K_i$  : K calculado por el modelo fijado.
- $\bar{K}_i$  : K a partir de datos.
- n : número de datos.
- S : suma de los cuadrados de los residuos.

Diferenciando respecto a cada parámetro e igualando a cero, tenemos:

$$\sum_{i=1}^n (K_i - \bar{K}_i) \cdot (\partial K_i / \partial D) = 0 \quad (2)$$

$$\sum_{i=1}^n (K_i - \bar{K}_i) \cdot (\partial K_i / \partial C) = 0$$

Ambas ecuaciones son funciones implícitas de C y D que requieren para su resolución de un método iterativo. Se usará el método de Newton aplicado a una variable después de fijar el posible valor del parámetro C con el fin de simplificar la ecuación total a obtener.

Los valores probables de C y D — previstos por el examen gráfico de las curvas  $K = f(\text{Tr})$  en coordenadas logarítmicas — serán, aproximadamente, 0.6 para C a cualquier presión reducida y, para D, el correspondiente valor de K (dato) a  $\text{Tr} = 0.6$ . (Ver Gráfs. 3, 4 y 5).

La curva correspondiente a  $\text{Pr} = 2.0$  es la que ajusta los datos con menor exactitud. De ahí que la mayor parte del análisis comparativo se centralizara sobre tal.

El método de Newton requiere de la primera derivada de las funciones dadas por las ecuaciones (2), por lo que obtenemos:

$$\sum_{i=1}^n [(K_i - \bar{K}_i) \cdot (\partial^2 K_i / \partial D^2) + (\partial K_i / \partial D)^2] = 0 \quad (3)$$

$$\sum_{i=1}^n [(K_i - \bar{K}_i) \cdot (\partial^2 K_i / \partial C^2) + (\partial K_i / \partial C)^2] = 0$$

y diferenciando la expresión:

$$K_i = A \cdot (\text{Tri} - C)^B + D$$

obtenemos las correspondientes derivadas parciales respecto a C y D. Ver apéndice 2.

A partir de la relación (1) y usando a Xi e Yi como variables auxiliares, sustituimos:

$$Y_i = \ln (\bar{K}_i - D)$$

$$X_i = \ln (Tr - C)$$

Para una línea recta, aplicando el principio de los cuadrados mínimos, tenemos:

$$\text{Pendiente} = B = (\sum X_i Y_i - \sum X_i \sum Y_i) / (\sum X_i^2 - (\sum X_i)^2)$$

$$\text{Intercepto} = \ln A = (\sum X_i^2 \sum Y_i - \sum X_i \sum X_i Y_i) / (\sum X_i^2 - (\sum X_i)^2)$$

donde:

R = n = número de datos.

$$A = \text{EXP} [(\sum X_i^2 \sum Y_i - \sum X_i \sum X_i Y_i) / (\sum X_i^2 - (\sum X_i)^2)]$$

El denominador de estas expresiones se representará, por simplicidad, con la abreviatura DEN. Las primeras derivadas parciales de A y B con respecto a C y D aparecen en el apéndice 2 y las segundas derivadas en el apéndice 3.

Teniendo las funciones (ecuaciones (2)) y sus respectivas primeras derivadas (ecuaciones (3)) es obvia la aplicación del método iterativo de Newton en el proceso de optimizar el valor respectivo de los parámetros D y C. Ver programas 1 y 2. Con el fin de simplificar la ecuación a estructurar y el proceso en sí, se fija, arbitrariamente, C = 0.58, luego de comparar —con ayuda de los programas 1 y 2— el porcentaje de desviación absoluta máxima promedio producido a distintos valores de C (y el correspondiente valor de D) para cada valor fijo de la presión reducida (ver tabla A). Los valores del parámetro D, así obtenidos, están en la tabla B.

II.—Investigación de A, B, D = f(Pr) con Tr = constante y Zc = 0.27.

Con el propósito de ajustarnos, en lo posible, al principio de los cuadrados mínimos se sigue el siguiente procedimiento:



- Investigar la estructura funcional de  $D = f(\text{Pr})$ , gráfica 6, a partir de los valores de D obtenidos con  $C = 0.58$ ;
- Calcular con dicha ecuación los nuevos valores de D;
- Con éstos y  $C = 0.58$  aplicar el principio de los cuadrados mínimos y obtener los correspondientes valores de A y B;
- Investigar  $A = f(\text{Pr})$ , gráf. 8, y  $B = f(\text{Pr})$ , gráf. 7.

En (a) un polinomio de tercer grado (cuatro parámetros lineares) ajusta los valores de D primitivos (tabla B):

$$D = 2.35793 \times 10^{-2} + \frac{9.58478 \times 10^{-3}}{\text{Pr}} - \frac{2.03111 \times 10^{-5}}{\text{Pr}^2} + \frac{8.00201 \times 10^{-8}}{\text{Pr}^3} \quad (4)$$

Para (b) y (c) ver tabla C.

En (d) se obtuvo (ver tabla D):

$$A = 0.53522 + \frac{3.23351}{\text{Pr}} + \frac{3.29843 \times 10^{-3}}{\text{Pr}^2} - \frac{1.45010 \times 10^{-5}}{\text{Pr}^3} \quad (5)$$

$$B = 1.98673 - 0.22891 \times \text{Pr} - 0.45192 \times \text{Pr}^2 + 0.19077 \times \text{Pr}^3 \quad (6)$$

III.—Para  $Z_c \neq 0.27$  analizar: factor de desviación =  $f(\text{Pr})$  y estructurar la ecuación completa.

Se escoge la ecuación:

$$DD = 2.65473 (1/\text{Tr})^{4.3171} - 2.4$$

donde: DD = factor de desviación para  $Z_c \neq 0.27$ .

DD sólo es función de la temperatura reducida.

Se procedió así:

- Traslado de ejes en el sentido de las ordenadas;
- Transformación a coordenadas logarítmicas;
- Aplicación del principio de los cuadrados mínimos tomando en cuenta sólo los veinticuatro primeros datos. Esto último como consecuencia de eliminar  $DD = -2.4$  — por (a) — para propósitos de ajuste.

## ESTRUCTURA DE LA ECUACION

Por último, la estructura completa de la función representativa de K será:

$$K = A \cdot (\text{Tr}-0.58)^B + D$$

$Z_c = 0.27$

$$A = 0.53522 + \frac{3.23351}{\text{Pr}} + \frac{3.29843 \times 10^{-3}}{\text{Pr}^2} - \frac{1.45010 \times 10^{-5}}{\text{Pr}^3}$$

$$B = 1.98673 - 0.22891 \times \text{Pr} - 0.45192 \times \text{Pr}^2 + 0.19077 \times \text{Pr}^3$$

$$D = 2.35793 \times 10^{-2} + \frac{9.58478 \times 10^{-3}}{\text{Pr}} - \frac{2.03111 \times 10^{-5}}{\text{Pr}^2} + \frac{8.00201 \times 10^{-8}}{\text{Pr}^3}$$

$$K_{Z_c \text{ no igual } 0.27} = K_{Z_c = 0.27} \cdot \frac{DD (Z_c - 0.27)^{10}}{10}$$

$$DD = 2.65473 (1/\text{Tr})^{4.3171} - 2.4$$

### PROGRAMACION DEL METODO DE OPTIMIZACION PARAMETRICA

Los programas 1 y 2 — para D y C, respectivamente — efectúan, substancialmente, los siguientes cálculos:

- 1.—Leen: número de datos, valores de éstos y parámetros C y D (uno constante y el otro variable).
- 2.—Calculan parámetros A y B por aplicación del principio de los cuadrados mínimos.
- 3.—Calculan la correspondiente función y su respectiva derivada e iteran por el método de Newton para obtener D o C.
- 4.—Calculan porcentajes de desviación de K, obtenida por la ecuación propuesta, con respecto a los datos de K disponibles.

Nomenclatura.

Las literales Xi e Yi tienen el significado antedicho.

AX	Tr, dato	PEN	Pendiente
BY	$\bar{K}$ , dato	CON	Intercepto
T1	$\sum X_i Y_i$	P1	$\partial B / \partial D$
T2	$\sum X_i^2$	P2	$\partial B / \partial C$
T3	$\sum X_i$	P3	$\partial A / \partial D$
T4	$\sum Y_i$	P4	$\partial A / \partial C$
D1	$\sum \partial X_i / \partial C$	Q1	$\partial^2 A / \partial C^2$
D2	$\sum \partial^2 X_i / \partial C^2$	Q2	$\partial^2 B / \partial C^2$
D3	$\sum \partial Y_i / \partial D$	Q5	$\partial^2 A / \partial D^2$
D4	$\sum \partial^2 Y_i / \partial D^2$	Q6	$\partial^2 B / \partial D^2$
S1	$\sum X_i (\partial X_i / \partial C)$	RC	$\partial K_i / \partial C$
S2	$\sum X_i (\partial Y_i / \partial D)$	RD	$\partial K_i / \partial D$
S4	$\sum Y_i (\partial X_i / \partial D)$	RCC	$\partial^2 K_i / \partial C^2$
S5	$\sum [X_i (\partial^2 X_i / \partial C^2) + (\partial X_i / \partial C) \cdot (\partial X_i / \partial C)]$	RDD	$\partial^2 K_i / \partial D^2$
S6	$\sum Y_i (\partial^2 X_i / \partial C^2)$	AK	K, calculado
S7	$\sum X_i (\partial^2 Y_i / \partial D^2)$		

$$\frac{\partial X_i}{\partial C} = \frac{1}{\text{Tri-C}} \qquad \frac{\partial Y_i}{\partial D} = \frac{1}{\bar{K}-D}$$

$$\frac{\partial^2 X_i}{\partial C^2} = \frac{1}{(\text{Tri-C})^2} \qquad \frac{\partial^2 Y_i}{\partial D^2} = \frac{1}{(\bar{K}-D)^2}$$

## SEGUNDA PARTE:

### APLICACION DE LA ECUACION OBTENIDA

Se elige el siguiente cálculo:

“Programación FORTRAN del cálculo iterativo de la temperatura para puntos de burbuja, puntos de rocío y vaporización parcial en sistemas de multi-componentes.”

El criterio de convergencia seguido es el de Newton con respecto a una variable:

$$T_{n+1} = T_n - \frac{f(T_n)}{f'(T_n)}$$

Las siguientes ecuaciones pueden verificarse en la ref. (6).

*Cálculo de la temperatura de punto de burbuja.*

$$f(T) = \sum_{i=1}^n K_i \cdot X_{Fi} - 1$$

$X_{Fi}$  = Fracción molar del componente  $i$  en la mezcla.

$$f'(T) = \sum_{i=1}^n X_{Fi} \cdot (\partial K_i / \partial T)_p$$

$K_i$  = Constante de equilibrio de vaporización del componente  $i$ .

Cálculo de la temperatura de punto de rocío.

$$F(T) = \sum_{i=1}^n (XFi/Ki) - 1$$

$$F'(T) = - \sum_{i=1}^n (XFi/Ki^2) \cdot (\partial Ki/\partial T)_p$$

Cálculo de la temperatura en vaporización parcial.

$$P(T) = \sum_{i=1}^n \frac{XFi}{1 - (L/F) (1 - 1/Ki)} - 1$$

$$P'(T) = \sum_{i=1}^n \frac{(L/F) \cdot XFi \cdot (\partial Ki/\partial T)_p}{Ki^2 \cdot [1 - (L/F) (1 - 1/Ki)]^2}$$

Obtención de:  $(\partial Ki/\partial T)_p$

Derivamos con respecto a la temperatura la ecuación disponible de  $K = f(\text{Pr}, \text{Tr}, \text{Zc})$ .

Nota: Las literales C y D no tienen el mismo significado según desarrollo precedente.

Por consiguiente:

A, B, C, D = constantes (no dependen de la temperatura).

$$\frac{Ki}{Zc \text{ no igual } 0.27} = [A \cdot (\text{Tr}-0.58)^B + C] \times 10^{\text{RHO}}$$

- A: Ver ecuación (5).
- B: Ver ecuación (6).
- C: Ver ecuación (4).

$$\text{RHO} = [2.65473 \times (1/\text{Tr})^{4.3171} - 2.4] \times D$$

$$D = Zc - 0.27.$$

$$(\partial Ki/\partial T)_p = - [A \cdot (\text{Tri}-0.58)^B + C] \times 10^{\text{RHO}} \times \ln 10 \times$$

$$D \times 2.65473 \times 4.3171 \times (1/\text{Tri})^{4.3171} \times (1/T) + 10^{\text{RHO}} \times A \times B \times (\text{Tri}-0.58)^{B-1} \times (1/\text{Te})$$

*Información acerca del programa. Posibilidades de operación.*

Por control de los interruptores de programa pueden calcularse cualesquiera de los siguientes casos.

