



UNIVERSIDAD LA SALLE

ESCUELA DE QUIMICA  
INCORPORADA A LA U.N.A.M.

DESARROLLO DE UN ALGORITMO PARA CALCULOS DE  
EQUILIBRIO LIQUIDO - VAPOR, EN SISTEMAS  
MULTICOMPONENTES NO IDEALES,  
UTILIZANDO ECUACIONES DE ESTADO

TESIS PROFESIONAL  
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE  
**INGENIERO QUIMICO**  
PRESENTA  
**EDUARDO YUNES VILLALOBOS**

MEXICO, D. F.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN<sup>18</sup>



## **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.

I.	INTRODUCCION	1
1.	Objetivo	2
2.	Importancia del Equilibrio Líquido-Vapor	2
II.	FENOMENOS DE FASES	5
1.	El Equilibrio de Fases	6
2.	Compuestos Puros	7
3.	Mezclas Binarias	11
4.	Fenómenos Retrógrados o de Retroceso	16
5.	El Balance de Materia y Energía	17
III.	ECUACIONES DE ESTADO	19
IV.	CASOS Y SISTEMAS ESTUDIADOS	31
1.	Casos Estudiados	32
2.	Sistemas Estudiados	33
V.	ANALISIS UNIDIMENSIONAL Y MULTIDIMENSIONAL DEL PROBLEMA	34
1.	Clasificación de los Métodos Numéricos	35
1.1	Métodos de Partición	35
1.2	Métodos Globales	36
2.	Comparación de los Métodos Numéricos	37
VI.	INICIALIZACION DE LOS CALCULOS	39

VII.	CALCULO DE LAS DERIVADAS.	44
1.	Métodos de Partición	45
2.	Métodos Globales	47
VIII.	LINEALIZACION Y ACCELERACION DE LA CONVERGENCIA	51
1.	Linealización en Ecuaciones no Lineales Unidimensionales	52
2.	Linealización en los Cálculos de T, P y V/F	57
3.	Linealización en los Cálculos Isoentálpicos	66
IX.	EL ALGORITMO PROPUESTO	72
1.	Diagrama de Flujo	73
2.	Listado del Programa	95
X.	CONCLUSIONES	110
	APENDICES	114
A.	Simbología Utilizada en el Diagrama de Flujo	115
B.	Lista de Variables del Programa	116
C.	Nomenclatura	123
D.	Pruebas de Linealización	123
D.1	Pruebas de Linealización en Cálculos de Temperatura	129
D.2	Pruebas de Linealización en Cálculos de Presión	162
D.3	Pruebas de Linealización en Cálculos de V/F	196
	BIBLIOGRAFIA	224

## **CAPITULO I**

### **INTRODUCCION**

## INTRODUCCION

### 1.- OBJETIVO

El objetivo de este trabajo es desarrollar un algoritmo que permita determinar en forma rápida y segura las condiciones en el equilibrio de sistemas multicomponentes en operaciones que involucren equilibrio líquido-vapor (ELV), siendo aplicable en condiciones altamente no ideales; ya que errores en los cálculos del ELV son la causa más frecuente de fallas en los simuladores de procesos.

El algoritmo elaborado se incorporará al simulador de procesos de la Escuela de Química de la Universidad La Salle.

### 2.- IMPORTANCIA DEL EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR

Conocer con exactitud los parámetros existentes en un sistema en ELV (Temperatura, presión, composiciones de los componentes en cada fase), es de suma importancia, ya que si estos no se han calculado correctamente, resulta inutil aplicar los métodos más rigurosos para el diseño de equipos de transferencia de masa. Esto es, que si no se conocen las proporciones de cada compuesto en las corrientes de vapor y líquido, no se tiene ningún respaldo para dimensionar y diseñar el equipo.

Las operaciones de transferencia de masa son sumamente importantes pues son básicas en la mayoría de los procesos industriales. Los equipos que se utilizan para llevarlas a cabo son muy costosos y es por eso que un error en su diseño como consecuencia de una mala determinación de los parámetros del sistema en equilibrio implicaría un daño muy grande, tanto en lo económico como en el aspecto operativo de una planta. Por ejemplo, si la sección de recuperación de materias primas a la salida de un reactor de baja eficiencia está mal diseñada, hace inútiles a las secciones de preparación de reactivos, servicios auxiliares, etc.

Algunos de los procesos de transferencia de masa más utilizados en la industria que operan en condiciones de ELV son:

- a) Destilación
- b) Evaporación o destilación instantánea (Flash)
- c) Expansiones
- d) Evaporación
- e) Rectificación y Agotamiento
- f) Absorción
- g) Destilación azeotrópica y extractiva

También la determinación del ELV es necesaria en cálculos de:

- a) Caídas de presión en tuberías y equipos que manejan fluidos en dos fases
- b) Caídas de presión en válvulas
- c) Diseño de dispositivos de seguridad como discos de ruptura y válvulas de desfogue
- d) NPSH en bombas de salidas de fondos de torres de destilación o equipos con sistemas en ELV

En la actualidad la economía mundial está sostenida principalmente por el petróleo, donde desde la petroquímica básica hasta la obtención de productos finales necesita plantas procesadoras donde algunas de las principales operaciones manejan sistemas en ELV.

A continuación se presenta una tabla en la que se listan las 15 Corporaciones Industriales más grandes del mundo de acuerdo a su nivel de ventas en 1984 (iv):

TABLA I

	<u>COMPANIA</u>	<u>GIRO INDUSTRIAL</u>	<u>VENTAS (M DOLL.)</u>
1	Exxon	Refinación de Petróleo	90,854,000
2	Royal Dutch/Shell Group	Refinación de Petróleo	84,864,598
3	General Motors	Vehículos Automotores	83,889,900
4	Mobil	Refinación de Petróleo	56,047,000
5	Ford Motor	Vehículos Automotores	52,366,400
6	British Petroleum	Refinación de Petróleo	50,662,063
7	Texaco	Refinación de Petróleo	47,334,000
8	I.B.M.	Eq. Ofic. Computadoras	45,937,000
9	E.I.du Pont de Nemours	Química y Petroquímica	35,915,000
10	American Tel. & Tel.	Equipo Electrónico	33,187,500
11	General Electric	Equipo Electrónico	27,947,000
12	Standard Oil (Ind.)	Refinación de Petróleo	26,949,000
13	Chevron	Refinación de Petróleo	26,798,000
14	ENI	Refinación de Petróleo	25,798,221
15	Atlantic Richfield	Refinación de Petróleo	24,686,000

Como se observa, la participación de la industria del petróleo en la economía mundial es decisiva. En esta industria la mayor parte de sus procesos dependen de la Ingeniería Química y en una gran proporción estos involucran operaciones de ELV. De aquí la importancia de desarrollar una metodología de cálculo que permita definir correctamente las condiciones en el ELV ya que de esto depende - en gran parte la eficiencia en las operaciones de esta rama industrial.

## **CAPITULO II**

### **FENOMENOS DE FASES**

## FENOMENOS DE FASES

### 1.- EL EQUILIBRIO DE FASES

Este Capítulo sólo se referirá al equilibrio líquido-vapor y gas-líquido por ser el aspecto de los fenómenos de fases estudiado en esta tesis.

El equilibrio de fases se presenta cuando las condiciones P-V-T permiten la coexistencia de un material puro o una mezcla de compuestos en dos o más fases al mismo tiempo.

El equilibrio de fases puede estudiarse desde dos puntos de vista:

a) Ideal.

- Ley de Raoult
- Ley de Henry, etc.

b) No ideal.

En este caso se tienen varios criterios para determinar el equilibrio como son:

- Fugacidades de cada componente iguales en cada fase.

. Formulaciones simétricas (utilizando coeficientes de fugacidad de los componentes de las mezclas)

. Formulaciones asimétricas (utilizando coeficientes de actividad y de fugacidad de los componentes de las mezclas)

- Energía libre o interna del sistema mínima.

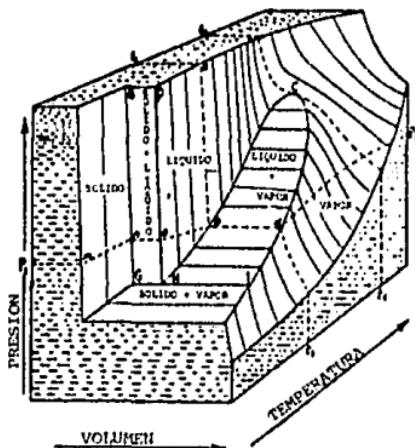
- Máxima entropía del sistema.

## 2.- COMPUESTOS PUROS

Los compuestos puros pueden existir en diferentes fases; sólida, líquida, vapor y gas, y en algunos casos, dependiendo de las condiciones de presión, volumen y temperatura (P-V-T), en un estado de equilibrio entre estas.

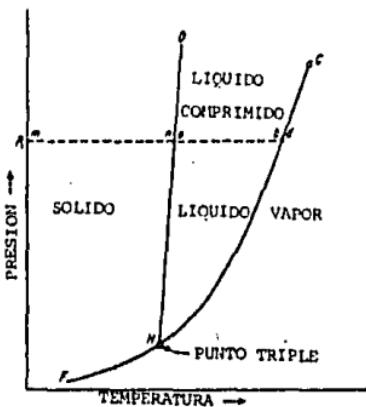
Cuando un compuesto puro se encuentra en una fase, definiendo dos de las tres variables P-V-T, queda definida la tercera.

Para tener una buena visión del comportamiento de las fases de un compuesto puro es necesario representar estas en diagramas tridimensionales.



GRAFICA I

Las condiciones en las que puede existir ELV están representadas como el área HbCdt. Las líneas que generan la superficie son paralelas a la base de la figura. Una proyección del diagrama tridimensional en la superficie P-T genera la siguiente gráfica:

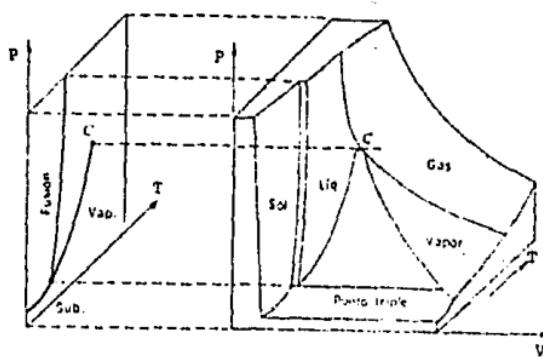


GRAFICA II

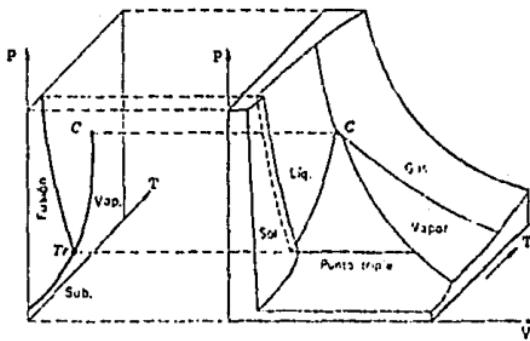
En la gráfica II, la curva CbH o CdI de la gráfica I se representa sólo por la línea HC, siendo esta la curva de presión de vapor o curva de vaporización.

La superficie BDHG que en la gráfica I representa el equilibrio sólido-líquido, en la gráfica II está proyectada como la línea HD, siendo esta la curva de fusión, y la superficie en que se tiene el equilibrio sólido-vapor se proyecta como la línea HF que se llama curva de sublimación.

Las pendientes de las curvas de sublimación y vaporización son siempre positivas para todas las substancias, sin embargo, la de la curva de fusión puede ser negativa o positiva. En la mayoría de los casos esta pendiente es positiva pero -- por ejemplo, en el agua es negativa. Esto representa el comportamiento del compuesto al fundirse, ya que si al hacerlo se contrae como el agua, la pendiente es negativa y si por el contrario se dilata, la pendiente es positiva.



GRAFICA III  
Compuesto que se dilata al fundirse



GRAFICA IV  
Compuesto que se contrae al fundirse

El punto C en ambas gráficas representa el punto crítico. En este punto no se puede distinguir entre el volumen del líquido y el del vapor ya que al igual que las densidades coinciden en ambas fases.

Sobre un diagrama P-V el punto crítico se encuentra donde la isoterma (crítica) tiene una tangente horizontal es decir:

$$\left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = 0$$

y a la vez tiene el punto de inflexión

$$\left( \frac{\partial^2 P}{\partial V^2} \right)_T = 0$$

El llamado punto triple es el punto de intersección de las curvas de sublimación y vaporización. En la gráfica II se representa como un punto, pero como se observa en la gráfica I, en realidad es una línea de puntos triples (GI). En las condiciones del punto triple es posible la coexistencia del compuesto puro en las tres fases sólida, líquida y vapor.

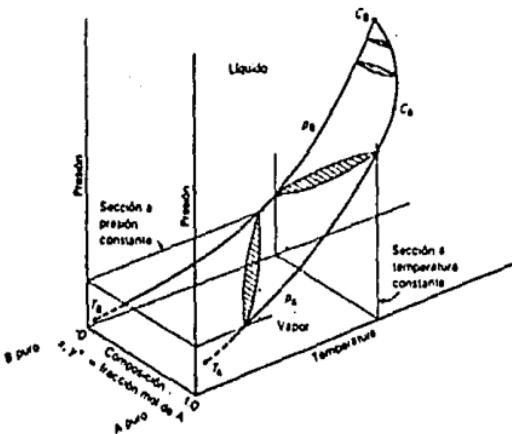
### 3.- MEZCLAS BINARIAS

Para estudiar el fenómeno de fases en mezclas binarias se hacen las siguientes consideraciones:

a) Los componentes líquidos son miscibles entre sí formando una solución homogénea no necesariamente ideal.

b) El componente A de la mezcla binaria A-B se considera el más volátil, es decir la presión de vapor de A a cualquier temperatura es mayor que la presión de vapor de B puro.

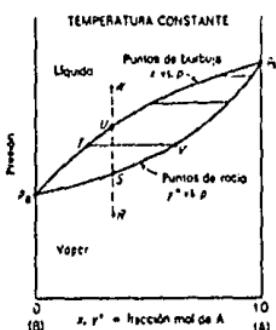
De la misma manera que en el caso del compuesto puro nos auxiliaremos de una gráfica tridimensional para visualizar completamente el comportamiento de las fases de la mezcla binaria A-B, sólo que en este caso se utilizaran en vez del volumen las concentraciones de los compuestos como el tercer parámetro además de P y T.



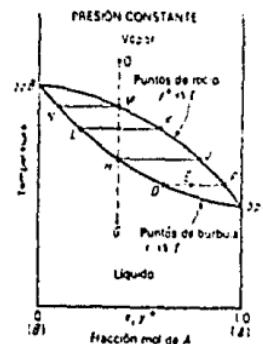
GRAFICA V

La curva PA es la curva de presión de vapor de A y cae en el plano de composición más cercano a  $x=1$ . Esta curva se extiende desde su punto crítico  $C_A$  hasta su punto triple  $T_A$ . Análogamente, la curva PB es la curva de presión de vapor de B y cae en  $x=0$ .

La región del equilibrio líquido-vapor se encuentra entre  $x=1$  y  $x=0$  y está separada por una superficie doble que se extiende de PA a PB, siendo más accesible su estudio en diagramas bidimensionales. Estos diagramas pueden ser  $T-x$  a  $P = \text{constante}$  o  $P-x$  a  $T = \text{constante}$ .



GRAFICA VI



GRAFICA VII

En la gráfica VII se representa la zona del ELV, donde la línea NLHD es la curva de puntos de burbuja, es decir, donde el líquido se comienza a evaporar, y la línea NKJF representa la curva de puntos de rocío que donde el vapor se comienza a condensar. El punto G representa un líquido subenfriado y el punto O un vapor sobrecalentado. Las líneas horizontales dentro de la zona de equilibrio representan cambios de concentración del componente A en la mezcla a temperatura constante.

En la gráfica VI se cambian de posición las curvas de rocio de burbuja - y las fases líquida y vapor respecto a la gráfica VII debido a que como se observa en la gráfica V estas representaciones están proyectadas en planos perpendiculares entre sí.

Existen ecuaciones que describen el comportamiento de mezclas ideales en el equilibrio como la de Raoult, que indica que la presión parcial  $\bar{P}_A^*$  en el equilibrio de un componente a una temperatura fija es igual al producto de su fracción mol XI en el líquido por su presión de vapor  $P_A$ .

Para el caso de la mezcla binaria:

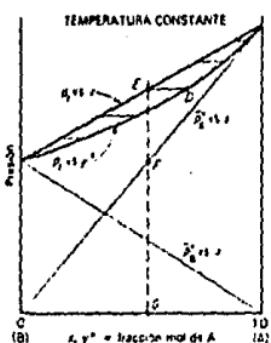
$$\bar{P}_A^* = P_A X_A \quad \bar{P}_B^* = P_B (1-X_A)$$

Tomando la fase vapor como ideal:

$$P_T = \bar{P}_A^* + \bar{P}_B^* = P_A X_A + P_B (1-X_A)$$

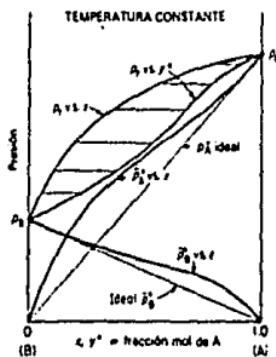
donde  $P_T$  es la presión total.

En este caso las presiones parciales y la total tienen un comportamiento ideal (Gráfica VIII)

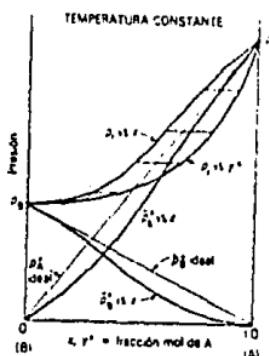


GRAFICA VIII

Existen desviaciones a este comportamiento ideal cuando la presión total es mayor a la ideal y se llama desviación positiva a la ley de Raoult. También se dan desviaciones a la idealidad en el otro sentido, es decir cuando la presión total es menor a la calculada idealmente por la ecuación de Raoult y estas se llaman desviaciones negativas a la ley de Raoult.

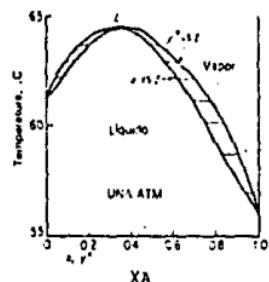


GRAFICA IX  
Desviación Positiva  
a la Idealidad



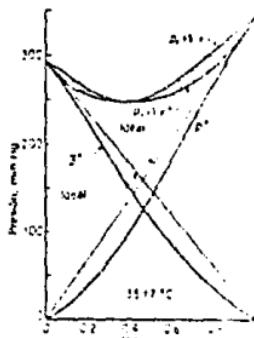
GRAFICA X  
Desviación Negativa  
a la Idealidad

Cuando las desviaciones positivas son muy grandes y las presiones de vapor de los dos compuestos son muy cercanas, las curvas de presión total pueden alcanzar un máximo donde el comportamiento de la mezcla es similar al de un componente puro, es decir, no existe cambio en la composición de la misma durante la condensación. A esto se le llama azeótropo o mezcla de punto de ebullición mínimo. En el caso de las desviaciones negativas se presenta una situación análogo sólo que el azeótropo es de punto de ebullición máximo.

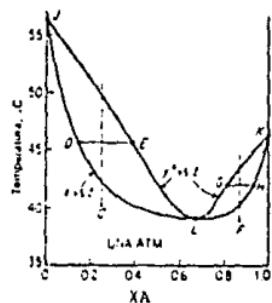


GRAFICA XI

Azeótropo de punto de ebullición máximo

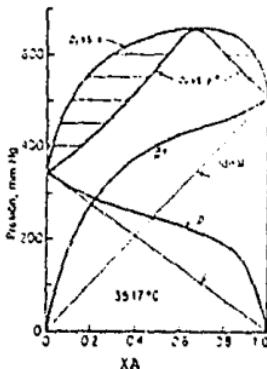


GRAFICA XII



GRAFICA XIII

Azeótropo de punto de ebullición mínimo

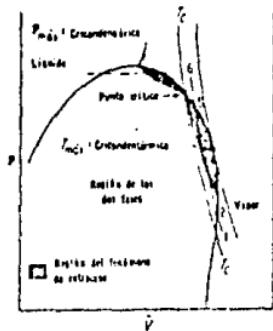


GRAFICA XIV

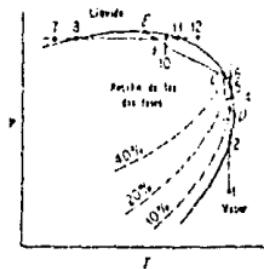
#### 4.- FENÓMENOS RETROGRADOS O DE RETROCESO

En algunos sistemas multicomponentes en ELV pueden presentar fenómenos -- muy interesantes llamados vaporización o condensación retrógradas o de retroceso, que parecen contradecir la lógica del comportamiento de las fases al variar las condiciones de presión o temperatura de una mezcla.

Para explicar estos fenómenos utilizaremos las siguientes gráficas:



GRAFICA XV



GRAFICA XVI

El punto 1 de la gráfica XVI corresponde a la región de vapor. Al elevar la presión a temperatura constante se llega al punto 2 que corresponde a la línea de vapor saturado. Al seguir elevando la presión se comienza a formar líquido. Si se sigue aumentando la presión, se llega al punto 3 donde se tiene la máxima cantidad de líquido, pero al continuar aumentando la presión, contrariamente a lo que se podría suponer, la cantidad de líquido comienza a disminuir en vez de seguir aumentando, hasta llegar a obtener nuevamente la mezcla en fase vapor (punto 6).

Este fenómeno se presenta sólo si el punto crítico C se encuentra arriba y a la izquierda del punto D que representa la máxima temperatura alcanzable en el ELV para la mezcla. A la línea 1, 2, 3, 4, 5, 6 se le conoce como cricondencídrica.

Otro fenómeno de retroceso se observa cuando al incrementar la temperatura a presión constante se pasa del punto 7 al punto 8 donde de fase líquida se llega a -

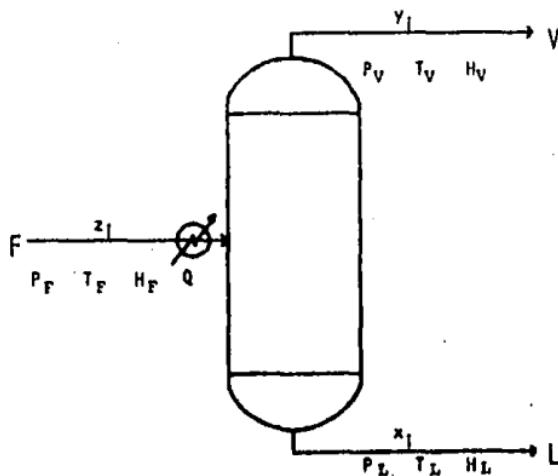
la curva de burbuja. Al continuar aumentando la temperatura el líquido comienza a evaporarse hasta llegar al punto 9 que es el máximo de vapor que se puede obtener. Al seguir incrementando la temperatura, contrariamente de lo que se podría pensar, comienza a aumentar la proporción del líquido, hasta llegar al punto 12 en que la mezcla vuelve nuevamente a ser líquida. A esta línea se le llama criodenburita.

La gráfica XV al igual que la XVI corresponde a una mezcla de composición fija.

#### 5.- EL BALANCE DE MATERIA Y ENERGIA

El cálculo que se realiza cuando se quieren determinar las propiedades en el ELV en un sistema de multicomponentes es el de una destilación instantánea o flash.

El sistema queda representado de la siguiente forma:



GRAFICA XVII

donde:

$F$  = Corriente de alimentación

$L$  = Corriente de líquido a la salida

$V$  = Corriente de vapor a la salida

$z_i$  = Fracción mol del compuesto  $i$  en la alimentación

$x_i$  = Fracción mol del compuesto  $i$  en la corriente  $L$

$y_i$  = Fracción mol del compuesto  $i$  en la corriente  $V$

$H_F$  = Entalpía de la alimentación =  $\Sigma z_i h_{fi}$

$H_L$  = Entalpía de la corriente  $L$  =  $\Sigma x_i h_{li}$

$H_V$  = Entalpía de la corriente  $V$  =  $\Sigma y_i h_{vi}$

Los balances de materia y energía del sistema son:

#### BALANCE GLOBAL DE MATERIA

$$F = V + L$$

ecuación 1

#### BALANCE DE MATERIA POR COMPONENTE

$$z_i F = y_i V + x_i L$$

ecuación 2

#### BALANCE GLOBAL DE ENERGIA DEL SISTEMA

$$Q + F H_F = V H_V + L H_L$$

ecuación 3

Las relaciones de equilibrio son:

$$f_i^L = f_i^V \longrightarrow y_i = x_i K_i$$

donde:

$$K_i = K_i (T, P, x_i, y_i)$$

## **CAPITULO III**

### **ECUACIONES DE ESTADO**

## ECUACIONES DE ESTADO

Las ecuaciones de estado permiten expresar una relación entre dos o más propiedades termodinámicas en compuestos puros o en mezclas multicomponentes. En sistemas de un componente y una fase, las ecuaciones de estado incluyen siempre tres propiedades dos de las cuales pueden definirse como variables independientes. Aunque en principio se pueden plantear relaciones funcionales en que intervengan tres propiedades termodinámicas cualesquiera (como T,P,V,H,S,U), las expresiones analíticas de las relaciones entre propiedades han sido limitadas casi completamente a P,V y T.

Dado que la presión, el volumen y la temperatura pueden ser medidos directamente, los datos necesarios para evaluar constantes de algunas ecuaciones de estado que pretenden medir las interacciones entre las moléculas pueden ser obtenidos experimentalmente.

Propiedades tales como la energía interna la entalpía o la entropía no pueden ser medidas y se tienen que evaluar a partir de relaciones termodinámicas.

Una ecuación de estado puede ser larga y complicada incluyendo a veces hasta quince términos como la de Martin-Hou o corta y sencilla como la de los gases ideales:  $PV = nRT$ .

A continuación se muestra una tabla con las ecuaciones de estado más conocidas:

van der Waals:

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

Beattie-Bridgeman:

$$PV = RT + \frac{B}{V} + \frac{Y}{VT} + \frac{\delta}{VT}$$

$$B = RTB_0 - A_0 - \frac{Rc}{T^2}$$

$$Y = - RTB_0b + aA_0 - \frac{RB_0c}{T^2}$$

$$\delta = \frac{RB_0bc}{T^2}$$

Berthelot:

$$P = \frac{RT}{(V-b)} - \frac{a}{V^2}$$

Redlich-Kwong:

$$(P + \frac{a}{T^{2/3} V(V+b)}) (V-b) = RT$$

$$a = 0.4278 \frac{R^2 T_c^{2/3}}{P_c}$$

$$b = 0.0867 \frac{RT_c}{P_c}$$

Saave-Redlich-Kwong

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V(V+b)}$$

$$a = 0.42747 \frac{R^2 T_c^2}{P_c}$$

$$b = 0.08664 \frac{RT_c}{P_c}$$

$$a = (1 + S (1 - T_r^{1/2}))^2$$

$$S = 0.48508 + 1.55171 \omega - 0.15613 \omega^2$$

Benedict-Webb-Rubin:

$$PV = RT + \frac{B}{V} + \frac{\sigma}{V^2} + \frac{\eta}{V^3} + \frac{\omega}{V^4}$$

$$B = RTB_0 + A_0 - \frac{C_0}{T^2}$$

$$\sigma = bRT - a + \frac{c}{T^2} \exp (-\frac{\gamma}{V^2})$$

$$\eta = c\gamma \exp (-\frac{\gamma}{V^2})$$

$$\omega = ag$$

Peng-Robinson

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V(V+b) + b(V-b)}$$

$$b = 0.0778 \frac{RT_c}{P_c}$$

$$a = 0.45724 \frac{R^2 T_c^2}{P_c}$$

$$a = (1 + S(1 - T_r^{1/2}))^2$$

$$S = 0.37464 + 1.54225 \omega - 0.26992 \omega^2$$

Existen muchas modificaciones a la ecuación de Redlich-Kwong, como la de Stein (1), Mathias (2), etc. que no se muestran aquí por razones de espacio.

La idealidad de la ecuación PV = nRT, consiste en que se considera que las moléculas son de tamaño infinitesimal, que no ocupan volumen, que experimentan colisiones totalmente elásticas con las paredes del recipiente que las contiene que no existe ninguna atracción o repulsión intermolecular entre ellas.

Como los coeficientes utilizados para tomar en cuenta las interacciones moleculares en casi todas las ecuaciones de estado se obtienen de ajustar estas a diversos datos experimentales P-V-T, los resultados arrojados por ellas nunca pueden ser más exactos que los datos que representan.

Aunque las ecuaciones de estado están expresadas para relacionar las propiedades de compuestos puros, su uso puede extenderse a sistemas multicomponentes mediante las llamadas reglas de mezclado, las cuales se utilizan para evaluar los coeficientes de la ecuación tomando en cuenta la participación proporcional de cada compuesto de la mezcla al incluir su fracción mol en los cálculos.