- 1.—Punto de burbuja: temperatura y concentración de la fase de vapor en equilibrio.  
Posición de los interruptores:  
SW1 : on SW2 : on SW3 : on SW4 : indiferente.
- 2.—Punto de rocío: temperatura y concentración de la fase líquida en equilibrio.  
Posición de los interruptores:  
SW1 : on SW2 : off SW3 : on SW4 : indiferente
- 3.—Vaporización parcial: temperatura y concentración de las fases líquida y de vapor en equilibrio.  
Posición de los interruptores:  
SW1 : off SW2 : off SW3 : on SW4 : indiferente
- 4.—Cálculo consecutivo de: punto de burbuja, punto de rocío y vaporización parcial.  
Posición de los interruptores:  
SW1 : off SW2 : on SW3 : off SW4 : off
- 5.—Cálculo consecutivo de: punto de burbuja y punto de rocío.

Posición de los interruptores:

SW1 : on SW2 : on SW3 : off SW4 : on

*Nomenclatura.*

PHI L/F, fracción de líquido separada de la mezcla.

AK K

TC temperatura crítica.

PC presión crítica.

ZC factor de compresibilidad crítico.

T temperatura.

P presión.

Y fracción molar en la fase gaseosa.

X fracción molar en la fase líquida.

*Datos a alimentar.*

- 1.—Número de componentes.
- 2.—Fracción (PHI) de líquido separada.  
Si no hay cálculo de vaporización parcial, *omitir dicho dato* y continuar alimentando los siguientes.
- 3.—Temperatura asumida inicialmente y presión (constante) durante el proceso.
- 4.—Composición inicial (fracción molar) y constantes críticas ( $T_c$ ,  $P_c$  y  $Z_c$ ) de cada componente.

*Comparación de resultados.*

Con tal fin se resolvió el problema presentado por Houggen, Watson y Ragatz (ilustración 2, pág. 944, cap. 22). Ver tablas E y F1.

También se ilustra en las tablas G 1, G 2, etc., los porcentajes de desviación entre valores de referencia (tabla 63, ref. (1)) y valores calculados por la ecuación.

## CONCLUSIONES

- 1.—En los programas 1 y 2 se trabaja con funciones no lineares.
- 2.—Para presiones reducidas de 2.0, 1.0, 0.8, 0.6 y 0.4 se calcularon —con el programa 1 y  $C = 0.58$ — valores de  $D$  a través de una convergencia perceptible. Para otros valores de presión reducida (0.2, 0.1, 0.08, etc.) se obtuvo la respuesta (con tres decimales exactos) forzando la convergencia final.
- 3.—El programa 4 puede ser útil para construir: diagramas T-x-y, de equilibrio, etc.
- 4.—La ecuación obtenida es aplicable sólo dentro del rango de valores limitados por: Pr: 0.01, 2.0; Tr: 0.6, 2.0.
- 5.—En una computadora esta ecuación constituye un medio para iterar en problemas de destilación de multicomponentes cuando varía la presión o la temperatura.
- 6.—Existe la probabilidad que algunos valores de  $K$  calculados por la ecuación obtenida estén más próximos a los valores reales (experimentales) de referencia que aquellos reportados por la tabla 63 en Hougen, Watson y Ragatz. Lo anterior, debido a la distribución periódica de las desviaciones —en sentidos positivo y negativo— obtenida al aplicar el principio de los cuadrados mínimos.
- 7.—Por el principio de los cuadrados mínimos la ecuación más representativa de una serie de datos será aquella cuya suma de los cuadrados de los residuos sea un mínimo. Según este concepto la comparación entre las po-



sibles ecuaciones de adaptación se debe hacer en base a dicha suma. Sin embargo, debido a la constancia del orden de magnitud de las desviaciones en cada ecuación considerada se previó equivalencia entre la suma de los cuadrados de los residuos y el porcentaje de desviación absoluta máxima promedio como base de comparación (ver apéndice 1).

APENDICE 1

Algunos modelos examinados en el análisis comparativo de error  
para  $K = f(\text{Tr})$  a  $\text{Pr} = 2.0$

MODELO	% desviación absoluta máxima promedio
$Y = \text{Exp} (B/X + A)$ .....	46.65
$Y = \text{Exp} (B/X^2 + A)$ .....	24.75
$Y = \text{Exp} (B/X^3 + A)$ .....	36.71
$Y = \text{Exp} (B/(X^2 + X) + A)$ .....	35.56
$Y = \text{Exp} (B/(X^3 + X^2) + A)$ .....	30.87
$Y = \text{Exp} (B.X + A)$ .....	143.86
$Y = (\text{Exp} (X)). B + A$ .....	94.27
de Antoine:	
$Y = \text{Exp} (B + A/(C + X))$ (no linear)	
$\ln Y = (B + A/C) + (B/C). X - (1/C). X. \ln Y$ (linearizada) .....	46.44
$Y = A + B. X^2$ .....	71.11
$Y = A. X + B. X^2$ .....	124.86
$Y = A/X + B. X + C. X^2$ .....	23.55
$Y = A + B. X + C. X^2$ .....	31.19
$Y = A + B. X + C. X^2 + D. X^3$ .....	38.67
$Y = A + B. (X-0.58) + C. (X-0.58)^2$ .....	31.18
$Y = A + B. (X-0.58) + C. (X-0.58)^2 + D. (X-0.58)^3$	42.68
$Y = A + B/X + C/X^2$ .....	250.60
$Y = A + B/X + C/X^2 + D/X^3$ .....	215.73
$Y = A + B/(X-0.58) + C/(X-0.58)^2 + D/(X-0.58)^3$	700.28

APENDICE 2

Primeras derivadas parciales de los parámetros A y B con respecto a C y D.

$$\frac{\partial Ki}{\partial D} = A \cdot (\text{Tri}-C)^B \cdot \ln(\text{Tri}-C) \cdot \frac{\partial B}{\partial D} + (\text{Tri}-C)^B \cdot \frac{\partial A}{\partial D} + 1$$

$$\frac{\partial Ki}{\partial C} = A \cdot \left[ (\text{Tri}-C)^B \cdot \ln(\text{Tri}-C) \cdot \frac{\partial B}{\partial C} \pm B \cdot (\text{Tri}-C)^{(B-1)} \right] + (\text{Tri}-C)^B \cdot \frac{\partial A}{\partial C}$$

$$\frac{\partial^2 Ki}{\partial D^2} = A \cdot \left[ (\text{Tri}-C)^B \cdot \ln(\text{Tri}-C) \cdot \frac{\partial^2 B}{\partial D^2} + (\text{Tri}-C)^B \cdot \left( \ln(\text{Tri}-C) \right)' \left( \frac{\partial B}{\partial D} \right)^2 \right] + 2(\text{Tri}-C)^B \cdot \ln(\text{Tri}-C) \cdot \frac{\partial A}{\partial D} \cdot \frac{\partial B}{\partial D} + (\text{Tri}-C)^B \cdot \frac{\partial^2 A}{\partial D^2}$$

$$\frac{\partial^2 Ki}{\partial C^2} = A \cdot \left[ (\text{Tri}-C)^B \cdot \ln(\text{Tri}-C) \cdot \frac{\partial^2 B}{\partial C^2} \pm 2 \cdot (\text{Tri}-C)^{(B-1)} \cdot \frac{\partial B}{\partial C} + (\text{Tri}-C)^B \cdot \left( \ln(\text{Tri}-C) \right)' \cdot \left( \frac{\partial B}{\partial C} \right)^2 \pm 2 \cdot B \cdot (\text{Tri}-C)^{(B-1)} \cdot \ln(\text{Tri}-C) \cdot \frac{\partial B}{\partial C} \right]$$

$$+ 2 \cdot (\text{Tri}-C)^B \cdot \ln(\text{Tri}-C) \cdot \frac{\partial A}{\partial C} \cdot \frac{\partial B}{\partial C} + A \cdot \left[ B \cdot (B-1) \cdot (\text{Tri}-C)^{(B-2)} \right] \pm 2 \cdot B \cdot (\text{Tri}-C)^{(B-1)} \cdot \frac{\partial A}{\partial C} + (\text{Tri}-C)^B \cdot \frac{\partial^2 A}{\partial C^2}$$

$$\frac{\partial A}{\partial D} = A \cdot \left[ \frac{\sum X_i^2 \sum \frac{\partial Y_i}{\partial D} - \sum X_i \sum X_i \frac{\partial Y_i}{\partial D}}{\text{DEN}} \right]$$

$$\frac{\partial A}{\partial C} = A \cdot \left[ \frac{2 \sum Y_i \sum X_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum X_i \sum Y_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum X_i Y_i \sum \frac{\partial X_i}{\partial C} - \frac{2 \cdot (\sum X_i^2 \sum Y_i - \sum X_i \sum X_i Y_i) \cdot (\sum X_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum X_i \sum \frac{\partial X_i}{\partial C})}{(\text{DEN})^2}}{\text{DEN}} \right]$$

$$\frac{\partial B}{\partial D} = \frac{(R \cdot \sum X_i \frac{\partial Y_i}{\partial D} - \sum X_i \sum \frac{\partial Y_i}{\partial D})}{\text{DEN}}$$

$$\frac{\partial B}{\partial C} = \frac{R \sum Y_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum Y_i \sum \frac{\partial X_i}{\partial C} - \frac{2(R \sum X_i Y_i - \sum X_i \sum Y_i) \cdot (R \sum X_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum X_i \sum \frac{\partial X_i}{\partial C})}{(\text{DEN})^2}}{\text{DEN}}$$

### APENDICE 3

Segundas derivadas parciales de A y B con respecto a C y D.

$$\frac{\partial^2 A}{\partial D^2} = A \cdot \left[ \frac{\sum X_i^2 \sum \frac{\partial^2 Y_i}{\partial D^2} - \sum X_i \sum X_i \frac{\partial^2 Y_i}{\partial D^2}}{DEN} \right] + A \left( \frac{\partial A}{\partial D} \right)^2$$

$$\frac{\partial^2 A}{\partial C^2} = A \cdot \left\{ \frac{2 \sum Y_i \sum \left[ X_i \frac{\partial^2 X_i}{\partial C^2} + \left( \frac{\partial X_i}{\partial C} \right)^2 \right] - \sum X_i \sum Y_i \frac{\partial^2 X_i}{\partial C^2} - \sum Y_i \frac{\partial X_i}{\partial C} \cdot \sum \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum X_i Y_i \sum \frac{\partial^2 Y_i}{\partial C^2} - \sum \frac{\partial X_i}{\partial C} \cdot \sum Y_i \cdot \frac{\partial X_i}{\partial C}}{DEN} \right.$$

$$\left. \frac{2 \cdot (2 \sum Y_i \sum X_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum X_i \sum Y_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum X_i Y_i \sum \frac{\partial X_i}{\partial C}) \cdot (R \sum X_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum X_i \sum \frac{\partial X_i}{\partial C})}{(DEN)^2} \right.$$

$$\left. \frac{2 \left\{ (\sum X_i^2 \sum Y_i - \sum X_i \sum X_i Y_i) \cdot (R \sum \left[ X_i \frac{\partial^2 X_i}{\partial C^2} + \left( \frac{\partial X_i}{\partial C} \right)^2 \right]) - \sum X_i \sum \frac{\partial^2 X_i}{\partial C^2} - \left( \sum \frac{\partial X_i}{\partial C} \right)^2 \right\}}{(DEN)^2} \right. +$$

$$\left. \frac{(R \sum X_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum X_i \sum \frac{\partial X_i}{\partial C}) \cdot (2 \sum Y_i \sum X_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum X_i \sum Y_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum X_i Y_i \sum \frac{\partial X_i}{\partial C})}{(DEN)^2} \right\} +$$

$$\left. \frac{8 \cdot (\sum X_i^2 \sum Y_i - \sum X_i \sum X_i Y_i) \cdot (R \sum X_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum X_i \sum \frac{\partial X_i}{\partial C}) \cdot (R \sum X_i^2 - (\sum X_i)^2) \cdot (R \sum X_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum X_i \sum \frac{\partial X_i}{\partial C})}{(DEN)^4} \right\} + A \cdot \left( \frac{\partial A}{\partial C} \right)^2$$

$$\frac{\partial^2 B}{\partial D^2} = \frac{R \sum X_i \frac{\partial^2 Y_i}{\partial D^2} - \sum X_i \sum \frac{\partial^2 Y_i}{\partial D^2}}{DEN}$$

$$\frac{\partial^2 B}{\partial C^2} = \frac{R \sum Y_i \frac{\partial^2 X_i}{\partial C^2} - \sum Y_i \sum \frac{\partial^2 X_i}{\partial C^2}}{DEN} - \frac{2 \cdot (R \sum Y_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum Y_i \sum \frac{\partial X_i}{\partial C}) \cdot (R \sum X_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum X_i \sum \frac{\partial X_i}{\partial C})}{(DEN)^2}$$

$$\left. \frac{2 \cdot \left\{ (R \sum X_i Y_i - \sum X_i \sum Y_i) \cdot (R \sum \left[ X_i \frac{\partial^2 X_i}{\partial C^2} + \left( \frac{\partial X_i}{\partial C} \right)^2 \right]) - \sum X_i \sum \frac{\partial^2 X_i}{\partial C^2} - \left( \sum \frac{\partial X_i}{\partial C} \right)^2 + (R \sum X_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum Y_i \sum \frac{\partial X_i}{\partial C}) \cdot (R \sum Y_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum X_i \sum \frac{\partial X_i}{\partial C}) \right\}}{(DEN)^2} \right. +$$

$$\left. \frac{8 \cdot (R \sum X_i Y_i - \sum X_i \sum Y_i) \cdot (R \sum X_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum X_i \sum \frac{\partial X_i}{\partial C}) \cdot (R \sum X_i^2 - (\sum X_i)^2) \cdot (R \sum X_i \frac{\partial X_i}{\partial C} - \sum X_i \sum \frac{\partial X_i}{\partial C})}{(DEN)^4} \right\}$$

TABLA A.