Las reglas de mezclado utilizadas en esta tesis son:

$$a = \sum_{i,j}^n a_{ij} s_{ij} x_i x_j$$

$$b = \sum_i^n x_i b_i$$

donde  $a_{ij} s_{ij} = (a_i a_j s_i s_j)^{1/2} (1-k_{ij})$

siendo  $k_{ij}$  el "coeficiente de interacción binaria", el cual entre hidrocarburos es cero y para pares de compuestos que contienen CO<sub>2</sub>, CO, N<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>S tiene un valor que depende de cada compuesto del par. Este coeficiente se utiliza para tomar en cuenta en los cálculos la interacción molecular entre los compuestos de la mezcla.

Recientemente Mathias (5) y otros autores han desarrollado coeficientes de interacción binaria que permiten calcular el equilibrio líquido-vapor con ecuaciones de estado en sistemas que contienen compuestos altamente polares.

En las siguientes tablas se muestran los coeficientes de interacción binaria utilizados en esta tesis:

TABLA II

COEFICIENTES DE INTERACCION BINARIA PARA LA ECUACION DE SOAVE - API

<u>COMPUESTO</u>	<u>H<sub>2</sub>S</u>	<u>CO<sub>2</sub></u>	<u>N<sub>2</sub></u>	<u>CO</u>
Hidrógeno	0.0	0.0	0.0	0.0
Metano	0.0850	0.0973	0.0319	0.03
Etano	0.0829	0.1346	0.0388	0.00
Propano	0.0831	0.1018	0.0807	0.02
Propileno	0.0	0.0914	0.0	0.0
n-Butano	0.0609	0.1474	0.1007	0.0
i-Butano	0.0609	0.1474	0.1007	0.0
n-Pentano	0.0697	0.1278	0.0	0.0
i-Pentano	0.0697	0.1278	0.0	0.0
Hexano	0.0	0.0	0.1444	0.0
2 Metil Pentano	0.0	0.0	0.1444	0.0
Heptano	0.0737	0.1136	0.0	0.0
H <sub>2</sub> S	0.0	0.102	0.140	0.0
Amoníaco	0.0	0.0	0.0	0.0
CO <sub>2</sub>	0.102	0.0	-0.022	-0.064
CO	0.0	-0.064	0.046	0.00
Nitrógeno	0.140	-0.022	0.0	0.046
Benceno	0.0	0.081	0.2131	-0.01
Tolueno	0.0	0.081	0.2131	-0.01

TABLA III

COEFICIENTES DE INTERACCION BINARIA PARA LA ECUACION DE SOAVE-REDLICH-KWONG

<u>COMPUESTO</u>	<u>H<sub>2</sub>S</u>	<u>CO<sub>2</sub></u>	<u>N<sub>2</sub></u>	<u>CO</u>
Hidrógeno	0.0	0.0	0.0	0.0
Metano	0.08	0.12	0.02	-0.02
Etano	0.07	0.15	0.06	0.0
Propano	0.07	0.15	0.08	0.0
Propileno	0.07	0.08	0.06	0.0
n-Butano	0.06	0.15	0.08	0.0
i-Butano	0.06	0.15	0.08	0.0
n-Pentano	0.06	0.15	0.08	0.0
i-Pentano	0.06	0.15	0.08	0.0
Hexano	0.05	0.15	0.08	0.0
2 Metil Pentano	0.5	0.15	0.08	0.0
Heptano	0.4	0.15	0.08	0.0
H <sub>2</sub> S	0.0	0.0	0.0	0.0
Amoníaco	0.0	0.0	0.0	0.0
CO <sub>2</sub>	0.12	0.0	0.0	-0.04
CO	0.0	0.0	0.0	0.0
Nitrógeno	0.0	0.0	0.0	0.0
Benceno	0.03	0.15	0.08	0.0
Tolueno	0.03	0.15	0.08	0.0

Las tres ecuaciones de estado implementadas en el algoritmo propuesto en esta Tesis son:

- Soave-Redlich-Kwong (Soave). Para cálculo de fugacidades.
- Soave-API. Para cálculo de fugacidades.
- Peng-Robinson. Para cálculo de fugacidades y entalpías.

Las expresiones matemáticas de las relaciones anteriores son:

### FUGACIDAD

- Ecuación de Soave-Redlich-Kwong

$$\ln \phi_i^n = \frac{b_1}{b} (z-1) + \ln (z-b) - \frac{A}{B} \left[ \frac{2 \left( \sum_{j=1}^n x_j a_{ij} s_{ij} \right)}{3a} - \frac{b_1}{B} \right] \ln \left( 1 + \frac{B}{z} \right)$$

dónde  $A = \frac{\alpha a P}{R^2 T^2}$        $B = \frac{b^2}{RT}$

$$a_{ij} = 0.42747 \frac{R^2 T_{ci}^2}{P_{ci}^{1.2}} \quad b_{ij} = 0.08664 \frac{R T_{ci}}{P_{ci}}$$

$$s_{ij} = (1 + s_i (1 - \tau r_{ij}))^2$$

$$s_i = 0.48 + 1.574 w_i - 0.176 w_i^2$$

siendo  $w_i$  el factor acéntrico del compuesto  $i$ , propuesto por Pitzer definido como:

$$w_i = (-\log_{10} \frac{P_i}{P_{ci}} \quad \tau_r = 0.7) - 1$$

y el factor de compresibilidad  $z^n$  (en la fase n) de la mezcla es:

$$z = \frac{V}{V-b} = \frac{\alpha a}{RT(V+b)}$$

que expresado en forma de ecuación cúbica es:

$$Z^3 - Z^2 + (A-B-B^2) Z - AB = 0$$

b) Soave-APL

$$\ln \frac{\eta}{\eta_1} = \frac{b_1}{b} (Z-1) - \ln (Z-b) - \frac{A}{b} \left[ \frac{2 \left( \sum_{i=1}^n x_i a_{ij} a_{1j} \right)}{ab} - \frac{b_1}{b} \right] \ln \left( 1 + \frac{b}{Z} \right)$$

donde:

$$A = \frac{ca}{R^2 T^2} \quad B = \frac{bp}{RT}$$

$$a_1 = 0.42747 \frac{R^2 T_{c1}^2}{P_{c1}} \quad b_1 = 0.08664 \frac{RT_{c1}}{P_{c1}}$$

$$a_i = (1 + S_i (1 - Tr_i^{0.4}))^2$$

$$S_i = 0.48508 + 1.55171 w_i - 0.15613 w_i^2$$

$$Z = \frac{V}{V-b} = \frac{ca}{RT(V+b)}$$

expresado en forma de ecuación cúbica:

$$Z^3 - Z^2 + (A-B-B^2) Z - AB = 0$$

Cuando la mezcla contiene hidrógeno:

$$\alpha_{H_2} = 1.202 \exp (-0.30228 Tr_{H_2})$$

$$Tr_{H_2} = \frac{T}{T_{cH_2}}$$

$$T_{cH_2} = 41,667 \text{ °K}$$

$$P_{cH_2} = 2102.9 \text{ kPa}$$

c) Peng-Robinson:

$$\ln \phi_1^n = \frac{b_1}{b} (Z-1) = \ln (Z-B) - \frac{A}{2\sqrt{Z} B} \left[ \frac{2 \left( \sum_{j=1}^n x_j a_{1j} a_{1j} \right)}{a_a} - \frac{b_1}{b} \right] \ln \left( \frac{Z + (1+\sqrt{Z}) B}{Z + (1-\sqrt{Z}) B} \right)$$

donde:

$$A = \frac{a_a P}{R^2 T^2}$$

$$B = \frac{b P}{RT}$$

$$a_1 = 0.45724 \frac{R^2 T c_1^{-2}}{P c_1^{-2}}$$

$$b_1 = 0.0778 \frac{R T c_1}{P c_1}$$

$$a_{1j} = (1 + s_1 (1 - Tr_1^{0.5}))^2$$

$$s_1 = 0.37464 + 1.54226 w_1 - 0.26992 w_1^2$$

$$Z^2 - (1-B)Z^2 + (A-3B^2-2B)Z - (AB-B^2-B^3) = 0$$

## ENTALPIA

a) Ecuación de Peng - Robinson

$$\Omega = h - h^0 = RT(Z-1) + \frac{RT A^2}{2\sqrt{Z} B} \left( \frac{2T}{A^2} \sum_{i=1}^n x_i \bar{A}_i^2 \left( \frac{1}{a_i^{0.5}} \frac{da_i^{0.5}}{dT} \right) - 1 \right) \ln \frac{Z + (1+\sqrt{Z}) B P}{Z + (1-\sqrt{Z}) B P}$$

donde:

$$A^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j A_i A_j (1-k_{ij})$$

$$\bar{A}_i = A_i \sum_{j=1}^n x_j A_j (1-k_{ij})$$

$$A_i = \frac{(a_1 a_{1i})^{0.5}}{RT}$$

$$B = \sum_{i=1}^n x_i B_i$$

$$B_i = \frac{b_i}{RT}$$

$$a_i = 0.45724 \frac{R^2 T_c^2}{P_c i}$$

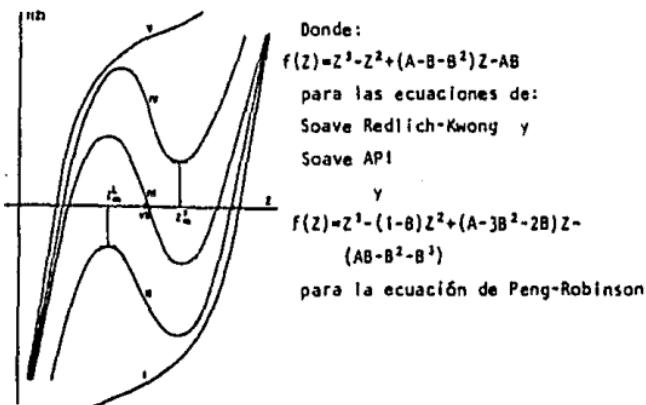
$$b_i = 0.0778 \frac{R T_c i}{P_c i}$$

$$\alpha_i^s = 1 + S_i (1 - Tr^s)$$

$$S_i = 0.37464 + 1.54226 \omega_i - 0.26992 \omega_i^2$$

Como se observa, el factor de compresibilidad Z, se calcula en base a una ecuación cúbica.

Las cinco formas que puede adquirir la ecuación son las siguientes:

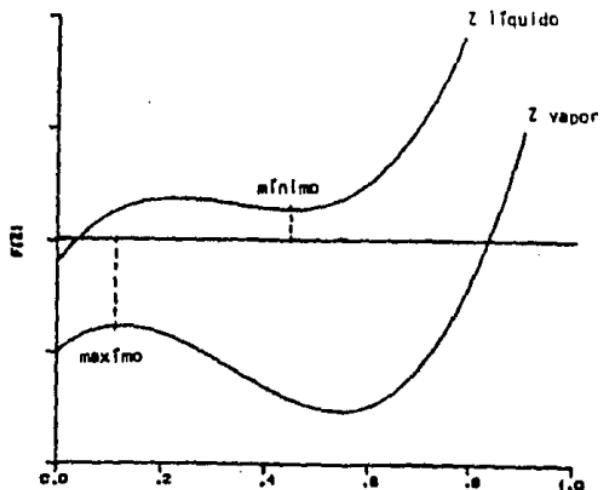


GRAFICA XVIII

Cuando al resolver la ecuación se obtienen tres raíces reales, se toma la más alta para el vapor y la más baja para el líquido (caso III).

Se puede presentar el problema de que al resolver la ecuación cúbica sólo se obtenga una raíz real. Aquí, el valor obtenido no se debe utilizar ya que se cae en los casos IV y V, donde se está calculando Z para la fase vapor y la raíz es muy pequeña, o en los casos I y II, donde se está calculando Z para la fase líquida y el valor obtenido es muy grande. En estos casos si no se corrige el problema mediante algún artificio o consideración matemática o termodinámica, los cálculos iterativos tienden a llegar a la llamada "solución trivial", que consiste en que las composiciones calculadas en las dos fases para cada compuesto son iguales generando constantes de equilibrio  $K_1$  igual a 1 para todos los compuestos, lo cual obviamente es un error.

Existen varios métodos para corregir este problema, como el propuesto por Gundersen (ii), el cual sólo considera que el problema se puede presentar como los casos II y IV y propone utilizar como valor de Z el correspondiente al máximo de la ecuación en el caso II y el correspondiente al mínimo de la ecuación en el caso IV.



GRAFICA XIX

También existe el método desarrollado por Jovanović y Paunović (12) en donde el problema en los casos II y IV lo atacan en forma similar a Gundersen y para el problema que se presenta en los casos I y V proponen reducir la presión gradualmente hasta que la ecuación presente nuevamente tres raíces.

Otro método para atacar estos problemas es el propuesto por Mathias (13), el cual no se aplica únicamente a ecuaciones cúbicas sino a cualquier tipo de ecuación de estado.

## **CAPITULO IV**

### **CASOS Y SISTEMAS ESTUDIADOS**

## CASOS Y SISTEMAS ESTUDIADOS

### 1.- CASOS ESTUDIADOS

Los casos que se estudiaron fueron los que con mayor frecuencia se presentan en operaciones unitarias dentro de la Industria Química y Petroquímica.

Estos son:

<u>CASO</u>	<u>VARIABLES CONOCIDAS</u>	<u>VARIABLES DESCONOCIDAS</u>
1	$\bar{Z}$ , T, P	$\bar{X}$ , $\bar{Y}$ , V, L
2	$\bar{Z}$ , P, V, L	$\bar{X}$ , $\bar{Y}$ , T
3	$\bar{Z}$ , T, V, L	$\bar{X}$ , $\bar{Y}$ , P
4	$\bar{Z}$ , $T_0$ , $P_0$ , $\Delta H=0$ , $P_F$	$\bar{X}$ , $\bar{Y}$ , $T_F$ , $V_F$ , $L_F$

donde:

$\bar{Z}$  = vector de composiciones a la entrada.

$\bar{X}$  = vector de fracciones mol del líquido en el equilibrio.

$\bar{Y}$  = vector de fracciones mol del vapor en el equilibrio.

P = presión total en el equilibrio.

T = temperatura en el equilibrio.

V = cantidad de vapor.

L = cantidad de líquido.

$\Delta H=0$  = expansión isoentálpica.

y los subíndices 0 y F indican propiedades al inicio y al final de una expansión - isoentálpica.

## 2.- SISTEMAS ESTUDIADOS

Los sistemas estudiados fueron escogidos de manera que se pudiera probar el algoritmo propuesto en diferentes situaciones, algunas de ellas extremas, en lo que al comportamiento y las características de los compuestos y por consiguiente de la mezcla se refiere.

A continuación se presenta la tabla de sistemas estudiados:

<u>COMPONENTE</u>	<u>S 1</u>	<u>S 2</u>	<u>S 3</u>	<u>S 4</u>	<u>S 5</u>	<u>S 6</u>
CH <sub>4</sub>		0.5845	0.9430		0.728	
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	0.0044	0.1458	0.2700		0.0546	
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0.9481					
C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>	0.0475	0.0849	0.0740	0.100	0.0302	
iC <sub>4</sub> H <sub>10</sub>		0.0108				
nC <sub>4</sub> H <sub>10</sub>		0.0360	0.0049	0.200	0.0307	
iC <sub>5</sub> H <sub>12</sub>		0.0094				0.300
nC <sub>5</sub> H <sub>12</sub>		0.0148	0.0027	0.300	0.0688	0.400
nC <sub>6</sub> H <sub>14</sub>		0.0629	0.0010	0.400	0.0438	0.300
nC <sub>7</sub> H <sub>16</sub>					0.0375	
CO <sub>2</sub>		0.0355				
N <sub>2</sub>			0.0140		0.0054	
H <sub>2</sub> S		0.0154				

## CAPITULO V

ANALISIS UNIDIMENSIONAL Y  
MULTIDIMENSIONAL DEL PROBLEMA

## ANALISIS UNIDIMENSIONAL Y MULTIDIMENSIONAL DEL PROBLEMA

### 1.- CLASIFICACION DE LOS METODOS NUMERICOS

Los métodos numéricos que se pueden utilizar para la resolución de problemas que involucran ELV en sistemas multicomponentes, en los cuales se toma en cuenta la composición de las fases líquida y vapor (tratamiento estricto), se pueden clasificar en dos grupos de acuerdo a la manera en que se manejen las ecuaciones que definen el sistema:

#### 1.1 MÉTODOS DE PARTICIÓN

#### 1.2 MÉTODOS GLOBALES

#### 1.1 MÉTODOS DE PARTICIÓN

En este caso, se introduce el balance total de materia en los balances de materia por componente y también el balance de energía en el caso en que se estén calculando expansiones. Se introducen las relaciones de equilibrio en los balances de materia de acuerdo al siguiente desarrollo:

$$F = V + L$$

Balance Total

$$z_i F = y_i V + x_i L$$

Balance por Componente

dividiendo  $+ F$

$$z_i = y_i \frac{V}{F} + x_i \frac{L}{F}$$

como  $y_i = K_i x_i$

$$y_i \frac{L}{F} = (1 - \frac{V}{F})$$

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

factorizando  $x_i$

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

despejando  $x_i$

$$x_i = \frac{z_i}{1 - \frac{V}{F} (1 - K_i)}$$

ecuación 4

Las fracciones mоляres de los componentes en la fase vapor se obtienen a partir de las relaciones de equilibrio  $y_i = K_i x_i$  y como en el equilibrio  $\sum x_i = 1$  y  $\sum y_i = 1$ , se puede realizar el cálculo generando una ecuación no lineal, unidimensional en  $T$ ,  $P$  o  $\frac{V}{F}$ , según sea el caso, en la que al resolverse se cumpla simultáneamente el que las dos sumatorias sean igual a uno.

La partición de las ecuaciones se hace separando las variables en dos grupos:

a)  $\bar{X}, \bar{Y}$

b)  $P, T, \frac{V}{F}$

Los vectores  $\bar{X}$  y  $\bar{Y}$  se resuelven por iteraciones sucesivas, normalizando las fracciones mоляres en cada iteración de la o las variables del segundo grupo.

Para el caso 4 (flash isoentálpico) la partición de las ecuaciones es:

a)  $\bar{X}, \bar{Y}$     b)  $P, T$     c)  $\frac{V}{F}$

## 1.2 METODOS GLOBALES

En el caso de los métodos globales, los balances se utilizan tal como se obtienen del problema primitivo solo rearreglándolos de manera que el sistema numérico presente el comportamiento más lineal posible (la linealización se estudia en el Capítulo VIII).

Los balances utilizados son:

total  $F = V + L$

por componente  $z_i F = y_i V + x_i L$   $i = 1, N$

equilibrio por componente  $y_i = K_i x_i$   $i = 1, N$

donde  $K_i = f_i (\bar{X}, \bar{Y}, T, P)$

Resultando de lo anterior un sistema de  $2N + 1$  ecuaciones con el mismo número de incógnitas en los casos 1, 2 y 3 (Capítulo IV-1).

En el caso de que se realice el cálculo de una expansión isoentálpica se tiene que incluir el balance de energía total:

$$F \sum z_i (H_F)_i = L \sum x_i (H_L)_i + V \sum y_i (H_V)_i$$

dónde  $H_i (r, L, v)$  = entalpía molar del componente  $i$  en la corriente indicada.

De este modo, se añade una incógnita más al problema, quedando entonces un sistema de  $2N + 2$  ecuaciones con el mismo número de incógnitas. Esto sería para el caso 4. (Capítulo IV-1).

Asselineau, Bogdanic y Vidal (4), asumen sistemas de  $2N + 4$  y  $2N + 5$  ecuaciones e incógnitas con el fin de usarlos en su segunda opción de inicialización.

## 2.- COMPARACION DE LOS METODOS NUMERICOS

La mayor parte de los algoritmos publicados resuelven el problema del ELV con métodos de partición ya que debido a que las composiciones tienen menos efecto en el equilibrio que en la temperatura o la presión, se puede resolver para  $\bar{X}$  y  $\bar{Y}$  por iteraciones sucesivas normalizando en cada iteración de la(s) otra(s) variable(s), T, P o V y L que se resuelven unidimensional o bidimensionalmente según sea el caso.

El principal problema de los métodos globales es el tiempo de cómputo que se requiere por cada iteración, cuando se desean aplicar métodos como el de Newton-Raphson o los Cuasi-Newton.

Los sistemas van desde  $2N + 1$  hasta  $2N + 4$  ecuaciones e incógnitas (el algoritmo de Asselineau (4) requeriría de  $2N + 5$  ecuaciones para una expansión isoentálpica).

La evaluación de los elementos distintos a cero en el Jacobiano, ya sean evaluados numéricamente o analíticamente requiere mucho tiempo de cómputo y una vez generado el Jacobiano hay que resolver un sistema de ecuaciones lineales en cada iteración - del sistema no lineal si se usa el método de Newton-Raphson y al menos una vez si se usan los métodos Cuasi-Newton.

Aun los métodos Cuasi-Newton (como los de Broyden y sus modificaciones), pue den presentar problemas ya que sólo si la estimación inicial de los parámetros es muy buena o el sistema no presenta problemas de alta no linealidad, se puede resol ver con la evaluación de un solo Jacobiano sin tener que recalcular en iteraciones posteriores.

El número de cálculos por iteración es siempre mayor en un método global que en uno de partición. Por ejemplo, haciendo un análisis comparativo de tiempos de cálculo se encontró que mientras los métodos de partición funcionen no es necesario recurrir a los métodos globales especialmente para sistemas de gran número de componentes (26). En un sistema de 20 componentes, una iteración global equivale a más de 200 iteraciones de un método de partición para cálculos de T, P o  $\frac{V}{P}$ . Lo anterior se debe a que el método global resuelve un sistema de  $41 \times 41$  cuando se trata de 20 componentes (con el método de Asselineau se resolvería un sistema de  $44 \times 44$  y con el de Hirose (7) de  $43 \times 43$ ), y generar sólo los elementos distintos de cero tanto analíticamente como numéricamente y después resolver para  $\Delta X$  en cada iteración, es mucho más laborioso que cualquier método de partición en donde sólo se itera respecto a una variable con un método unidimensional y luego se calculan con nuevas composiciones que se normalizan para continuar con la siguiente iteración.

La desventaja de los métodos de partición es que a veces presentan inestabilidad, especialmente en los cálculos de las cantidades de vapor y líquido a temperatura y presión constantes, lo cual se debe a que se resuelve parte del sistema por iteraciones sucesivas con normalización, donde los cambios en las composiciones entre las iteraciones en ocasiones no son significativos o adecuados, especialmente en las regiones en las que el efecto de  $\bar{Y}$  y  $\bar{Y}$  en  $\bar{K}$  es mayor.

La razón por la que el cálculo de  $\frac{V}{P}$  a presión y temperatura conocidas presenta más inestabilidad es porque  $\frac{V}{P}$  no tiene efecto en  $\bar{K}$ .

## **CAPITULO VI**

### **INICIALIZACION DE LOS CALCULOS**

## INICIALIZACION DE LOS CALCULOS

La inicialización o iniciación de los cálculos consiste en suponer de alguna manera las condiciones en el equilibrio con el fin de comenzar las iteraciones lo más cerca de la solución.

En muchas ocasiones sólo es necesaria una estimación del vector  $\bar{K}$  y luego - seguir las iteraciones, sin embargo, esto no es muy seguro, especialmente a presiones altas. Además con esto se provoca que el cálculo requiera de más iteraciones ya que no se hace un estimado de las condiciones en el equilibrio, sino solamente del vector  $\bar{K}$  con el que se calculan los vectores  $\bar{X}$  y  $\bar{Y}$  directamente.

Es mejor y más seguro inicializar con un cálculo ideal por dos motivos:

Primer: las iteraciones con  $\bar{K}$  ideales no requieren de ninguna manera el tiempo que necesitan las iteraciones no ideales, además, un cálculo ideal requiere menos de 7 iteraciones (la mayor parte de las veces se observaron 3 o menos). La función de error utilizada para los cálculos ideales:

$$f(\bar{Y}) = \ln\left(\frac{\sum Y_i}{\bar{Y}_I}\right) = 0$$

donde  $\bar{Y}$  es una variable función de  $P$ ,  $T$  o  $\frac{V}{F}$ , disminuye de  $10^{-1}$  a  $10^{-14}$  en ese número de iteraciones.

Segundo: se logra mucho más estabilidad, por lo que se obtiene seguridad y rapidez simultáneamente.

En la inicialización se asume que el sistema es ideal y se calculan las condiciones en el equilibrio. Al obtener la convergencia se ataca el problema considerando ya el cálculo riguroso en donde  $\bar{K} = \bar{T}(T, P, \bar{X}, \bar{Y})$ .

Generalmente el cálculo inicial ideal no es muy bueno en  $T$ ,  $P$  o  $\frac{V}{F}$ , pero - genera un estimado de los vectores  $\bar{X}$  y  $\bar{Y}$  proporcionalmente buenos.

Se probaron dos opciones para inicializar los cálculos:

a) Presiones de vapor con la ecuación de Antoine

donde

$$K_i \text{ ideal} = \frac{P_i^0}{P_{\text{total}}}$$

siendo  $P_i^0$  la presión de vapor del componente definido por:

$$\log P_i^0 = A - \frac{B}{C + T}$$

siendo A, B y C las constantes reportadas por Antoine para el cálculo de las presiones de vapor de cada compuesto.

b) Correlación de Michelsen (13), donde  $K_i = f_i(T, P, T_{ci}, P_{ci})$ :

$$K_i = \frac{P_{ci}}{P} \exp \left( 5.42 (1 + u_i) \left( 1 - \frac{T_{ci}}{T} \right) \right)$$

Encontrando como mejor opción la de Michelsen, ya que además de simple pues sólo requiere datos de temperatura y presión del sistema y temperaturas y presiones críticas de los compuestos (datos que se utilizan en el cálculo final), sus desviaciones son generalmente estimados de temperatura más bajos a las reales, lo que favorece a los cálculos en muchos casos. La única deficiencia es que no arroja muy buenos estimados en sistemas que contienen hidrógeno.

A presiones bajas, las dos opciones dan prácticamente los mismos resultados y no afectan el número de iteraciones.

Cuando no se aplica el método de Michelsen se recomienda utilizar presiones de vapor. Si se trata de sistemas a altas presiones, para los hidrocarburos y gases orgánicos en los cuales funcione, aplicar el método de Michelsen y para el hidrógeno aplicar el método de las presiones de vapor.

El estudio de la inicialización incluye una subinicialización para el caso del cálculo de  $\frac{V}{F}$ , esto es, una inicialización del cálculo ideal.

El desarrollo de esta subinicialización parte de los estimados de los puntos de burbuja (donde  $\bar{r}_V = 0$ , siendo  $\bar{r}_V$  una función de  $\frac{V}{F}$ ) y el de rocío ( $\bar{r}_L = 1$ ).

Esto permite que después de un análisis en un bloque de decisiones dentro del programa se obtenga un estimado de  $\frac{V}{F}$  cercano al ideal.

El tratamiento matemático de las ecuaciones es el siguiente:

$$f\left(\frac{V}{F}\right) = f(\bar{r}_V) = \ln \frac{\sum x_i}{\sum y_i} = 0 \quad \text{ecuación 5}$$

derivando  $\frac{V}{F}$

$$f'(\bar{r}_V) = \frac{(\sum y_i)'}{\sum y_i} - \frac{(\sum x_i)'}{\sum x_i} \quad \text{ecuación 6}$$

partiendo de la ecuación 4 tenemos que los valores extremos posibles de  $\frac{V}{F}$  son.

PARA  $\bar{r}_V = 0$

$$\sum x_i = \sum z_i$$

$$\sum y_i = \sum x_i K_i$$

$$\sum x_i' = \sum z_i (1 - K_i)$$

$$\sum y_i' = \sum z_i K_i (1 - K_i)$$

PARA  $\bar{r}_V = 1$

$$\sum x_i = \sum z_i / K_i$$

$$\sum y_i = \sum z_i$$

$$\sum x_i' = \sum z_i (1 - K_i) / K_i^2$$

$$\sum y_i' = \sum z_i (1 - K_i) / K_i$$

La primer iteración utilizando el método de Newton es:

$$f(0) = 0 = \frac{\bar{r}_V}{\bar{r}_V} \quad \text{ecuación 7}$$

$$f(1) = 1 = \frac{\bar{r}_V}{\bar{r}_V} \quad \text{ecuación 8}$$

Si sustituimos los valores de  $\sum x_i$ ,  $\sum y_i$ ,  $\sum x_i'$  y  $\sum y_i'$  para  $\bar{r}_V = 0$  y  $\bar{r}_V = 1$  en las ecuaciones 5 y 6 y aplicamos estas a las ecuaciones 7 y 8 se tiene:

$$I(0) = 0 - \frac{\ln \frac{y_{1,0}}{x_{1,0}}}{\frac{y_{1,1}'}{y_{1,0}} - \frac{x_{1,1}'}{x_{1,0}}}$$

$$I(1) = 1 - \frac{\ln \frac{y_{1,1}}{x_{1,1}}}{\frac{y_{1,1}'}{y_{1,1}} - \frac{x_{1,1}'}{x_{1,1}}}$$

Matemáticamente existen nueve situaciones distintas respecto a los estimados iniciales en relación a los calculados rigurosamente, ya que la inicialización puede predecir tres casos; vapor, líquido o dos fases, mientras que el cálculo riguroso puede llegar a los mismos tres resultados. En ocasiones, cuando la inicialización predice una sola fase, se recomienda calcular los puntos de rocío y burbuja para checar si el sistema se encuentra en dos fases ya que muchas veces la inicialización no genera datos correctos respecto al número de fases y no se tienen valores de composición adecuados por lo que existen problemas de convergencia.