Algunos resultados del examen comparativo para fijar el valor del parámetro C. Se emplearon los programas 1 y 2.

Pr	C	D	% desviación máxima		% desviación absoluta máx. promedio
			+	-	
2.0	0.5526	0.0000	+ 13.41	- 16.08	14.75
	0.5995	0.0478	+ 14.57	- 14.97	14.77
	0.6080	0.0437	+ 16.95	- 14.32	15.64
	0.5800	0.0284	+ 14.04	- 15.49	14.77
0.8	0.5332	0.0000	+ 5.94	- 12.13	9.03
	0.5942	0.0440	+ 8.50	- 8.09	8.29
	0.5800	0.0380	+ 8.20	- 3.43	5.81
1.0	0.5263	0.0000	+ 8.02	- 9.48	8.75
	0.5947	0.0435	+ 13.32	- 7.42	10.37
	0.5800	0.0376	+ 10.95	- 8.34	9.65
0.6	0.5292	0.0000	+ 5.38	- 12.53	8.96
	0.5927	0.0440	+ 9.17	- 10.09	9.63
	0.5800	0.0396	+ 6.61	- 4.85	5.73
0.4	0.5391	0.0000	+ 10.64	- 24.36	17.50
	0.5740	0.0401	+ 7.72	- 4.92	6.41
	0.5806	0.0450	+ 7.57	- 5.11	6.25
	0.5800	0.0447	+ 7.57	- 4.87	6.22
0.2	0.5410	0.0000	+ 10.75	- 28.29	19.37
	0.5900	0.0751	+ 5.66	- 7.64	6.65
	0.5800	0.0670	+ 5.00	- 5.23	5.12
0.1	0.5457	0.0000	+ 13.84	- 30.31	22.18
	0.5800	0.1110	+ 10.74	- 6.82	8.78

TABLA B.

Valores del parámetro D (columna I) obtenidos con programa 1 para  $C = 0.58$  y calculados (columna II) por ecuación (4).

Pr	D		% desviación
	I	II	
0.01	0.85902	0.85897	— 0.006
0.02	0.46109	0.46204	0.20
0.04	0.25409	0.25175	— 0.92
0.06	0.18040	0.17805	— 1.30
0.08	0.14275	0.14037	— 1.67
0.1	0.11100	0.11748	5.82
0.2	0.06695	0.07100	6.06
0.4	0.04469	0.04742	6.10
0.6	0.03956	0.03950	— 0.16
0.8	0.03801	0.03553	— 6.53
1.0	0.03763	0.03314	— 11.92
2.0	0.02842	0.02837	— 0.19

TABLA C.

Columna I: Parámetro B obtenido con  $C = 0.58$  y D de columna II, tabla B.

Columna II: Parámetro B calculado de ecuación (6).

Pr	B		% desviación
	I	II	
0.01	1.99435	1.98440	— 0.50
0.02	1.99067	1.98197	— 0.44
0.04	1.98016	1.97686	— 0.17
0.06	1.96915	1.97141	0.11
0.08	1.94784	1.96562	0.91
0.1	1.94721	1.95951	0.63
0.2	1.92603	1.92440	— 0.08
0.4	1.84849	1.83507	— 0.72
0.6	1.73214	1.72790	— 0.24
0.8	1.59661	1.61205	0.97
1.0	1.50337	1.49668	— 0.45
2.0	1.24726	1.24742	0.01

TABLA D.

Columna I: Cálculo de A (programa 3) a partir de C = 0.58 y D de columna II, tabla B.

Columna II: A calculado de ecuación (5).

Pr	A		% desviación
	I	II	
0.01	342.357	342.369	0.004
0.02	168.573	168.644	0.042
0.04	83.609	83.208	- 0.48
0.06	55.369	55.276	- 0.17
0.08	41.449	41.441	- 0.02
0.1	32.531	33.186	2.01
0.2	16.774	16.783	0.06
0.4	8.806	8.639	- 1.89
0.6	5.933	5.933	0.00
0.8	4.546	4.582	0.8
1.0	3.708	3.772	1.73
2.0	2.329	2.153	- 7.57

TABLA E.

Comparación de resultados (columna II) del programa 4 y los de referencia (columna I), ilustración 2, Cap. 22, Pág. 944-6, Hougen, Watson y Ragatz.

Componente	Punto de Burbuja Fracción vapor, y		Punto de Rocío Fracción líquido, x	
	I	II	I	II
Propano	0.480	0.483662	0.109	0.103079
n-Butano	0.370	0.362211	0.331	0.335083
n-Pentano	0.150	0.154126	0.560	0.561892
Temperatura de burbuja	649 °R	649.876 °R	683 °R	686.266 °R
Temperatura de rocío				

TABLA F1.

Componente	Vaporización parcial		Fracción molar vapor, y	
	Fracción molar líquido, x		I	II
	I	II	I	II
Propano	0.160	0.163583	0.353	0.355620
n-Butano	0.390	0.392021	0.412	0.409751
n-Pentano	0.444	0.444396	0.235	0.234626
Temperatura vaporización parcial ...	666 °R	668.122 °R		

TABLA F2

Comparación de resultados (columna II) obtenidos con el programa 4 y los de referencia (columna I), ejemplo 12-5, Pág. 376, Cap. 12, "Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics", Smith y Van Ness.

Cálculo de punto de burbuja

Componente	Fracción molar vapor, y	
	I	II
	Isobutano	0.11
n-Butano	0.36	0.345515
n-Pentano	0.53	0.544363
Temperatura burbuja .....	635 °R	629.54 °R

TABLA F3.

Comparación de resultados (columna II) obtenidos con el programa 4 y los de referencia (columna I), Probs. de Secc. "Hydrocarbon absorption and fractionation process design methods", Págs. 20-22, publicado por Gulf Research & Development Co.

Componente	Cálculo punto burbuja		Cálculo punto rocío	
	Fracción molar vapor, y		Fracción molar líquido, x	
	I	II	I	II
Etano	0.657	0.640324	0.047	0.054911
Propano	0.235	0.237303	0.122	0.126567
n-Butano	0.082	0.089701	0.255	0.269078
n-Pentano	0.026	0.032170	0.576	0.549443
Temperatura burbuja ..	555 °R	559.263 °R		
Temperatura rocío .....			657 °R	653.044 °R



Cálculo vaporización parcial

Componente	Fracción molar líquido, x		Fracción molar vapor, y	
	I	II	I	II
Etano	0.159	0.164287	0.522	0.507137
Propano	0.239	0.237415	0.286	0.287754
n-Butano	0.287	0.285864	0.138	0.142404
n-Pentano	0.315	0.312431	0.054	0.062704
Temperatura vaporización parcial	.....		585 °R	586.731 °R

TABLA F4.

Comparación de resultados (columna II) obtenidos con el programa 4 y los de referencia (columna I), ejemplo 2-3, Págs. 38-39, "Multicomponent Distillation", C. D. Holland.

Componente	Cálculo de vaporización parcial		Fracción molar vapor, y	
	Fracción molar líquido, x		I	II
	I	II	I	II
Etileno	0.012427	0.012872	0.062634	0.060107
Etano	0.020753	0.022312	0.032058	0.073256
Propileno	0.044231	0.045397	0.082478	0.075899
Propano	0.090999	0.093029	0.150671	0.139220
i-Butano	0.203398	0.202471	0.180872	0.186090
n-Butano	0.628193	0.623916	0.442870	0.465426
Temperatura vaporización parcial	660 °R 657.417 °R			

TABLA F5

Comparación de resultados (columna II) obtenidos con el programa 4 y los de referencia (columna I), ejemplo 9-1, Págs. 147-149, "Stagewise Process Design", Henley - Staffin.

Componente	Cálculo de vaporización parcial		Fracción molar vapor, y	
	Fracción molar líquido, x		I	II
	I	II	I	II
Propano	0.07	0.070294	0.29	0.268329
Butano	0.18	0.180111	0.32	0.312704
Pentano	0.31	0.308402	0.23	0.252384
Hexano	0.44	0.441190	0.16	0.166585
Temperatura vaporización parcial	660 °R 661.150 °R			

TABLA G1.

Cálculo de  $\bar{K}$  por ecuación de  $K = f(\text{Tr}, \text{Pr})$  a  $Z_c = 0.27$ , y comparación respecto a  $K$  de tabla 63, Hougen, Watson y Ragatz.

Tr	Pr = 0.01			Pr = 0.02		
	$\bar{K}$	K	% desviación	$\bar{K}$	K	% desviación
0.60	1.00	1.00416	0.42	0.53	0.53423	0.79
0.62	1.49	1.43460	-3.71	0.79	0.74780	-5.34
0.64	2.20	2.14644	-2.43	1.12	1.10055	-1.73
0.66	3.13	3.13784	0.25	1.59	1.59145	0.09
0.68	4.30	4.40754	2.50	2.15	2.21976	3.24
0.70	5.65	5.95456	5.39	2.85	2.98494	4.73
0.72	7.25	7.77810	7.28	3.60	3.88653	7.95
0.74	9.20	9.87751	7.36	4.55	4.92415	8.22
0.76	11.40	12.25219	7.47	5.70	6.09747	6.97
0.78	14.00	14.90166	6.44	7.00	7.40620	5.80
0.80	16.70	17.82545	6.73	8.50	8.85009	4.11
0.85	25.00	26.33251	5.33	12.80	13.04965	1.95
0.90	35.00	36.54615	4.41	17.90	18.08941	1.05
0.95	47.00	48.46182	3.11	23.40	23.96678	2.42
1.00	62.00	62.07567	0.12	30.00	30.67957	2.26
1.10	93.50	94.38480	0.94	45.50	46.60399	2.42
1.20	134.00	133.45081	-0.40	67.00	65.84970	-1.71
1.30	184.00	179.25508	-2.57	90.00	88.40626	-1.77
1.40	242.00	231.78184	-4.22	118.00	114.26460	-3.16
1.50	305.00	291.01743	-4.58	150.00	143.41699	-4.38
1.60	380.00	356.94977	-6.06	183.00	175.85661	-3.90
1.70	445.00	429.56809	-3.46	220.00	211.57733	-3.82
1.80	517.00	508.86262	-1.57	254.00	250.57361	-1.34
1.90	590.00	594.82445	0.81	290.00	292.84041	0.97
2.00	670.00	687.44540	2.60	330.00	338.37309	2.53

TABLA G2

Tr	Pr = 0.04			Pr = 0.06		
	$\bar{K}$	K	% desviación	$\bar{K}$	K	% desviación
0.60	0.285	0.28809	1.08	0.200	0.20272	1.36
0.62	0.41	0.39508	-3.63	0.295	0.27496	-6.79
0.64	0.62	0.57135	-7.84	0.425	0.39366	-7.37
0.66	0.85	0.81624	-3.97	0.583	0.55825	-4.24
0.68	1.10	1.12927	2.66	0.770	0.76237	-0.21
0.70	1.43	1.59010	5.60	1.000	1.02371	2.37
0.72	1.87	1.95844	4.72	1.29	1.32405	2.65
0.74	2.40	2.47404	3.08	1.62	1.66918	3.03
0.76	2.98	3.05671	2.57	2.00	2.05893	2.94
0.78	3.59	3.70625	3.23	2.41	2.49316	3.45
0.80	4.25	4.42251	4.05	2.84	2.97172	4.63
0.85	6.43	6.50409	1.15	4.17	4.36133	4.58
0.90	8.90	8.99977	1.12	5.93	6.02570	1.61
0.95	11.80	11.90790	0.91	7.85	7.96349	1.44
1.00	15.00	15.22712	1.51	10.10	10.17357	0.72
1.10	23.60	23.09408	-2.14	15.30	15.40674	0.69
1.20	33.00	32.59251	-1.23	21.80	21.71854	-0.37
1.30	44.00	43.71574	-0.64	29.50	29.10355	-1.34
1.40	57.00	56.45814	-0.95	38.20	37.55716	-1.68
1.50	72.10	70.81483	-1.78	48.00	47.07539	-1.92
1.60	89.00	86.78151	-2.49	59.00	57.65475	-2.28
1.70	107.00	104.35433	-2.47	72.00	69.29209	-3.76
1.80	126.00	123.52931	-1.96	84.00	81.98460	-2.39
1.90	146.00	144.30479	-1.16	96.50	95.72968	-0.79
2.00	167.00	166.67634	-0.19	110.00	110.52497	0.47

TABLA G3.