El criterio utilizado para comprobar si el sistema se encuentra en la región de dos fases es:

a) Si  $\sum \frac{z_i}{K_i} < 1$ , entonces el sistema se encuentra en fase vapor

b) Si  $\sum z_i K_i < 1$ , entonces el sistema se encuentra en fase líquida

Un criterio práctico es el siguiente; si todas las  $K_i$  son mayores a 1, entonces el sistema se encuentra en fase vapor, y si por el contrario, todas las  $K_i$  son menores a 1, el sistema se encuentra en fase líquida.

## **CAPITULO VII**

### **CALCULO DE LAS DERIVADAS**

## CALCULO DE LAS DERIVADAS

### 1.- METODOS DE PARTICION

El cálculo numérico de las derivadas de las "constantes" de equilibrio con respecto a  $\gamma_T$  y  $\gamma_p$  es muy ventajoso con respecto al analítico ya que consume menos tiempo de cómputo y presenta mucha estabilidad, por lo que las derivadas para los métodos de partición fueron calculadas en forma seminumérica, es decir, se derivó analíticamente la función de error, dejando indicadas las derivadas de las constantes de equilibrio respecto a  $\gamma_T$  o  $\gamma_p$ , la cual se evaluó numéricamente.

Por ejemplo:

Cálculo de temperatura :

Fórmula de recurrencia de Newton:

$$\gamma_{Tl+1} = \gamma_{Tl} - \frac{f(\gamma_T)}{f'(\gamma_T)}$$

donde  $\gamma_T$  es una variable utilizada para linearizar la función error pudiendo ser cualquier relación de temperatura, por ejemplo  $T$ ,  $1/T$ ,  $T^2$ ,  $1/T^2$ ,  $T^3$ ,  $1/T^3$ ,  $\ln(T)$ ,  $1/\ln(T)$ , etc.

función error       $f(\gamma_T) = \ln \frac{\Sigma y_i}{\Sigma x_i} = 0$

derivada             $f'(\gamma_T) = \frac{\Sigma y_i'}{\Sigma y_i} - \frac{\Sigma x_i'}{\Sigma x_i} = - \frac{\sum z_i \frac{\partial k_i}{\partial \gamma_T}}{(1-V/F(1-K_1))^2}$

como                 $\sum x_i = \sum \frac{z_i}{1 - \frac{V}{F}(1 - K_1)}$

la derivada de  $\Sigma x$  respecto a  $\gamma_T$  es:

$$\frac{\partial \Sigma x}{\partial \gamma_T} = - \sum \frac{z_i (\frac{V}{F}) (\frac{\partial k_i}{\partial \gamma_T})}{(1 - \frac{V}{F}(1 - K_1))^2}$$

donde el término  $\frac{\partial k_i}{\partial \gamma_T}$  se evalúa numéricamente.

Para evaluar  $\Sigma y_i$  se aplica la relación de equilibrio  $y_i = K_i x_i$  y se procede en la siguiente forma:

$$\Sigma y_i = \Sigma x_i K_i$$

derivando  $\frac{\partial \Sigma y_i}{\partial T} = \frac{\partial \Sigma x_i K_i}{\partial T}$

entonces  $\frac{\partial \Sigma y_i}{\partial T} = \left( \frac{\partial \Sigma x_i}{\partial T} \right) K_i + \left( \frac{\partial K_i}{\partial T} \right) (\Sigma x_i)$

y al igual que en el cálculo de  $\Sigma x_i$  la  $\frac{\partial K_i}{\partial T}$  se calcula numéricamente.

Para el cálculo de la presión se procede en forma similar sólo que como es obvio las derivadas serán con respecto a  $T_p$ .

En el caso del cálculo de la relación de vaporización V/F, las derivadas se calculan analíticamente ya que la constante de equilibrio no depende de V/F, simplificándose las derivadas de  $\Sigma x_i$  y  $\Sigma y_i$  así:

$$\frac{\partial \Sigma x_i}{\partial V/F} = \sum \frac{z_i(1-K_i)}{(1-V/F(1-K_i))^2}$$

$$\frac{\partial \Sigma y_i}{\partial V/F} = \sum K_i \frac{\partial \Sigma y_i}{\partial T}$$

## 2.- METODOS GLOBALES

En el caso de los métodos globales el cálculo de las derivadas es distinto ya que se requieren  $(2N+1)^2$  derivadas parciales y como ya se ha mencionado, en algunos algoritmos hasta  $(2N+5)^2$ .

Muchos de los elementos son cero y para algunas opciones de vectores de funciones error muchos elementos son 1 ó -1, sin embargo ya sea que se calculen numéricamente o analíticamente, el tiempo de cómputo consumido en el cálculo de las derivadas en métodos globales es alto comparado con los métodos de partición.

A continuación se desarrolla un ejemplo de la evaluación de un jacobiano para los casos 1, 2 y 3 mencionados en el Capítulo IV, que aunque no se realizó en la elaboración del algoritmo propuesto en esta Tesis (básicamente por falta de memoria y rapidez de la microcomputadora que se utilizó para su desarrollo), sirve para demostrar el hecho de que este tipo de métodos de solución consume más tiempo de cómputo que los métodos de partición debido al gran número de operaciones que se tienen que realizar.

Se tiene un sistema de  $2N+1$  ecuaciones con el mismo número de incógnitas, donde  $N$  es el número de compuestos de la mezcla.

Este vector se puede dividir en tres subvectores de acuerdo a su significado físico:

### TAMARO

1. Balances de materia por componente	$N$
2. Relaciones de equilibrio por componente	$N$
3. Relación estequiométrica	1

y a su vez, las variables también se pueden clasificar en tres grupos:

TAMARO

- |                                     |   |
|-------------------------------------|---|
| 1. Fracciones molares en el líquido | M |
| 2. Fracciones molares en el vapor   | M |
| 3. Temperatura, presión o V/F       | I |

Dado que el vector de funciones se puede dividir en tres y el vector de incógnitas también, entonces el jacobiano se puede dividir en nueve subjacobianos, representando cada uno la variación de un grupo de funciones respecto a un grupo de variables.

A continuación se representa en forma esquemática el jacobiano dividido en subjacobianos:

1	2	3
01.1	01.2	01.3
4	5	6
02.1	02.2	02.3
7	8	9
03.1	03.2	03.3

Como se puede observar, los nueve subjacobianos se pueden agrupar en tres tipos:

- a) Subjacobianos matriciales de tamaño  $N^2$  (cuatro)
- b) Subjacobianos vectoriales de tamaño  $N^2$  (cuatro)
- c) Subjacobiano escalar (uno)

A continuación se presenta la configuración del jacobiano, su localización dentro del arreglo  $J$ , su identificación y su contenido.

<i>i</i>	IDENTIFICACION	LOCALIZACION	CONTENIDO
1	D 1.1	$J_{i,j}$	$\frac{\partial F_i}{\partial x_j}$
2	D 1.2	$J_{i,N+j}$	$\frac{\partial F_i}{\partial y_j}$
3	D 1.3	$J_{i,2N+1}$	$\frac{\partial F_i}{\partial \psi_j}$
4	D 2.1	$J_{N+i,j}$	$\frac{\partial F_{N+i}}{\partial x_j}$
5	D 2.2	$J_{N+i,N+j}$	$\frac{\partial F_{N+i}}{\partial y_j}$
6	D 2.3	$J_{N+i,2N+1}$	$\frac{\partial F_{N+i}}{\partial \psi_j}$
7	D 3.1	$J_{2N+1,j}$	$\frac{\partial F_{2N+1}}{\partial x_j}$
8	D 3.2	$J_{2N+1,N+j}$	$\frac{\partial F_{2N+1}}{\partial y_j}$
9	D 3.3	$J_{2N+1,2N+1}$	$\frac{\partial F_{2N+1}}{\partial \psi_j}$

El último Jacobiano en realidad es un escalar que además siempre es cero, independientemente del tipo de cálculo a realizar, dado que la relación estequiométrica sólo involucra las composiciones por ejemplo ;  $\Sigma x_i = \Sigma y_i = 0$ , y dado que en este caso las composiciones no son expresadas como función de  $\Psi$  ( siendo  $\Psi$  un parámetro que es función de la temperatura, presión o V/F ), sino como variables independientes, se tiene que siempre será cero para todo  $\Psi$  y para cualquier relación estequiométrica.

## **CAPITULO VIII**

**LINEALIZACION Y ACCELERACION  
DE LA CONVERGENCIA**

## LINEALIZACION Y ACCELERACION DE LA CONVERGENCIA

Son muy frecuentes en los cálculos de Ingeniería Química las situaciones que pueden describirse con sistemas de ecuaciones no lineales (algebráicas y/o diferenciales). En muchos de éstos casos el comportamiento numérico es tal que suelen presentarse problemas de convergencia, Inicialización, estabilidad y tendencias a soluciones que cumplen matemáticamente pero que no tienen ningún significado real.

Existe una fuerte tendencia a pensar que cuando se presentan este tipo de problemas al cambiar el método numérico utilizado por uno "mejor" es la solución más adecuada, cuando en realidad, el plantear el problema de otra forma (matemáticamente), es una manera más segura y rápida de solucionar las fallas que se presentan. Para dar este tipo de tratamiento a los problemas, se necesita más de un conocimiento de los mismos que de altas matemáticas. El plantear el problema de otra forma significa encontrar otro sistema de ecuaciones que sea un equivalente funcional del sistema original, pero que presente un comportamiento más lineal, esto es, hacer cambios de variables y de funciones con el fin de linealizar el sistema.

Este tipo de estudio se justifica únicamente para el caso de programas que se utilizan muchas veces y consumen mucho tiempo de cómputo, o bien para problemas que resuelven sistemas altamente no lineales. Los ejemplos más abundantes de estas situaciones se encuentran en los simuladores de procesos.

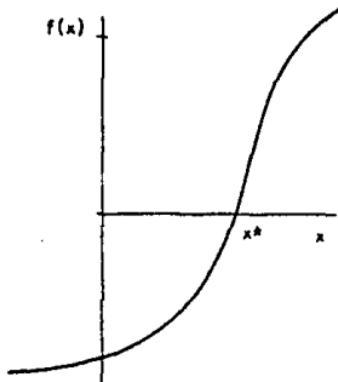
### 1.- LINEALIZACION EN ECUACIONES NO LINEALES UNIDIMENSIONALES

Possiblemente este es el tipo de problema numérico más conocido y más frecuente dentro de la Ingeniería Química y consiste en resolver una ecuación con una incógnita no despejable por procedimientos algebraicos.

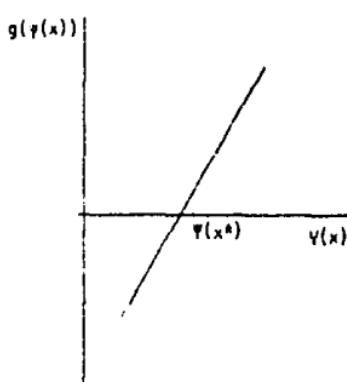
Glumbir y Olujic (16) presentaron un estudio comparativo de los métodos numéricos utilizados para este propósito, analizándolos desde el punto de vista netamente numérico. En realidad, lo más importante para resolver con eficiencia un problema de este tipo es encontrar un equivalente funcional más lineal, es decir una forma de la función a resolver y un parámetro de iteración auxiliar que permitan encontrar una ecuación equivalente a la original pero de comportamiento más lineal.

Por ejemplo, si originalmente se desea resolver  $f(x) = 0$ , se pueden hacer cambios de variable y/o darle otra forma a  $f(x)$  de modo que siga teniendo la misma raíz o raíces. Para fines de ingeniería lo mejor es que garantice una sola raíz, la real. Al hacer el cambio de variable se genera la nueva variable  $\psi(x)$  y el equivalente funcional de  $f(x)$  es  $g(\psi(x))$ , el cual es más lineal, converge más rápido y depende menos del valor inicial estimado para empezar las iteraciones, por lo que es más estable.

Gráficamente esto se representa de la siguiente manera:



GRAFICA XX



GRAFICA XXI

donde  $x^*$  es la solución de  $f(x) = 0$  y  $\psi(x^*)$  es la solución de  $g(\psi(x)) = 0$ .

En la mayor parte de los casos estos cambios se pueden hacer en base al conocimiento de las características del problema. Por ejemplo, si se desea calcular el punto de rocio de un sistema multicomponente ideal, se tiene  $f(T) = \sum x_i - 1 = 0$  que puede cambiarse por un equivalente funcional  $f(T) = \ln \sum x_i = 0$ , o por uno mejor como  $g(1/T) = \ln \sum x_i = 0$ .

Si se aplican las tres opciones anteriores con el método de Newton unidimensional de primer orden, con derivada analítica, se observan diferencias bastante notables en la velocidad y el número de iteraciones utilizadas para llegar a la solución. Por ejemplo, para el sistema butano, pentano, hexano (27), a varias presiones y con varias temperaturas se obtuvieron los siguientes resultados:

FUNCION	$f(T) = \text{Ex}_1 - 1 = 0$	$F(T) = \ln \text{Ex}_1 = 0$	$g(1/T) = \ln \text{Ex}_1 = 0$
NUMERO DE ITERACIONES	70	4	2

El mismo tipo de comportamiento se puede observar en diferentes sistemas variando el número de iteraciones en proporciones similares.

Analizando este y otros ejemplos se puede observar que si se trata de obtener seguridad, rapidez, estabilidad y un mínimo de problemas de inicialización, es mejor hacer cambios de función y de variable, que buscar un método numérico más refinado - como por ejemplo el de Richmond (27), o el de Newton de segundo orden aplicados a  $f(T)$ .

En el ejemplo anterior no mejorarían el número de iteraciones que haría el método de la secante aplicado a  $g(1/T)$  y por lo tanto el tiempo de cómputo sería - mejor en el método de la secante ya que las iteraciones de Richmond y Newton de segundo orden requieren la evaluación de la primera y segunda derivadas.