Tr	Pr = 0.08			Pr = 0.1		
	$\bar{K}$	K	% desviación	$\bar{K}$	K	% desviación
0.60	0.16	0.15929	-0.43	0.13	0.13300	2.30
0.62	0.23	0.21439	-6.78	0.19	0.17793	-6.34
0.64	0.33	0.30467	-7.67	0.27	0.25133	-6.91
0.66	0.467	0.42961	-8.00	0.37	0.35270	-4.67
0.68	0.60	0.58888	-1.85	0.49	0.48173	-1.68
0.70	0.79	0.78220	-0.98	0.64	0.63816	-0.28
0.72	0.98	1.00937	2.99	0.84	0.82178	-2.16
0.74	1.21	1.27021	4.97	1.02	1.03243	1.21
0.76	1.48	1.56455	5.71	1.26	1.26997	0.79
0.78	1.80	1.89227	5.12	1.49	1.53425	2.97
0.80	2.15	2.25325	4.80	1.70	1.82518	7.36
0.85	3.34	3.30048	-1.18	2.70	2.66839	-1.17
0.90	4.80	4.55343	-5.13	3.70	3.67611	-0.64
0.95	6.30	6.01089	-4.58	4.80	4.84718	0.98
1.00	7.90	7.67184	-2.88	6.07	6.18067	1.82
1.10	11.60	11.60078	0.00	9.10	9.33161	2.54
1.20	16.40	16.33426	-0.40	13.30	13.12333	-1.32
1.30	22.10	21.86741	-1.05	17.90	17.55124	-1.94
1.40	28.80	28.19611	-2.09	23.40	22.61150	-3.36
1.50	36.00	35.31681	-1.89	29.00	28.30078	-2.41
1.60	44.70	43.22636	-3.29	34.80	34.61613	-0.52
1.70	53.50	51.92198	-2.94	40.30	41.55496	3.11
1.80	62.50	61.40112	-1.75	46.30	49.11489	6.07
1.90	72.00	71.66150	-0.47	52.70	57.29379	8.71
2.00	82.00	82.70100	0.85	60.00	66.08966	10.14

TABLA G4.

Tr	Pr = 0.2			Pr = 0.4		
	$\bar{K}$	K	% desviación	$\bar{K}$	K	% desviación
0.60	0.078	0.08002	2.59	0.0520	0.05401	3.87
0.62	0.110	0.10525	-4.31	0.0743	0.07092	-4.53
0.64	0.150	0.14574	-2.83	0.102	0.09689	-5.00
0.66	0.206	0.20101	-2.41	0.138	0.13128	-4.86
0.68	0.275	0.27075	-1.54	0.180	0.17372	-3.48
0.70	0.360	0.35470	-1.47	0.230	0.22391	-2.64
0.72	0.455	0.45267	-0.51	0.281	0.28161	0.21
0.74	0.560	0.56450	0.80	0.341	0.34664	1.65
0.76	0.690	0.69005	0.00	0.408	0.41883	2.65
0.78	0.835	0.82920	-0.69	0.480	0.49805	3.76
0.80	1.000	0.98183	-1.81	0.600	0.58418	-2.63
0.85	1.43	1.42182	-0.57	0.820	0.82904	1.10
0.90	1.98	1.94423	-1.80	1.15	1.11500	-3.04
0.95	2.56	2.54801	-0.46	1.48	1.44091	-2.64
1.00	3.20	3.23227	1.00	1.82	1.80583	-0.77
1.10	4.65	4.83924	4.06	2.58	2.64955	2.69
1.20	6.90	6.75997	-2.02	3.65	3.64083	-0.25
1.30	9.30	8.99031	-3.32	4.90	4.77543	-2.54
1.40	11.90	11.52676	-3.13	6.30	6.04982	-3.97
1.50	14.60	14.36631	-1.60	7.75	7.46105	-3.72
1.60	17.40	17.50634	0.61	9.35	9.00652	-3.67
1.70	20.50	20.94450	2.16	10.90	10.68398	-1.98
1.80	23.90	24.67870	3.25	12.40	12.49139	0.73
1.90	27.20	28.70701	5.54	14.00	14.42693	3.04
2.00	31.00	33.02769	6.54	15.60	16.48895	5.69

TABLA G5

Pr = 0.6

Pr = 0.8

Tr	$\bar{K}$	K	% desviación	$\bar{K}$	K	% desviación
0.60	0.045	0.04639	3.09	0.045	0.04390	-2.43
0.62	0.065	0.06230	-4.14	0.064	0.06110	-4.52
0.64	0.088	0.08543	-2.91	0.0875	0.08467	-3.22
0.66	0.118	0.11501	-2.53	0.114	0.11367	-0.28
0.68	0.152	0.15053	-0.96	0.146	0.14749	1.02
0.70	0.193	0.19164	-0.70	0.184	0.18574	0.94
0.72	0.239	0.23807	-0.38	0.227	0.22811	0.49
0.74	0.289	0.28960	0.21	0.274	0.27436	0.13
0.76	0.350	0.34605	-1.12	0.321	0.32430	1.02
0.78	0.414	0.40726	-1.62	0.373	0.37776	1.27
0.80	0.480	0.47310	-1.43	0.435	0.43459	-0.09
0.85	0.660	0.65719	-0.42	0.600	0.59069	-1.55
0.90	0.860	0.86794	0.92	0.785	0.76559	-2.47
0.95	1.07	1.10416	3.19	0.965	0.95811	-0.71
1.00	1.31	1.36483	4.18	1.16	1.16725	0.62
1.10	1.83	1.95638	6.90	1.54	1.63238	5.99
1.20	2.50	2.63718	5.48	2.00	2.15586	7.79
1.30	3.25	3.40304	4.70	2.62	2.73384	4.34
1.40	4.13	4.25055	2.91	3.38	3.36321	-0.49
1.50	5.20	5.17686	-0.44	4.16	4.04145	-2.84
1.60	6.50	6.17954	-4.93	5.00	4.76641	-4.67
1.70	7.60	7.25647	-4.52	5.80	5.53625	-4.54
1.80	8.62	8.40578	-2.48	6.58	6.34937	-3.50
1.90	9.60	9.62579	0.26	7.30	7.20436	-1.31
2.00	10.60	10.91502	2.97	8.05	8.09996	0.62

TABLA G6

Tr	Pr = 1.0			Pr = 2.0		
	$\bar{K}$	K	% desviación	$\bar{K}$	K	% desviación
0.60	0.0445	0.04396	-1.19	0.048	0.04474	-6.78
0.62	0.0635	0.06366	0.25	0.0665	0.06722	1.08
0.64	0.087	0.08911	2.43	0.089	0.09278	4.25
0.66	0.113	0.11923	5.51	0.116	0.12058	3.95
0.68	0.145	0.15335	5.76	0.149	0.15017	0.78
0.70	0.180	0.19107	6.15	0.186	0.18127	-2.53
0.72	0.220	0.23204	5.47	0.230	0.21369	-7.09
0.74	0.264	0.27604	4.56	0.274	0.24727	-9.75
0.76	0.313	0.32286	3.15	0.322	0.28191	-12.44
0.78	0.364	0.37235	2.29	0.370	0.31752	-14.18
0.80	0.420	0.42435	1.03	0.420	0.35403	-15.70
0.85	0.581	0.56467	-2.81	0.570	0.44881	-21.26
0.90	0.720	0.71856	-0.19	0.680	0.54806	-19.40
0.95	0.883	0.88491	0.21	0.831	0.65123	-21.63
1.00	1.000	1.06283	6.28	0.870	0.75792	-12.88
1.10	1.28	1.45066	13.33	1.000	0.98062	-1.93
1.20	1.67	1.87754	12.42	1.15	1.21424	5.58
1.30	2.11	2.34015	10.90	1.40	1.45741	4.10
1.40	2.80	2.83588	1.28	1.67	1.70910	2.34
1.50	3.28	3.36263	2.51	2.00	1.96852	-1.57
1.60	4.00	3.91864	-2.03	2.35	2.23502	-4.89
1.70	4.70	4.50242	-4.20	2.68	2.50807	-6.41
1.80	5.36	5.11271	-4.61	3.03	2.78723	-8.01
1.90	6.00	5.74837	-4.19	3.39	3.07211	-9.37
2.00	6.60	6.40843	-2.90	3.74	3.36238	-10.09

```

C      PROGRAMA 1
C      OPTIMIZACION PARAMETRICA DE PARAMETRO D

      DIMENSION AX(25),BY(25)
      READ 1,N
      DO 2 I=1,N
2      READ 40,AX(I),BY(I)
      READ 40,C,D
400    T1=0.0
      T2=0.0
      T3=0.0
      T4=0.0
      D1=0.0
      D3=0.0
      D4=0.0
      S1=0.0
      S2=0.0
      S4=0.0
      S7=0.0
      IF(D)36,37,38
37     AXD=0.0
      UNO=0.0
      GO TO 39
36     AXD=1.0
      UNO=-1.0
      GO TO 39
38     AXD=-1.0
      UNO=1.0
39     IF(C)46,47,48
47     BXC=0.0
      GO TO 49
46     BXC=1.0
      GO TO 49
48     BXC=-1.0
49     DO 3 I=1,N
      XX=ABS(AX(I)-C)
      X=LOG(XX)
      YY=ABS(BY(I)-D)
      Y=LOG(YY)
      T1=T1+X*Y
      T2=T2+X*X
      T3=T3+X
      T4=T4+Y
      D3=D3+AXD/YY
      D4=D4-1.0/(YY*YY)
      S2=S2+AXD*X/YY
3     S7=S7-X/(YY*YY)
      R=N
      DEN=R*T2-T3*T3
      PEN=(R*T1-T3*T4)/DEN
      CON=(T2*T4-T3*T1)/DEN
      CON=EXP(CON)
      P1=(R*S2-T3*D3)/DEN
      P3=((T2*D3-T3*S2)/DEN)*CON

```



```

RD=0.0
DO 4 I=1,N
XX=ABS(AX(I)-C)
X=LOG(XX)
W=XX**PEN
AK=CON*W+D
WA=W*X
4 RD=RD+(CON*WA*P1+W*P3+UNO)*(AK-BY(I))
RD=2.0*RD
ARD=ABS(RD)
11 IF(ARD-1.E-3)10,10,11
Q5=CON*(T2*D4-T3*S7)/DEN+CON*P3*P3
Q6=(R*S7-T3*D4)/DEN
RDD=0.0
DO 6 I=1,N
XX=ABS(AX(I)-C)
X=LOG(XX)
W=XX**PEN
WA=W*X
BB1=CON*(WA*Q6+WA*X*P1*P1)
BB2=2.0*WA*P3*P1+W*Q5
RD1=CON*WA*P1+W*P3+UNO
RD2=BB1+BB2
6 RDD=RDD+2.0*(AK-BY(I))*RD2+2.0*RD1*RD1
PRINT 22,C,D,RD,RDD
D=D-RD/RDD
GO TO 400
10 PRINT 24,C,D,RD
1 FORMAT(12)
40 FORMAT(2F10.6)
22 FORMAT(2F10.6,2E20.5)
24 FORMAT(2F10.6,E20.5)
END

```

C PROGRAMA 2  
C OPTIMIZACION PARAMETRICA DE PARAMETRO C

DIMENSION AX(25),BY(25)

READ 1,N

DO 2 I=1,N

2 READ 8,AX(I),BY(I)

READ 8,C,D

500 T1=0.0

T2=0.0

T3=0.0

T4=0.0

D1=0.0

D2=0.0

S1=0.0

S3=0.0

S4=0.0

S5=0.0

S6=0.0

IF(D)36,37,38

37 AXD=0.0

UNO=0.0

GO TO 39

36 AXD=1.0

UNO=-1.0

GO TO 39

38 AXD=-1.0

UNO=1.0

39 IF(C)46,47,48

47 BXC=0.0

GO TO 49

46 BXC=1.0

GO TO 49

48 BXC=-1.0

49 DO 3 I=1,N

XX=ABS(AX(I)-C)

X=LOG(XX)

YY=ABS(BY(I)-D)

Y=LOG(YY)

T1=T1+X\*Y

T2=T2+X\*X

T3=T3+X

T4=T4+Y

D1=D1+BXC/XX

D2=D2-1.0/(XX\*XX)

S1=S1+BXC\*X/XX

S3=S3+AXD\*BXC/(XX\*YY)

S4=S4+BXC\*Y/XX

S5=S5+(1.0-X)/(XX\*XX)

3 S6=S6-Y/(XX\*XX)

R=N

DEN=R\*T2-T3\*T3

PEN=(R\*T1-T3\*T4)/DEN

Q5=T2\*T4-T3\*T1

```

CON=Q5/DEN
CON=EXP(CON)
Q6=R*S1-T3*D1
Q2=R*S4-T4*D1
P2=Q2/DEN-2.0*PEN*Q6/DEN
Q1=2.0*T4*S1-T3*S4-T1*D1
P4=CON*(Q1/DEN-2.0*Q5*Q6/(DEN*DEN))
RC=0.0
DO 4 I=1,N
XX=ABS(AX(I)-C)
X=LOG(XX)
W=XX**PEN
AK=CON*W+D
WA=W*X
WW=XX**(PEN-1.0)
4 WWA=PEN*WW
RC=RC+(CON*(WA*P2+BXC*WWA)+W*P4)*(AK-BY(I))
RC=2.0*RC
11 IF(ABS(RC)-1.E-3)10,10,11
A1=(2.0*T4*S5-T3*S6-S4*D1-T1*D2-D1*S4)/DEN
A2=2.0*(Q1*Q6+Q5*(R*S5-T3*D2-D1*D1)+Q6*Q1)/(DEN*DEN)
Q1=CON*(A1-A2+8.0*Q5*Q6*Q6/(DEN*DEN*DEN))+CON*P4*P4
A1=(R*S6-T4*D2)/DEN-2.0*Q2*Q6/(DEN*DEN)
A2=2.0*((R*T1-T3*T4)*(R*S5-T3*D2-D1*D1)+Q6*Q2)/(DEN*DEN)
Q2=A1-A2+8.0*PEN*Q6*Q6/(DEN*DEN)
RCC=0.0
DO 6 I=1,N
XX=ABS(AX(I)-C)
W=XX**PEN
X=LOG(XX)
AK=CON*W+D
WA=W*X
WW=XX**(PEN-1.0)
WWA=PEN*WW
WWB=PEN*(PEN-1.0)*(XX**(PEN-2.0))
A1=CON*(WA*Q2+2.0*BXC*WW*P2+WA**X*P2*P2+2.0*BXC*WWA**X*P2)
A2=2.0*WA*P4*P2+CON*WWB+2.0*BXC*WWA*P4+W*Q1
6 RCC=RCC+2.0*(A1+A2)*(AK-BY(I))+2.0*RC1*RC1
PRINT 22,C,D,RC,RCC
C=C-RC/RCC
GO TO 500
10 PRINT 13,C,D,RC
1 FORMAT(12)
8 FORMAT(2F10.6)
22 FORMAT(2F10.6,2E20.5)
13 FORMAT(2F10.6,E20.5)
END

```

```

C      PROGRAMA 3
C      CALCULO PARAMETROS A Y B POR METODO DE CUADRADOS MINIMOS

      DIMENSION AX(25),BY(25)
      READ 1,N
      DO 2 I=1,N
2      READ 8,AX(I),BY(I)
      READ 8,C,D
      T1=0.0
      T2=0.0
      T3=0.0
      T4=0.0
      DO 3 I=1,N
      XX=ABS(AX(I)-C)
      X=LOG(XX)
      YY=ABS(BY(I)-D)
      Y=LOG(YY)
      T1=T1+X*Y
      T2=T2+X*X
      T3=T3+X
      T4=T4+Y
3      R=N
      DEN=R*T2-T3*T3
      PEN=(R*T1-T3*T4)/DEN
      CON=(T2*T4-T3*T1)/DEN
      CON=EXP(CON)
      PRINT 10,PEN,CON
      PRINT 8,C,D
      DO 7 I=1,N
      XX=ABS(AX(I)-C)
      AK=CON*(XX**PEN)+D
      Q2=(AK-BY(I))*100.0/BY(I)
7      PRINT 9,BY(I),AK,Q2
1      FORMAT(I2)
8      FORMAT(2F10.5)
10     FORMAT(2E20.5)
9      FORMAT(3F10.5)
      END

```

C PROGRAMA 4  
 C CALCULO PUNTO BURBUJA PUNTO ROCIO VAPORIZACION PARCIAL

```

DIMENSION XF(10),TC(10),PC(10),ZC(10),A(10),B(10)
DIMENSION D(10),C(10),AK(10),Y(10),X(10)
READ 1,N
IF(SENSE SWITCH 1)345,343
343 READ 4,34,PHI
345 READ 4,T,P
L=1
DO 3 I=1,N
READ 2,XE(I),TC(I),PC(I),ZC(I)
PR=P/PC(I)
A(I)=0.53522+3.2335/PR+3.29843E-03/(PR*PR)-1.4501E-05/(PR*PR*PR)
B(I)=1.98673-0.22891*PR-0.45192*PR*PR+0.19077*PR*PR*PR
D(I)=ZC(I)-0.27
C(I)=2.36E-02+9.58E-03/PR-2.03E-05/(PR*PR)+8.0E-06/(PR*PR*PR)
3 IF(SENSE SWITCH 2)616,29
616 PRINT 201
PRINT 1313
29 DO 5 I=1,N
AK(I)=A(I)*((T/TC(I)-0.58)**B(I))+C(I)
CORR=(2.655*((TC(I)/T)**4.317)-2.4)*D(I)
5 AK(I)=AK(I)*(10.**CORR)
IF(SENSE SWITCH 2)555,6117
6117 GO TO (6116,555,555),L
6116 IF(SENSE SWITCH 1)61,239
239 L=2
GO TO 238
555 RES=.0
GO TO (21,22,23),L
21 DO 6 I=1,N
Y(I)=AK(I)*XF(I)
6 RES=RES+Y(I)
GO TO 500
22 DO 9 I=1,N
X(I)=XF(I)/AK(I)
9 RES=RES+X(I)
GO TO 500
23 DO 10 I=1,N
Y(I)=XF(I)/(1.-PHI*(1.-1./AK(I)))
10 RES=RES+Y(I)
500 RES=RES-1.0
IF(ABS(RES)-1.E-5)7,7,8
8 DRES=0.0
DO 11 I=1,N
ALPHA=A(I)*((T/TC(I)-0.58)**B(I))+C(I)
ARA=A(I)*B(I)*((T/TC(I)-0.58)**(B(I)-1.0))/TC(I)
THETA=2.655*((TC(I)/T)**4.317)
RHO=(THETA-2.4)*D(I)
BETHA=10.0**RHO
ABA=-4.317*THETA*BETHA*D(I)*LOG(10.0)/T
DERIV=ALPHA*ABA+BETHA*ARA
GO TO (31,32,33),L
31 DRES=DRES+DERIV*XF(I)
GO TO 11

```

```

32 DRES=DRES-deriv*XF(1)/(AK(1)**2)
GO TO 11
33 DRES=DRES+XF(1)*(PHI/(AK(1)**2))*deriv/((1.-PHI*(1.-1./AK(1)))**2)
11 CONTINUE
PRINT 13,T,RES
T=T-RES/DRES
GO TO 29
7 GO TO (41,41,42),L
41 SUM=0.0
GO TO (51,52),L
51 PRINT 26
DO 40 I=1,N
PRINT 50,I,Y(I),AK(I)
40 SUM=SUM+Y(I)
GO TO 92
52 PRINT 27
DO 90 I=1,N
PRINT 50,I,X(I),AK(I)
90 SUM=SUM+X(I)
92 PRINT 80,SUM
GO TO 700
42 PRINT 28
DO 93 I=1,N
X(I)=Y(I)/AK(I)
93 PRINT 94,I,X(I),Y(I),AK(I)
700 PRINT 60,T,RES
IF(SENSE SWITCH 3)63,617
617 GO TO (61,62,63),L
61 PRINT 125
PRINT 1313
GO TO 131
62 IF(SENSE SWITCH 4)63,238
238 PRINT 126
PRINT 1313
131 L=L+1
GO TO 555
63 PRINT 127
1 FORMAT(12)
434 FORMAT(F10.4)
4 FORMAT(2F10.3)
2 FORMAT(F10.4,3F10.3)
1313 FORMAT(14X,11HTEMPÉRATURA,14X,19HFUNCION CONVERGENTE/)
201 FORMAT(///23X,27HCALCULO TEMPÉRATURA BURBUJA///)
13 FORMAT(13X,F10.3,13X,E20.8)
25 FORMAT(//12X,10HCOMPONENTE,11X,16HFRACC. MOL. VAP.,11X,1HK/)
50 FORMAT(16X,12,16X,F10.6,10X,F10.4)
80 FORMAT(13X,21HSUMA FRACCION MOLAR=,F10.6)
60 FORMAT(//5X,13HTEMP. FINAL=,F10.3,5X,14HCONVERGENCIA=,E20.8)
126 FORMAT(///16X,40HCALCULO TEMPÉRATURA VAPORIZACION PARCIAL///)
27 FORMAT(//12X,10HCOMPONENTE,11X,16HFRACC. MOL. LIQ.,11X,1HK/)
125 FORMAT(///24X,25HCALCULO TEMPÉRATURA ROCIO///)
28 FORMAT(//9X,5HCOMP.,8X,12HF. MOL. LIQ.,8X,12HF. MOL. VAP.,8X,1HK/)
94 FORMAT(10X,12,8X,F10.6,11X,F10.6,5X,F10.4)
127 FORMAT(///22X,29HPROBLEMA PROPUESTO FINALIZADO)
STOP
END

```

SECRET

CONFIDENTIAL (TOP SECRET) (S) (SI) (SM) (SS) (TS) (TT) (VS) (VT) (VS) (VT)