A continuación se presentan las fórmulas de recurrencia de algunos de los métodos numéricos más usados para la resolución de ecuaciones no lineales unidimensionales:

Método

Recurrencia para resolver  $f(x) = 0$

BISECCION

$$x_{l+1} = \frac{x_{l-1} + x_l}{2}$$

SECANTE  
REGLA FALSA  
ILLINOIS  
PEGASO, ETC.

$$x_{l+1} = \frac{x_l f(x_{l-1}) - x_{l-1} f(x_l)}{f(x_{l+1}) - f(x_l)}$$

NEWTON DE PRIMER ORDEN CON DERIVADA ANALITICA

$$x_{l+1} = x_l - \frac{f(x_l)}{f'(x_l)}$$

NEWTON DE PRIMER ORDEN CON DERIVADA NUMERICA

$$x_{l+1} = x_l - \frac{(k-1)x_l f(x_l)}{f(k \cdot x_l) - f(x_l)}$$

ver nota 1

NEWTON DE SEGUNDO ORDEN

ver nota 2

$$x_{l+1} = x_l - \frac{2f(x_l)}{f'(x_l) + \sqrt{f'(x_l)^2 - 2f(x_l)f''(x_l)}}$$

ver nota 3

RICHMOND DE SEGUNDO ORDEN

$$x_{l+1} = x_l + \frac{2f(x_l)f'(x_l)}{2f'(x_l)^2 - f(x_l)f''(x_l)}$$

Fórmulas de recurrencia para los métodos numéricos más usados en la resolución de ecuaciones no lineales unidimensionales.  $f(x) = F(x) = g(\psi(x))$ .  $\psi^{-1}$  es la función inversa a  $\psi$ .

Los métodos que aquí se indican como de primero y segundo orden a veces se les dice de 2o y 3er orden de acuerdo a los números de términos que utiliza en la expansión por series de Taylor.

NOTAS:

1.- La fórmula de recurrencia asume a  $f'(x)$  como

$$f'(x) = \frac{f(k \cdot x) - f(x)}{x(k-1)}$$

con  $1.001 \leq k \leq 1.0000001$  es un valor que puede recomendar y prácticamente no depende del orden de magnitud de  $x$ , mientras que los intervalos sumados "h" dependen del orden de magnitud de  $x$ , el inconveniente es que la expresión mostrada no aplica en  $x=0$ , por lo que cerca del cero se recomienda usar:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

que aunque no es tan buena como si los desplazamientos en  $x$  fueran  $x+h/2$  y  $x-h/2$  tiene la ventaja que sólo se evalúa  $f(x)$  en  $x$  y en  $x+h$  o bien  $k \cdot x$  o sea en el punto base y en el punto incrementado, el desplazamiento a los lados usando  $k$  en vez de  $h$  sería a  $x(2-k)$ .

Cuando se aplique la derivada usando  $h$ , dado que será cerca del cero también se puede fijar  $h$  ya que cerca de este valor  $h$  presenta estabilidad cerca de  $10^{-8}$ .

2.- La opción alternativa es más conocida pero presenta más errores de redondeo,

$$x_{i+1} = x_i - \frac{-f'(x) \pm (\sqrt{f'(x)^2 - 2f''(x)f(x)})^{0.5}}{f''(x)}$$

3.- Se toma el signo de  $f'(x)$  en el denominador, de modo que  $\Delta x$  sea menor.

Como ejemplo se muestra la fórmula de recurrencia para el método de Newton unidimensional de primer orden con derivada analítica en el caso de que se suponga  $\Psi(x) = \ln x$ :

$$x_{i+1} = e^{(\ln(x_i) - \frac{g(\ln x_i)}{g'(\ln x_i)})}$$

Si  $\Psi(x) = \frac{1}{x}$

entonces  $x_{i+1} = \frac{1}{\frac{1}{x_i} - \frac{g(1/x_i)}{g'(1/x_i)}}$

o bien, si se desea usar la derivada numérica, para el primer caso se tendrá:

$$x_{i+1} = e^{(\ln x_i - \frac{g(\ln x_i) - g(\ln x_{i-1})}{g(k \cdot \ln x_i) - g(\ln x_{i-1})})}$$

y si las evaluaciones se hacen con  $F(x)$ :

$$x_{i+1} = e^{(\ln x_i - \frac{(k-1) \cdot \ln(x_i) F(x_i)}{F(x_k) - F(x_i)})} = x_i \frac{(F(x_k) - k F(x_i))}{(F(x_k) - F(x_i))}$$

## 2.- LINEALIZACION EN LOS CALCULOS DE T, P Y V/F

Para el caso de los cálculos de temperatura, presión y la relación de vaporización V/F se estudiaron cuatro funciones de error, 15 parámetros de iteración para T, 10 para P y 20 para V/F.

Las funciones error estudiadas son:

$$\ln(\Sigma y_i / \Sigma x_i) = 0$$

$$\Sigma y_i - \Sigma x_i = 0$$

$$\Sigma y_i^3 - \Sigma x_i^2 = 0$$

$$\ln(\Sigma y_i^3 / \Sigma x_i^2) = 0$$

Los parámetros de iteración estudiados son:

	T	P	V/F
1	T	P	V/F
2	1/T	1/P	(1-V/F) <sup>2</sup>
3	T <sup>2</sup>	P <sup>2</sup>	(10-V/F) <sup>1/2</sup>
4	1/T <sup>2</sup>	1/P <sup>2</sup>	(50-V/F) <sup>1/2</sup>
5	T <sup>3</sup>	P <sup>3</sup>	(100-V/F) <sup>1/2</sup>
6	1/T <sup>3</sup>	1/P <sup>3</sup>	(10-V/F) <sup>1/3</sup>
7	T <sup>4</sup>	P <sup>4/3</sup>	(50-V/F) <sup>1/3</sup>
8	1/T <sup>4</sup>	1/P <sup>4/3</sup>	(100-V/F) <sup>1/3</sup>
9	ln(T)	ln(P)	ln(V/F)
10	1/ln(T)	1/ln(P)	e(V/F)
11	ln(ln(T))		e(1-V/F)
12	1/(1-1/T)		V/F <sup>1/2</sup>
13	ln(1/T)		e(10V/F)
14	T <sup>1/2</sup>		(1+V/F)
15	1/T <sup>1/2</sup>		(1+V/F) <sup>2</sup>
16			(1+V/F) <sup>1/2</sup>
17			e(1+V/F)
18			ln(1+V/F)
19			(1+V/F) <sup>3</sup>
20			(1+V/F) <sup>1/3</sup>

En el apéndice B se muestran algunos ejemplos de las pruebas de linearización realizadas.

Las funciones error estudiadas son:

$$\ln(\Sigma y_i / \Sigma x_i) = 0$$

$$y_i - x_i = 0$$

$$y_i^2 - x_i^2 = 0$$

$$\ln(\Sigma y_i^2 / \Sigma x_i^2) = 0$$

Los parámetros de iteración estudiados son:

	T	P	V/F
1	T	P	V/F
2	1/T	1/P	(1-V/F) <sup>2</sup>
3	T <sup>2</sup>	P <sup>2</sup>	(10-V/F) <sup>1/2</sup>
4	1/T <sup>2</sup>	1/P <sup>2</sup>	(50-V/F) <sup>1/2</sup>
5	T <sup>3</sup>	P <sup>3</sup>	(100-V/F) <sup>1/3</sup>
6	1/T <sup>3</sup>	1/P <sup>3</sup>	(10-V/F) <sup>1/3</sup>
7	T <sup>4</sup>	P <sup>4</sup>	(50-V/F) <sup>1/4</sup>
8	1/T <sup>4</sup>	1/P <sup>4</sup>	(100-V/F) <sup>1/4</sup>
9	ln(T)	ln(P)	ln(V/F)
10	1/ln(T)	1/ln(P)	e(V/F)
11	ln(ln(T))		e^(1-V/F)
12	1/(1-1/T)		V/F <sup>1/2</sup>
13	.ln(1/T)		e^(10V/F)
14	T <sup>1/2</sup>		(1+V/F)
15	1/T <sup>1/2</sup>		(1+V/F) <sup>2</sup>
16			(1+V/F) <sup>1/2</sup>
17			e^(1+V/F)
18			ln^(1+V/F)
19			(1+V/F) <sup>3</sup>
20			(1+V/F) <sup>1/3</sup>

En el apéndice D se muestran algunos ejemplos de las pruebas de linearización realizadas.

Para poder visualizar claramente los resultados de las pruebas de linealización, se resumió en gráficas el comportamiento de las funciones error y los parámetros de iteración en los cálculos.

Como se observa en las gráficas XXII, XXIII y XXIV, la función error que presentó los mejores resultados en las pruebas de cálculo de temperatura, presión y V/F fué  $\ln(\Sigma y / \Sigma x)$ , ya que funcionó más eficientemente que las demás en la mayoría de los cálculos. El término frecuencia en las gráficas indica el número de veces en los que una función error arrojó mejores resultados que las otras (en cuanto a menor tiempo y mayor linealidad de los cálculos iterativos).

Al analizar el comportamiento de los cálculos en función de los parámetros de iteración, se tiene que para temperatura los parámetros más eficientes son:  $\ln(T)$ ,  $1/\ln(T)$ ,  $1/T^2$ , seguidos por  $1/T^3$  (Gráfica XXV).

En el caso de los cálculos de presión, el parámetro que mostró el comportamiento más eficiente fué  $1/P^{1/2}$ , seguido por  $P^{1/2}$ ,  $1/P$  y  $\ln(P)$ , (Gráfica XXVI).

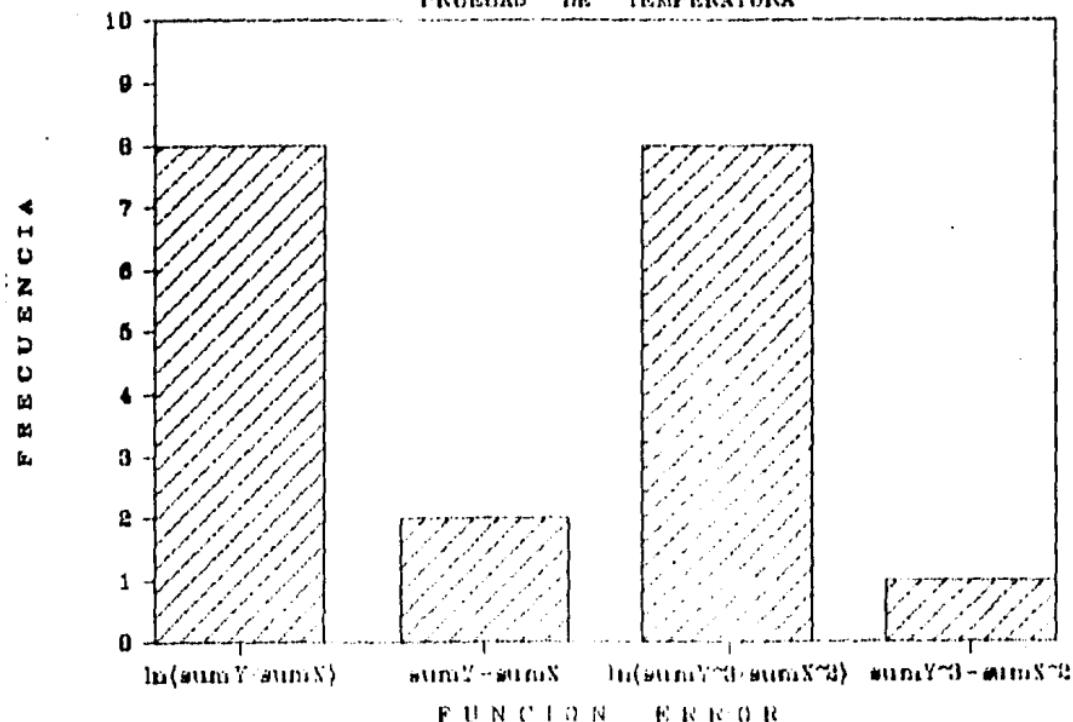
En los cálculos de V/F destacaron dos parámetros de iteración.  $\ln(1+V/F)$  y  $(1+V/F)^2$ , seguidos por  $(1+V/F)$ , (Gráfica XXVII).

De forma similar que en el caso del análisis de funciones error, el término frecuencia indica el número de veces que alguno o algunos parámetros de iteración fueron mejores a otros en determinado cálculo (menor tiempo y mayor linealidad de los cálculos).