SECRET  
CONFIDENTIAL  
TOP SECRET

SECRET

SECRET

SECRET

SECRET

SECRET

SECRET

SECRET

SECRET

SECRET

SECRET

SECRET

SECRET

SECRET

SECRET

SECRET

SECRET

SECRET

SECRET

SECRET

SECRET

CONFIDENTIAL

TOP SECRET

SECRET  
CONFIDENTIAL  
TOP SECRET

X

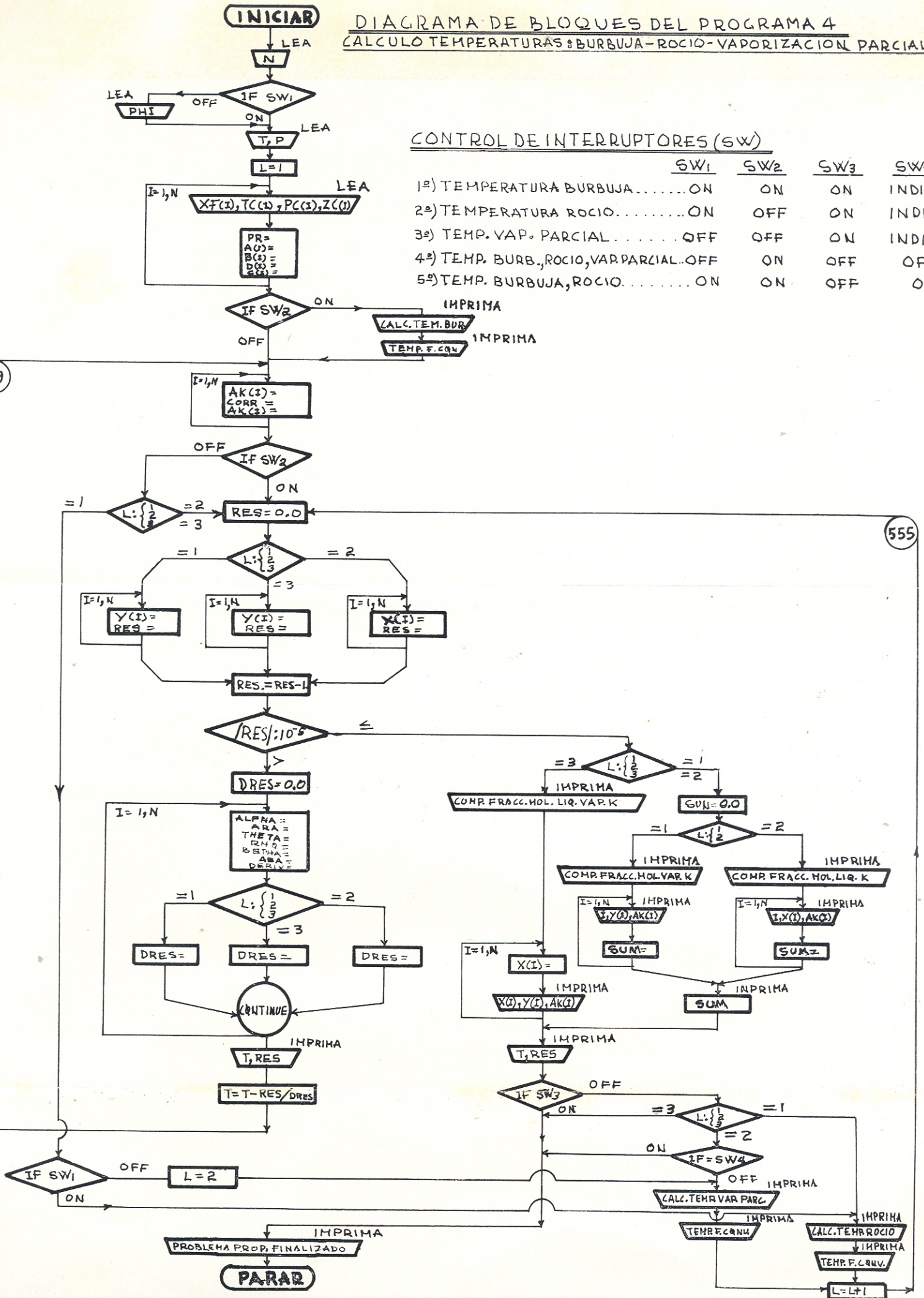
**DIAGRAMA DE BLOQUES DEL PROGRAMA 4**  
**CALCULO TEMPERATURAS BURBUJA-ROCIO-VAPORIZACION PARCIAL**

CONTROL DE INTERRUPTORES (SW)

	SW1	SW2	SW3	SW4
1ª) TEMPERATURA BURBUJA.....	ON	ON	ON	INDIF.
2ª) TEMPERATURA ROCIO.....	ON	OFF	ON	INDIF.
3ª) TEMP. VAP. PARCIAL.....	OFF	OFF	ON	INDIF.
4ª) TEMP. BURB., ROCIO, VAR. PARCIAL..	OFF	ON	OFF	OFF.
5ª) TEMP. BURBUJA, ROCIO.....	ON	ON	OFF	ON

29

555





OPERACIONES DEL PROGRAMA 4

LOAD SUBROUTINES  
PDC FIXED FMT SUBROUTNS 11/63  
LOAD DATA

CALCULO TEMPERATURA BURBUJA

TEMPERATURA	FUNCION CONVERGENTE
640.000	-.75000800E-01
650.076	.15522000E-02

COMPONENTE	FRACC. MOL. VAP.	K
1	.483662	1.9346
2	.362211	.9055
3	.154126	.4403
SUMA FRACCION MOLAR=	1.000000	

TEMP. FINAL= 649.876      CONVERGENCIA= .60000000E-06

PROBLEMA PROPUESTO FINALIZADO

STOP 0000

LOAD SUBROUTINES  
PDQ FIXED FMT SUBROUTNS 11/63  
LOAD DATA

CALCULO TEMPERATURA ROCIO

TEMPERATURA	FUNCION CONVERGENTE
640.000	.50085130E 00
674.082	.10373710E 00
685.381	.70279000E-02
686.262	.37500000E-04

COMPONENTE	FRACC. MOL. LIQ.	K
1	.103079	2.4253
2	.335081	1.1937
3	.561839	.6229
SUMA FRACCION MOLAR=	1.000000	

TEMP. FINAL= 686.266      CONVERGENCIA= .00000000E-50

PROBLEMA PROPUESTO FINALIZADO

STOP 0000

CALCULO TEMPERATURA VAPORIZACION PARCIAL

TEMPERATURA                      FUNCION CONVERGENTE

640.000                              -0.11734860E 00  
667.228                              -0.36063000E-02

COMP.	F. MOL. LIQ.	F. MOL. VAP.	K
1	.163584	.355619	2.1739
2	.392022	.409750	1.0452
3	.444397	.234625	.5279

TEMP. FINAL=    668.122                      CONVERGENCIA=                      -0.44000000E-05

STOP 0000

PROBLEMA PROPUESTO FINALIZADO

CALCULO TEMPERATURA BURBUJA

TEMPERATURA	FUNCION CONVERGENTE
640.000	-.75000800E-01
650.076	.15522000E-02

COMPONENTE	FRACC. MOL. VAP.	K
1	.483662	1.9346
2	.362211	.9055
3	.154126	.4403
SUMA FRACCION MOLAR=	1.000000	

TEMP. FINAL= 649.876      CONVERGENCIA= .60000000E-06

CALCULO TEMPERATURA ROCIO

TEMPERATURA	FUNCION CONVERGENTE
649.876	.36575660E 00
678.621	.63242300E-01
685.916	.27747000E-02

COMPONENTE	FRACC. MOL. LIQ.	K
1	.103079	2.4253
2	.335083	1.1937
3	.561842	.6229
SUMA FRACCION MOLAR=	1.000005	

TEMP. FINAL= 686.266      CONVERGENCIA= .59000000E-05

CALCULO TEMPERATURA VAPORIZACION PARCIAL

TEMPERATURA	FUNCION CONVERGENTE
686.266	.71188500E-01
667.628	-.19929000E-02

COMP.	F. MOL. LIQ.	F. MOL. VAP.	K
1	.163583	.355620	2.1739
2	.392021	.409751	1.0452
3	.444396	.234626	.5279

TEMP. FINAL= 668.122      CONVERGENCIA= -.12000000E-05

PROBLEMA PROPUESTO FINALIZADO

STOP 0000

CALCULO TEMPERATURA BURBUJA

TEMPERATURA	FUNCION CONVERGENTE
640.000	-.75000800E-01
650.076	.15522000E-02

COMPONENTE	FRACC. MOL. VAP.	K
1	.483662	1.9346
2	.362211	.9055
3	.154126	.4403
SUMA FRACCION MOLAR=	1.000000	

TEMP. FINAL= 649.876      CONVERGENCIA= .60000000E-06

CALCULO TEMPERATURA ROCIO

TEMPERATURA	FUNCION CONVERGENTE
649.876	.36575660E 00
678.621	.63242300E-01
685.916	.27747000E-02

COMPONENTE	FRACC. MOL. LIQ.	K
1	.103079	2.4253
2	.335083	1.1937
3	.561842	.6229
SUMA FRACCION MOLAR=	1.000005	

TEMP. FINAL= 686.266      CONVERGENCIA= .59000000E-05

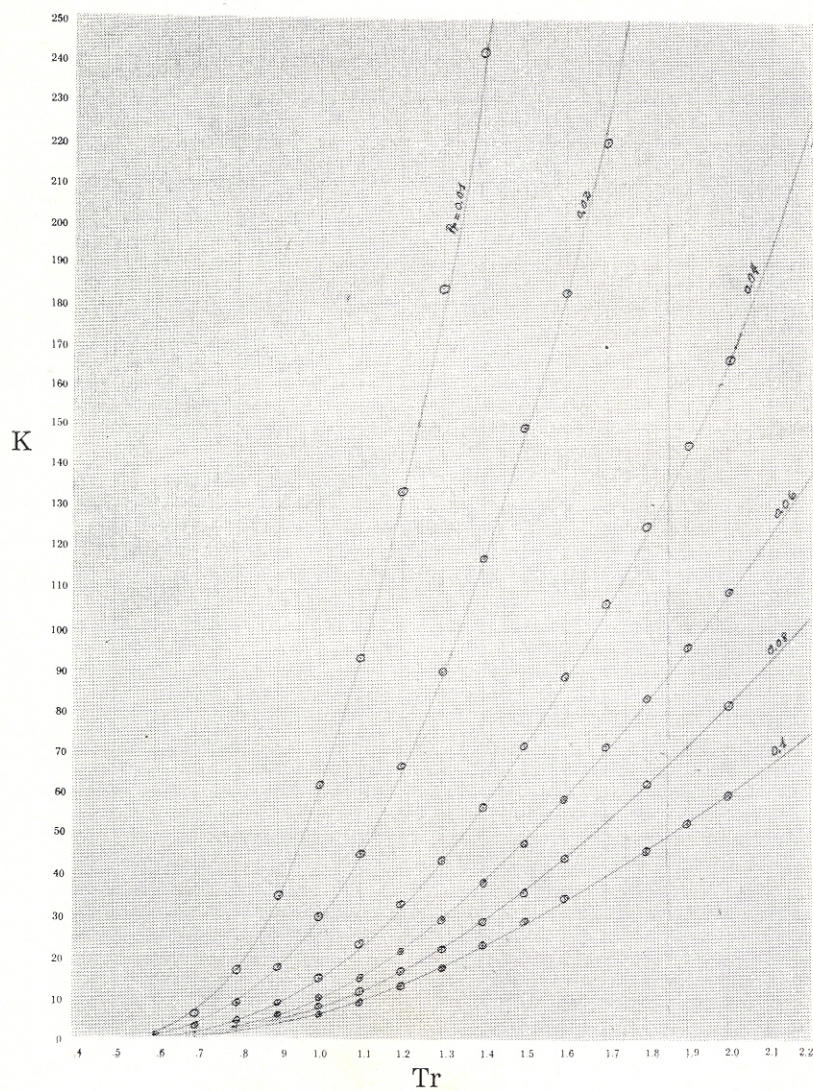
STOP 0000

PROBLEMA PROPUESTO FINALIZADO



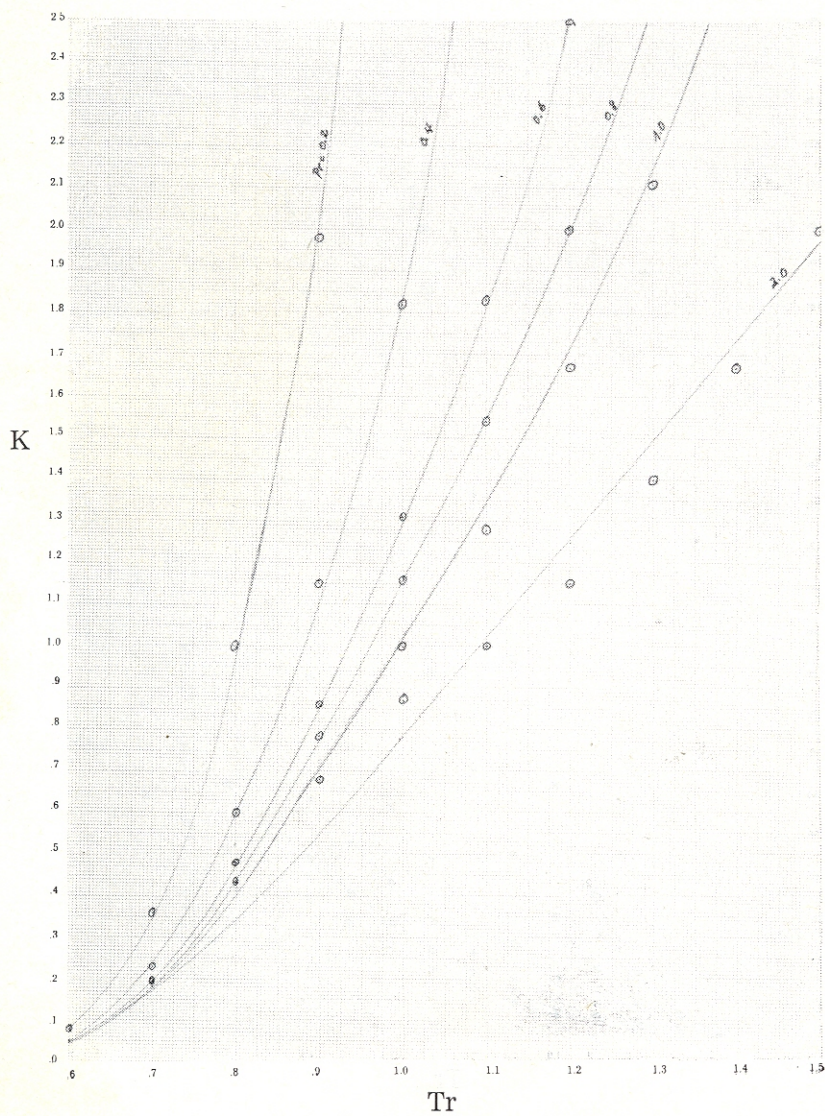
CONSTANTE EQUIL. VAP. — TEMPERATURA REDUCIDA

Datos: tabla 63, Pág. 941, Ref. (1) Gráfica 1



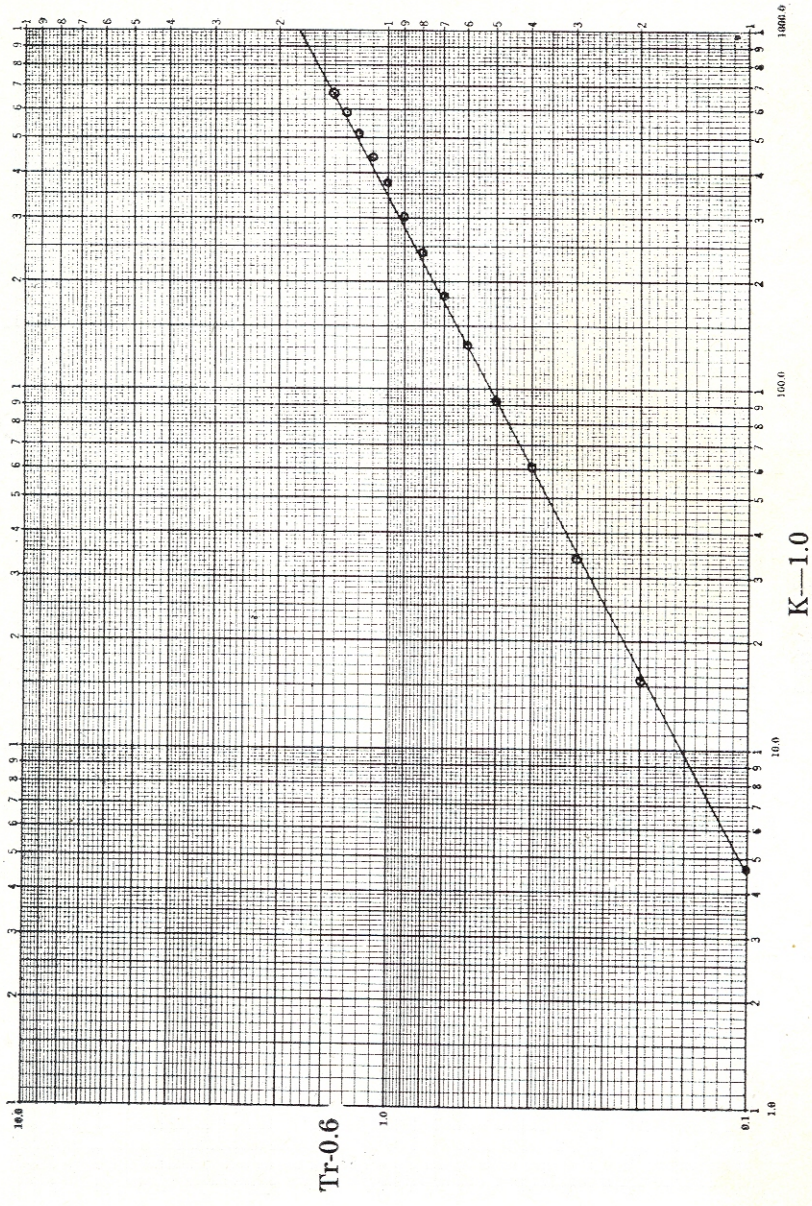
CONSTANTE EQUIL. VAP. — TEMPERATURA REDUCIDA

Datos: tabla 63, Pág. 941, Ref. (1) Gráfica 2

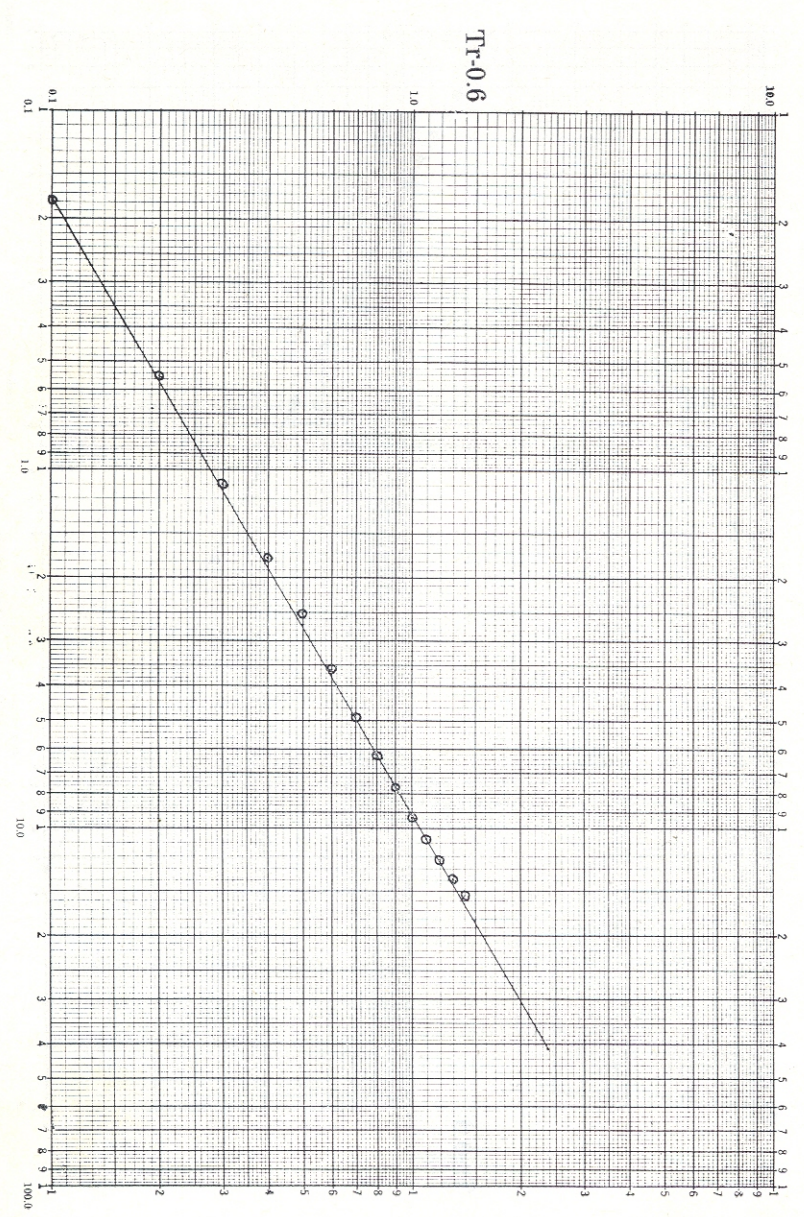




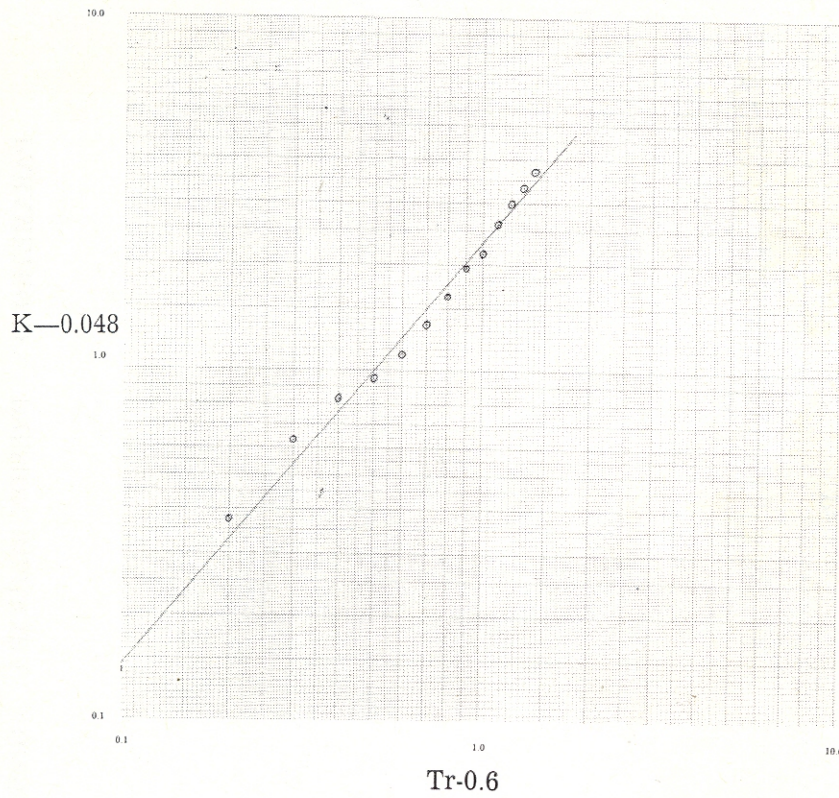
ADAPTACION A LINEA RECTA Pr = 0.01 Gráfica 3



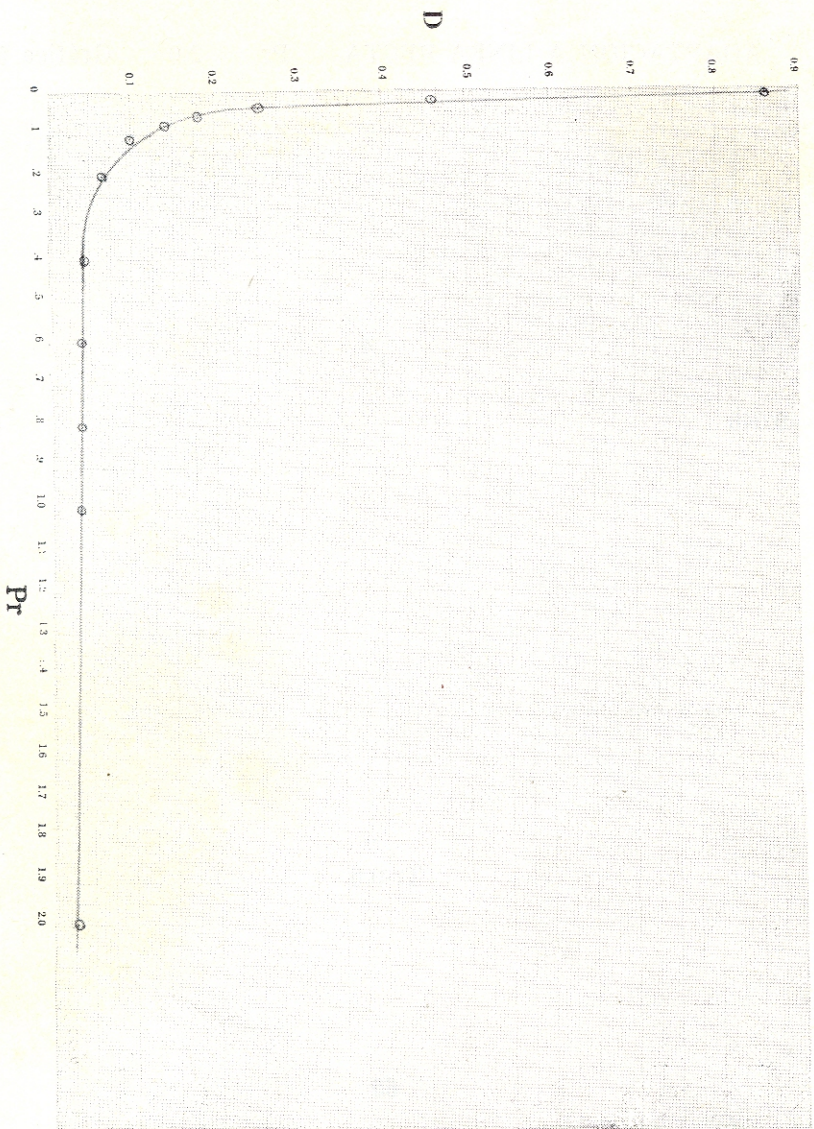
ADAPTACION A LINEA RECTA Pr = 0.4 Gráfica 4