GRAFICA XXII

## Analisis de Funciones Error

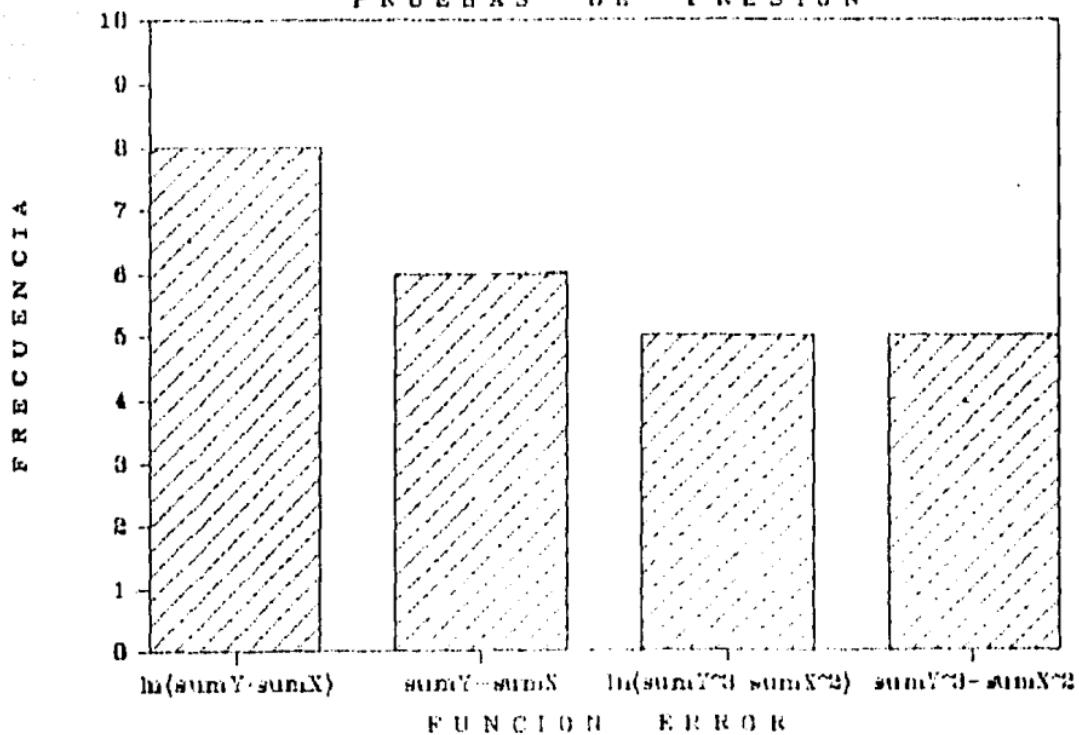
PRUEBAS DE TEMPERATURA



GRAFICA XXIII

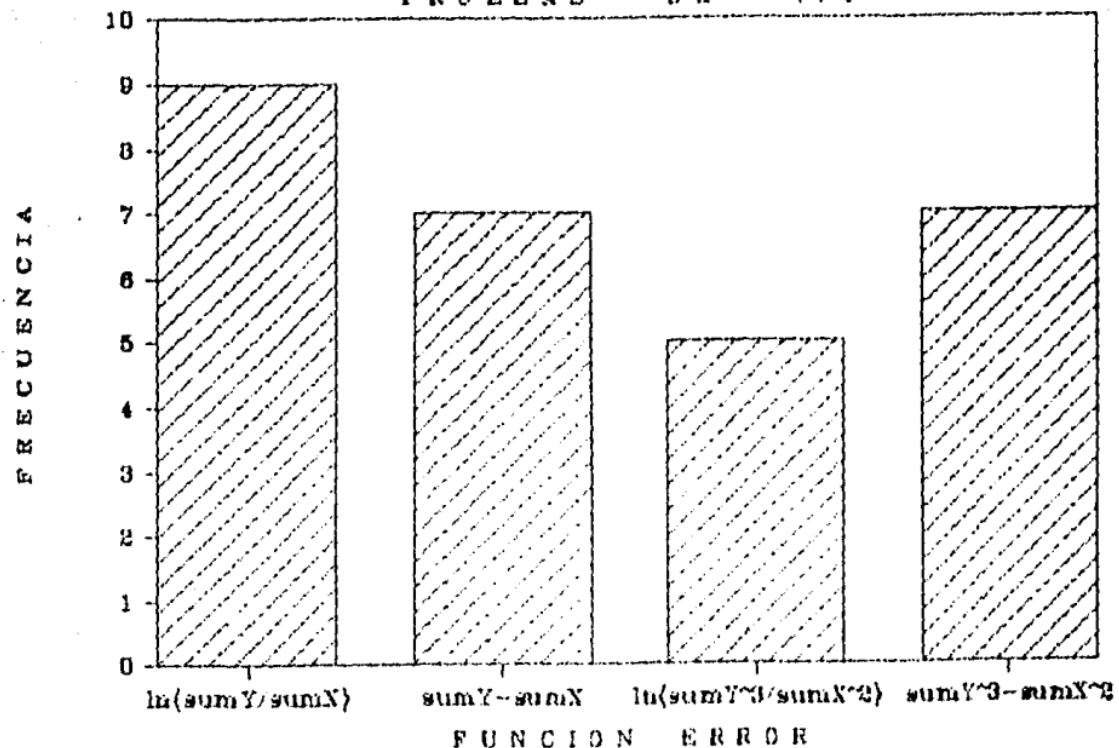
# Analisis de Funciones Error

PRUEBAS DE PRESION



GRAFICA XXIV

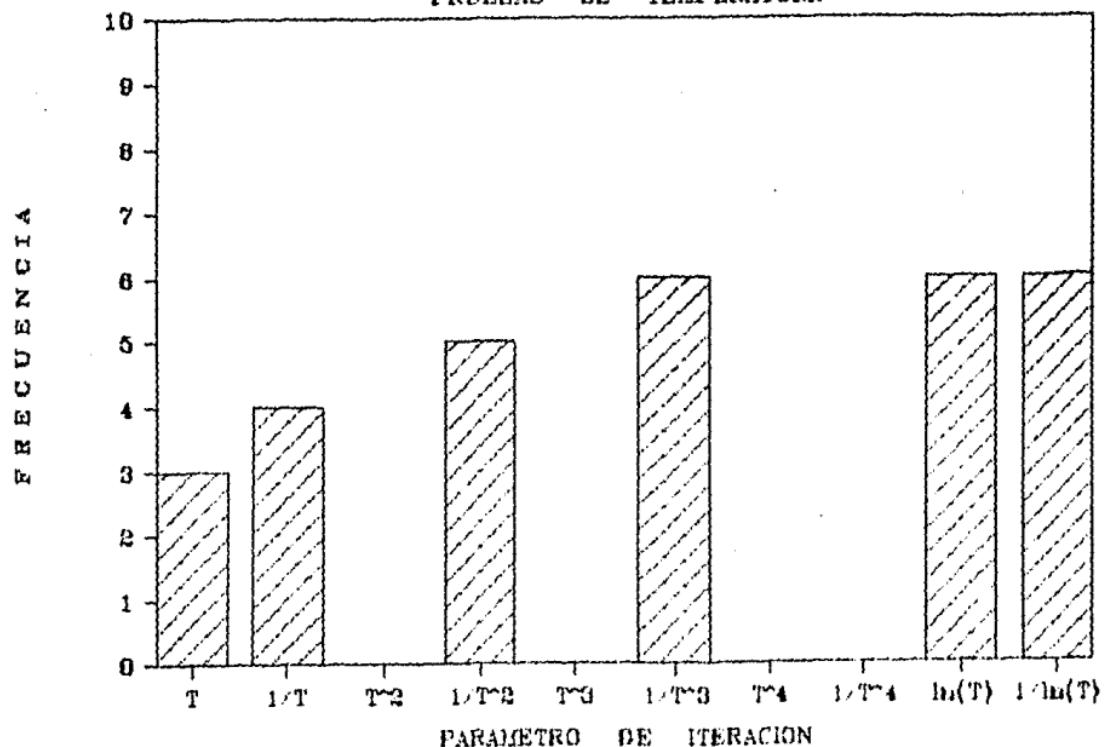
# Analisis de Funciones Error PRUEBAS DE V/F



GRAFICA XXV

## Analisis de Parametros de Iteracion

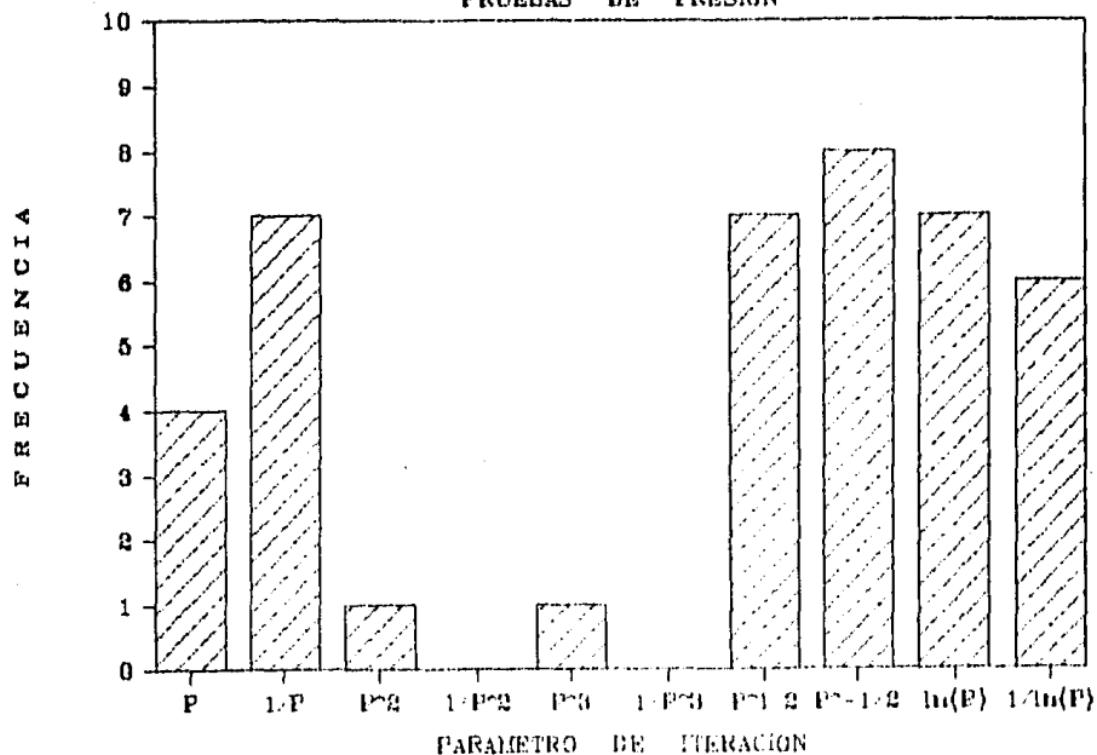
PRUEBAS DE TEMPERATURA



GRAFICA XXVI

# Analisis de Parametros de Iteracion

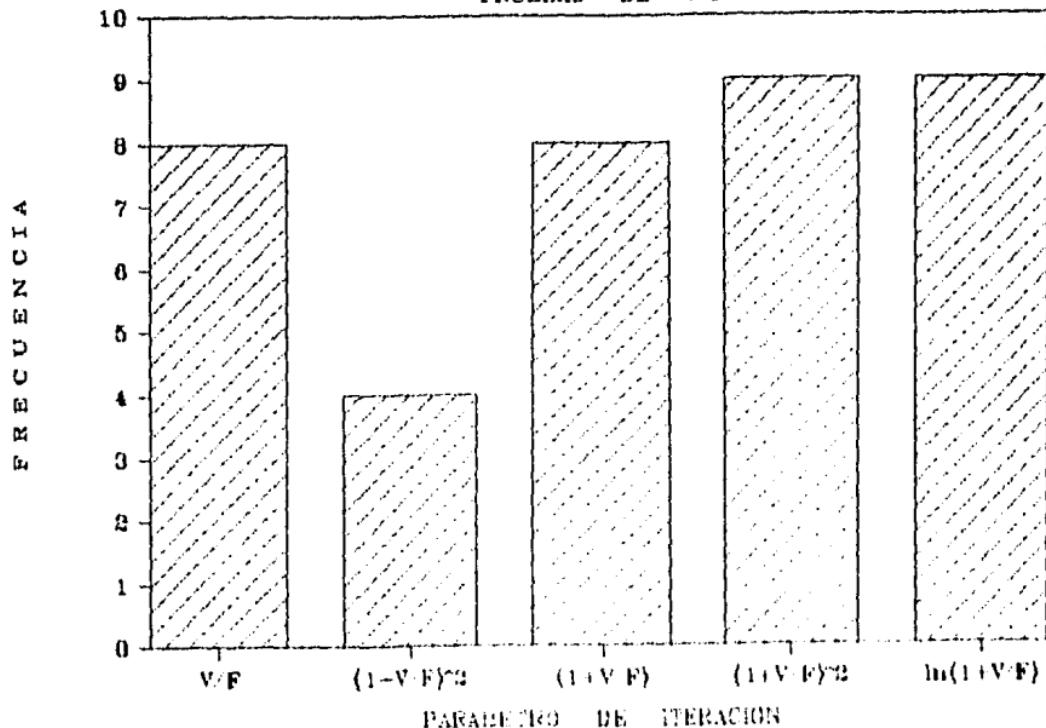
PRUEBAS DE PRESION



GRAFICA XXVII

## Analisis de Parametros de Iteracion

PRUEBAS DE V/F



### 3.- LINEALIZACION EN LOS CALCULOS ISOENTALPICOS

En este caso la partición de acuerdo a las variables es:

- a)  $\bar{X}, \bar{Y}$
- b)  $T, P$
- c)  $V/F$

Se asumió la función de error para el balance de materia  
 $f_1 (\bar{Y}, V/F) = \ln(\sum y_i / X_i)$ , y para el balance de energía se analizaron los siguientes parámetros de iteración con las funciones de error que se indican posteriormente.

Caso 4: T,  $\ln T$ ,  $1/T$ ,  $1/(1-1/T)$

Para la función de error  $f_2$  se probaron:

$$1.- \frac{H_M - H_F}{H_V}$$

$$2.- \frac{H_M - H_F}{H_V + H_L}$$

$$3.- e^{H_M/H_F} \cdot e^{H_F} - H_M$$

$$4.- \frac{H_M}{H_F} \left( 1 - e^{\frac{H_M - H_F}{H_M}} \right)$$

Encontrando que la función 1 es la mejor ya que al dividir entre  $H_V$  y no entre una constante como algunos autores sugieren, no sólo se normaliza el cálculo en cada iteración, también se linealiza.

La mecánica que se siguió para realizar los cálculos es la siguiente:

- 1.- Se calculan el equilibrio y las entalpias del vapor y el líquido antes del flash isoentalpico.
- 2.- A la presión de salida del flash se supone una temperatura con la que se calculan entalpias de vapor y líquido.
- 3.- Se compara la función error  $f_2$  con la tolerancia y en caso de ser menor se llegó al resultado.
- 4.- En caso contrario se calcula una nueva temperatura con la fórmula de recurrencia y se vuelve a hacer el cálculo del punto 2.

El caso que se estudió como prueba del flash adiabático es un ejemplo extraído de los apuntes de un curso de simulación impartido por el Dr. Seader en la -- E.S.I.Q.I.E.(15).

Como se observa, la temperatura obtenida en los resultados reportados en el ejemplo varía según la ecuación de estado utilizada.

En el caso de los cálculos realizados con la ecuación de Grayson-Streed es de 390.06 K y en los realizados con la ecuación de Soave-Redlich-Kwong es de 388.72 K, lo que significa que con una caída de presión de 1064.5 kPa, la temperatura descendió 31.83 K y 33.17 K dependiendo el caso.

Los cálculos realizados con el algoritmo propuesto arrojan una diferencia de - menos de 1 K entre sí.

Utilizando la ecuación de Soave-A.P.I., se obtuvo como resultado una temperatura de 393.017 K, con la ecuación de Soave-Redlich-Kwong de 393.002 K y con la ecuación de Peng-Robinson de 393.21 K.

**FLASH ADIABATICO**

**Sistema 6**

**ALIMENTACION**

<u>Compuesto</u>	<u>Z (%)</u>	<u>Condiciones</u>
IC3	0.3	T= 421.89 K
oC3	0.4	P= 1774.015 kPa
cC6	0.3	

**SALIDA**

**Resultados reportados**

Chao-Seader (Grayson-Streed)

Sorensen - Redlich - Kwong

<u>Compuesto</u>	<u>x (%)</u>	<u>y (%)</u>	<u>K (%)</u>	<u>x (%)</u>	<u>y (%)</u>	<u>K (%)</u>
IC3	0.2687	0.3574	1.3301	0.2684	0.3547	1.3215
oC3	0.3777	0.4409	1.1473	0.3778	0.4384	1.1504
cC6	0.3536	0.2017	0.5704	0.3538	0.2069	0.5848

Condiciones de

T= 390,06 K

T= 390,72 K

salida

P= 709.468 kPa

P= 709.468 kPa

FLASH ADIABATICO

Sistema 6

ALIMENTACION

Compuesto	Z (1)	Condiciones
IC3	0.3	T = 421.89 K
HC3	0.4	P = 1774.015 kPa
cC6	0.3	H F = 4099.573 cal/mol

SALIDA

Algoritmo Propuesto

Solve - A. P. I.