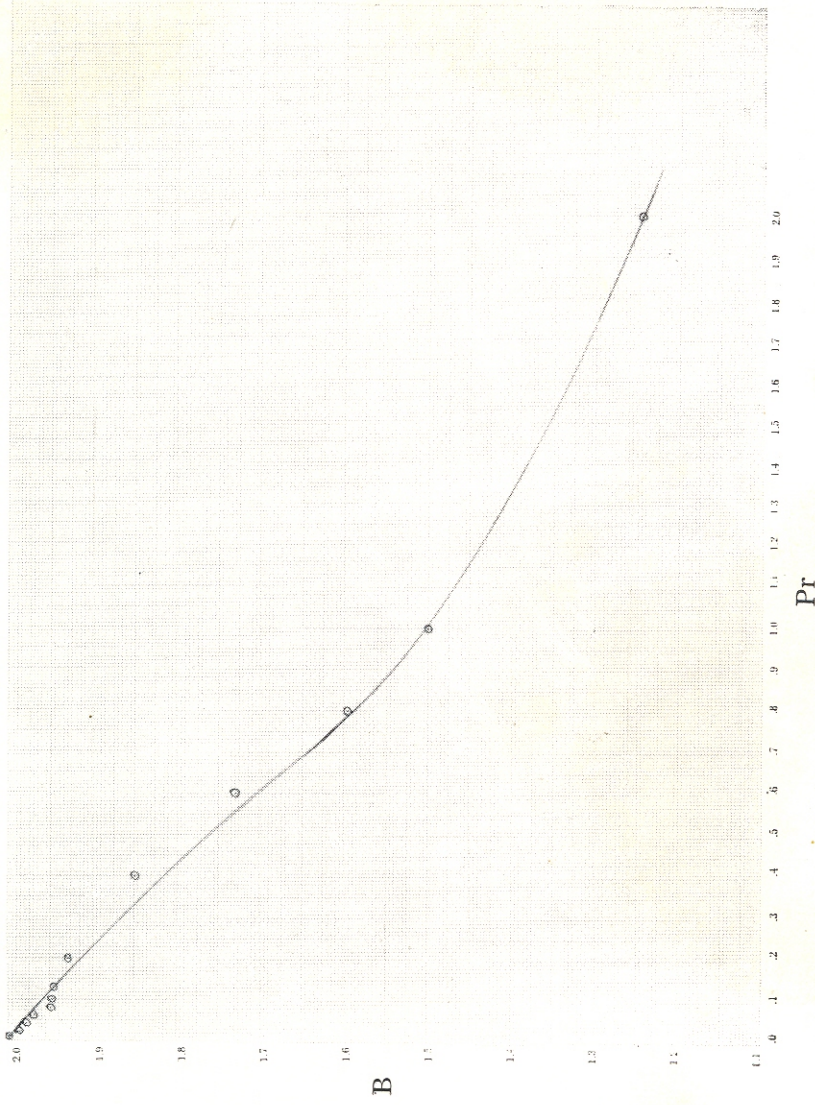
ADAPTACION A LINEA RECTA Pr = 2.0 Gráfica 5



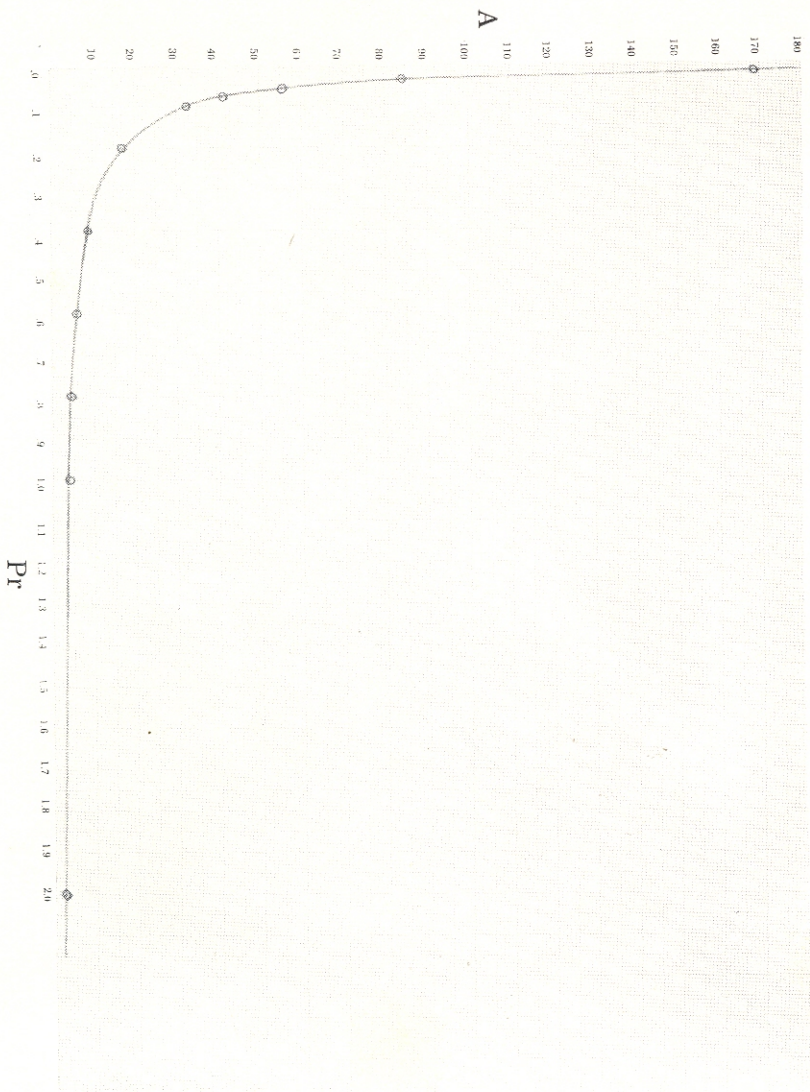
PARAMETRO D — PRESION REDUCIDA Gráfica 6



PARAMETRO B — PRESION REDUCIDA Gráfica 7

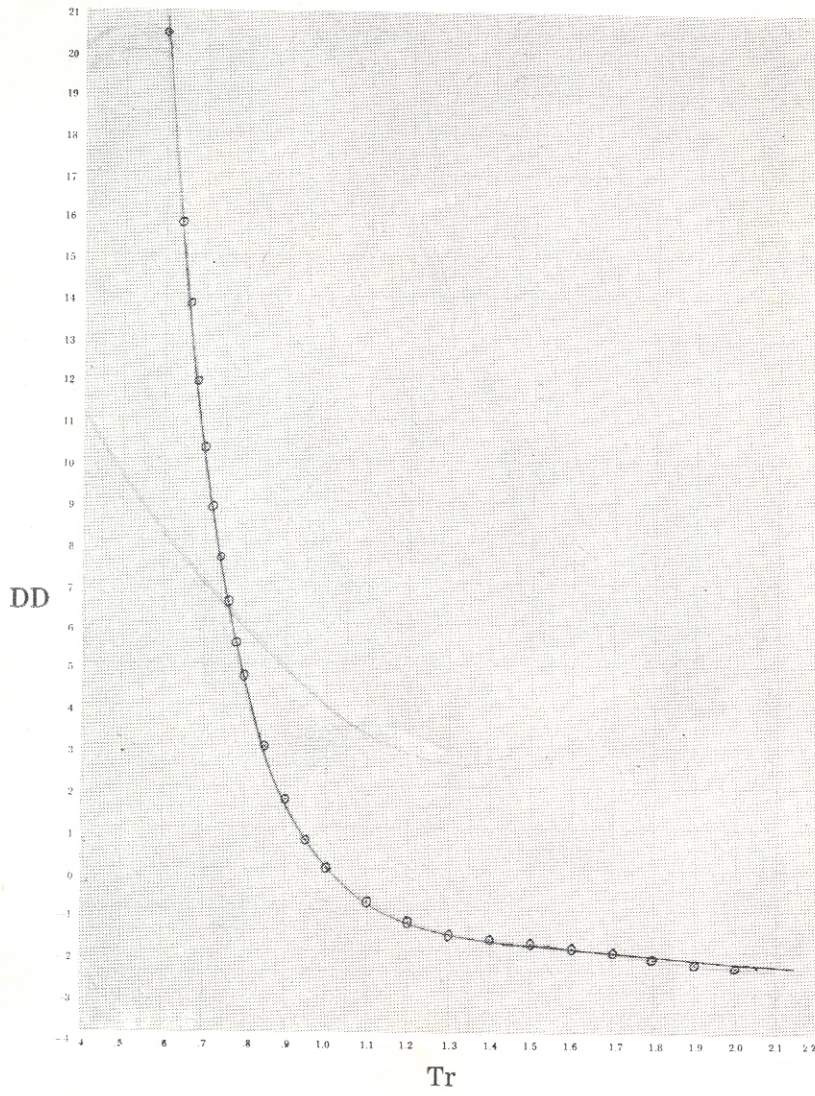


PARAMETRO A — PRESION REDUCIDA Gráfica 8

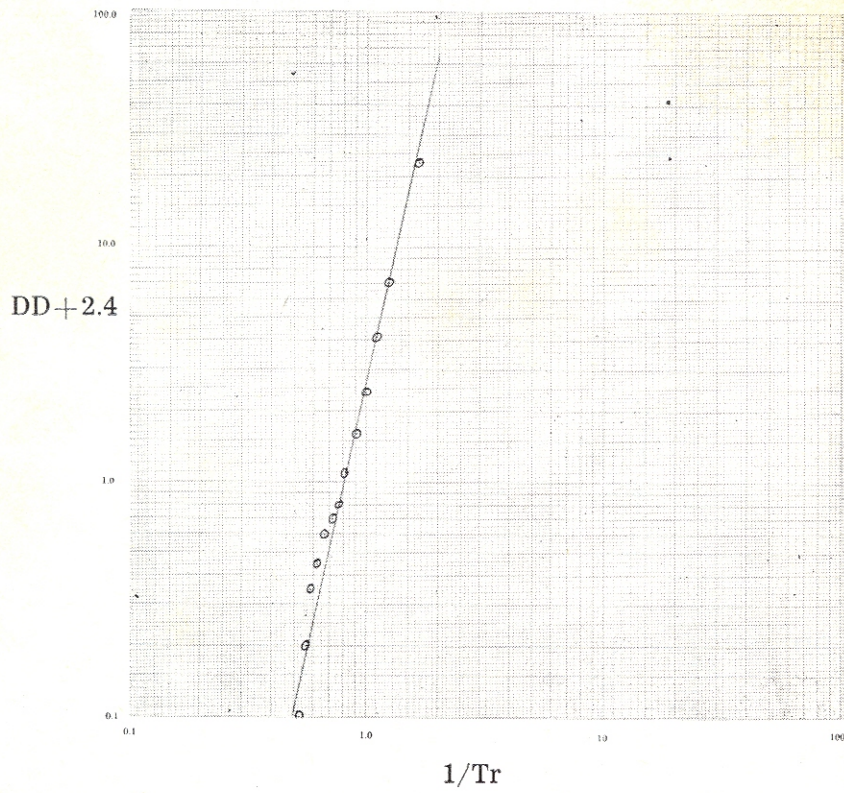


Gráfica 9

FACTOR DESVIACION (DD) — TEMPERATURA REDUCIDA



ADAPTACION A LINEA RECTA Gráfica 10





## REFERENCIAS

- 1.—Hougen, O. A., K. M. Watson and R. A. Ragatz, "Chemical Process Principles", 2 ed. (New York: John Wiley & Sons, Inc., 1959).
- 2.—I. S. Sokolnikoff, E. S. Sokolnikoff, "Matemática Superior para Ingenieros y Fisicos", 3 ed. Trad. por J. C. Vignaux, Ed. Nigar, S. R. L., (Buenos Aires: 1956).
- 3.—K. L. Nielsen, "Methods in Numerical Analysis", 2 ed. (New York: Macmillan, 1965).
- 4.—J. M. Smith and H. C. Van Ness, "Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics", 2 ed. (New York: McGraw-Hill, 1965).
- 5.—D. W. Marquardt, "Solución de Modelos No Lineares en Ingeniería Química", (Matemáticas Aplicadas), Chem. Eng. Progress, Vol. 55, No. 6, Pág. 65, Junio 1959).
- 6.—C. D. Holland, "Multicomponent Distillation", (New Jersey: Prentice Hall, Inc., 1963).
- 7.—A Source Book of Technical Literature on Fractional Distillation. (Published by Gulf Research & Development Co.).
- 8.—F. Daniels, "Experimental Physical Chemistry", 6 ed. (N. Y.: McGraw-Hill, 1962).



(f) *William Flores Sáenz*

Vo. Bo.

(f) *Ing. Carlos Rivera F.*  
Asesor

Vo. Bo.

(f) *Ing. Carlos Rolz B.*  
Asesor

Vo. Bo.

(f) *Ing. Leonel Flores E.*  
Director

IMPRIMASE:

(f) *Ing. Mauricio Castillo C.*  
Decano