Compuesto	x (1)	y (1)	K (1)
IC3	0.21948440	0.311068272	1.41726774
HC3	0.33258923	0.409264794	1.23054734
cC6	0.44787719	0.279671682	0.624438322

H L = 2845.581 cal/mol

H V = 4249.201 cal/mol

H H = 4099.548 cal/mol

T = 393.017134 K

P = 709.448 kPa

Condiciones de  
salida

FLASH ADIABATICO

Sistema 6

ALIMENTACION

Compuesto	Z (i)	Condiciones
tCS	0.3	T= 421.89 K
aCS	0.4	P= 1724.015 kPa
cC6	0.3	H_f = 4099.324 cal/mol

SALIDA

Algoritmo Propuesto

Soave - Redlich - Kwong

Compuesto	x (i)	y (i)	K (i)
tCS	0.219411790	0.311035704	1.417588830
aCS	0.332523961	0.409240130	1.230708700
cC6	0.448014153	0.279731028	0.624379996

H\_L = 2845.050 cal/mol

H\_V = 4268.680 cal/mol

H\_H = 4099.619 cal/mol

Condiciones de  
salida

T= 393.002262 K

P= 709.468 kPa

FLASH ADIABATICO

Sistema 6

ALIMENTACION

Compuesto	Z (i)	Condiciones
IC5	0.3	T= 421.87 K
nC5	0.4	P= 1774.015 kPa
cC6	0.3	N F = 4014.669 cal/gmol

SALIDA

Algoritmo Propuesto

Peng - Robinson

Compuesto	x (i)	y (i)	K (i)
IC5	0.221297480	0.315089624	1.404784580
nC5	0.337842815	0.412385687	1.220571400
cC6	0.437875932	0.272517444	0.622362209

N L= 2764.215 cal/gmol

N V= 4263.622 cal/gmol

N H= 4014.421 cal/gmol

T= 393.208535 K

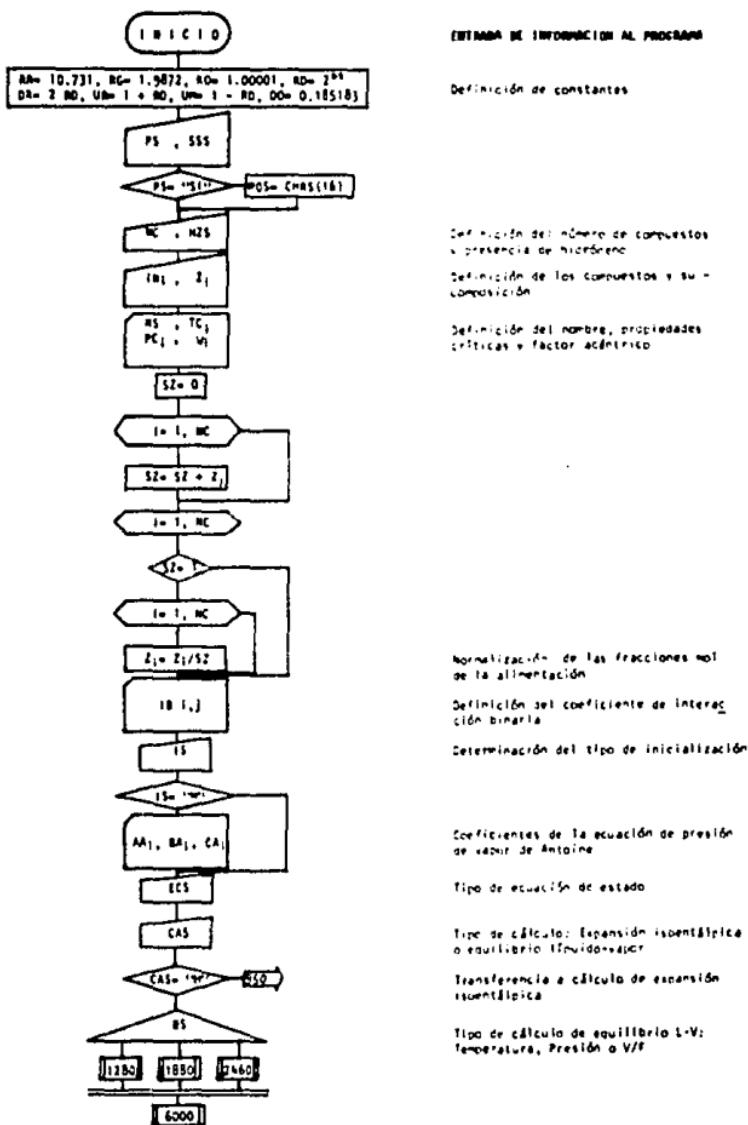
P= 709.468 kPa

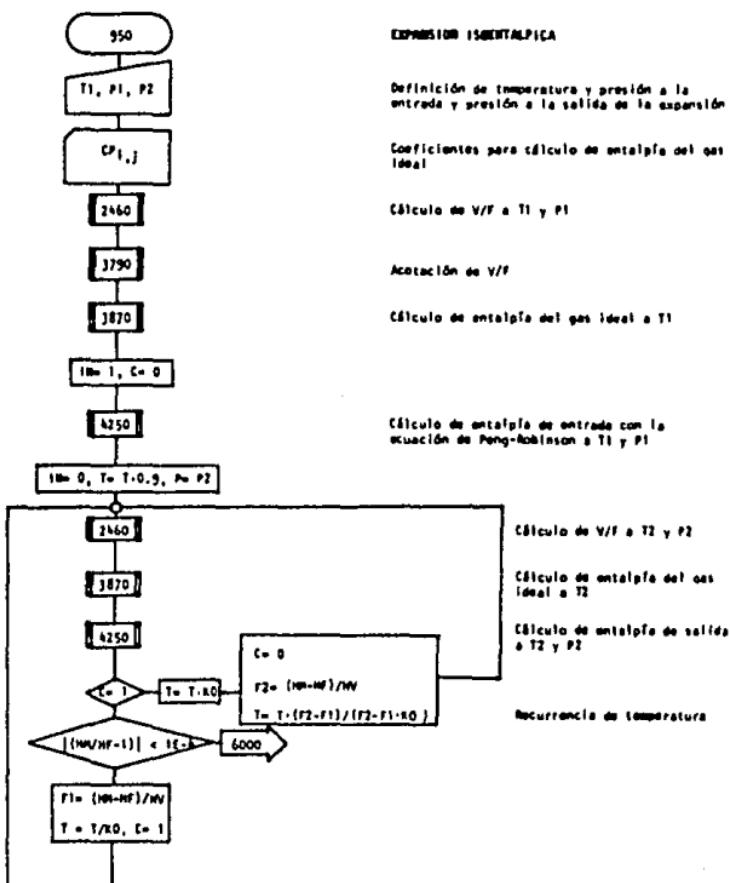
Condiciones de  
salida

## **CAPITULO IX**

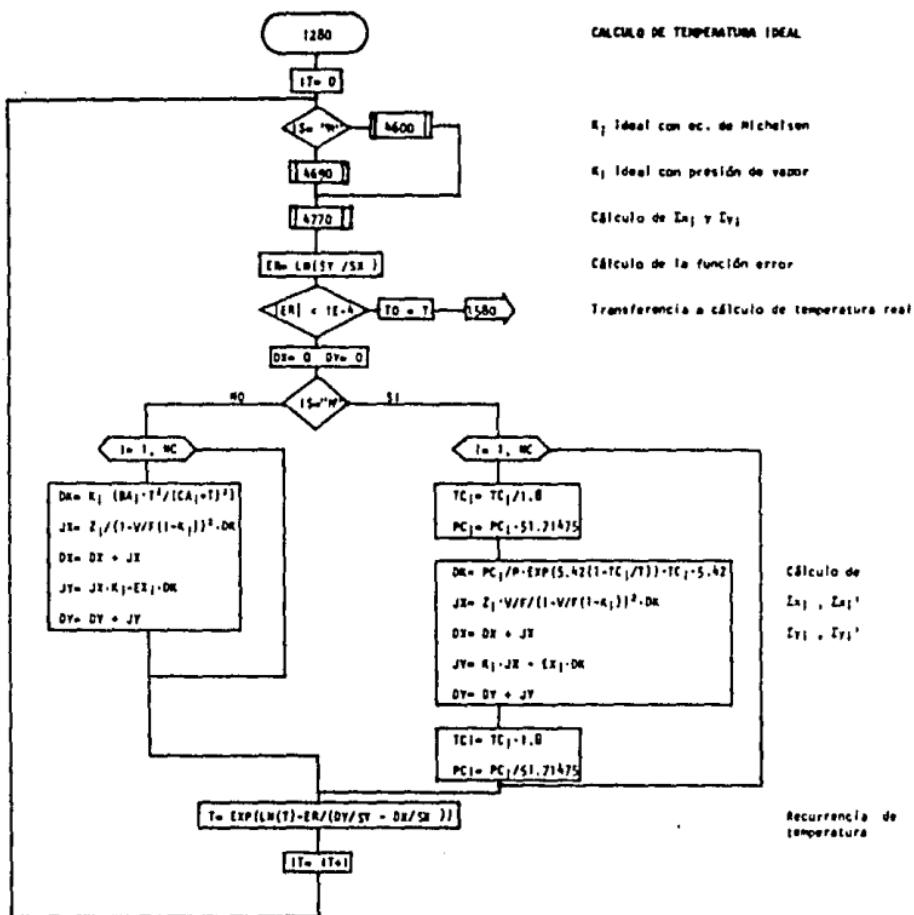
### **EL ALGORITMO PROPUESTO**

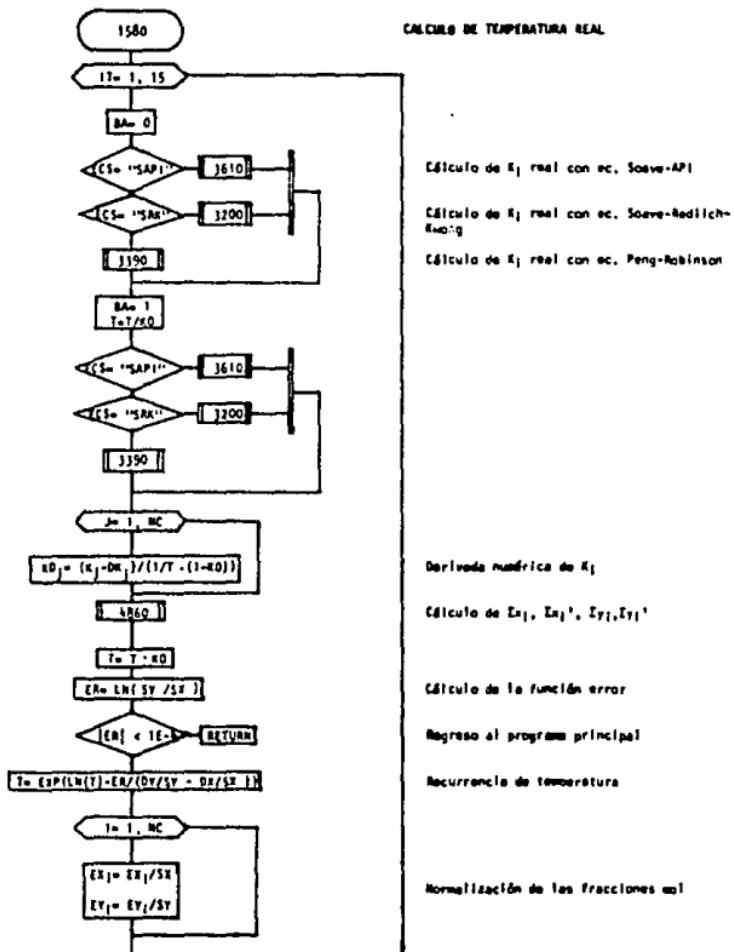
1. DIAGRAMA DE FLUJO

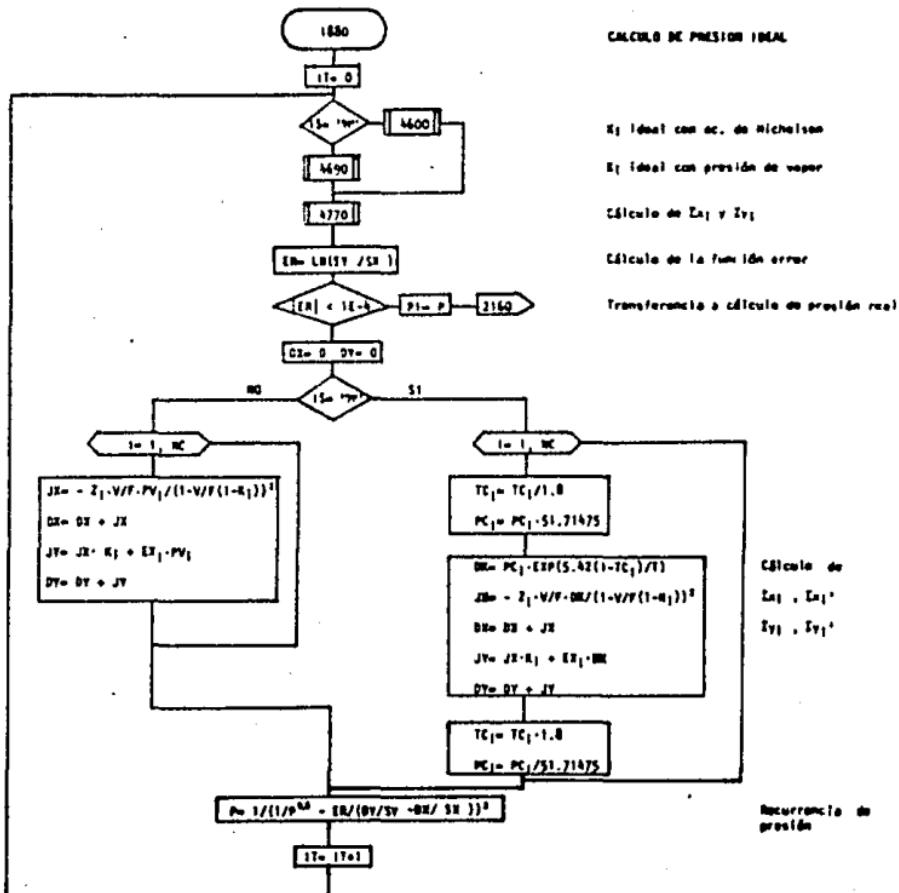




CALCULO DE TEMPERATURA IDEAL

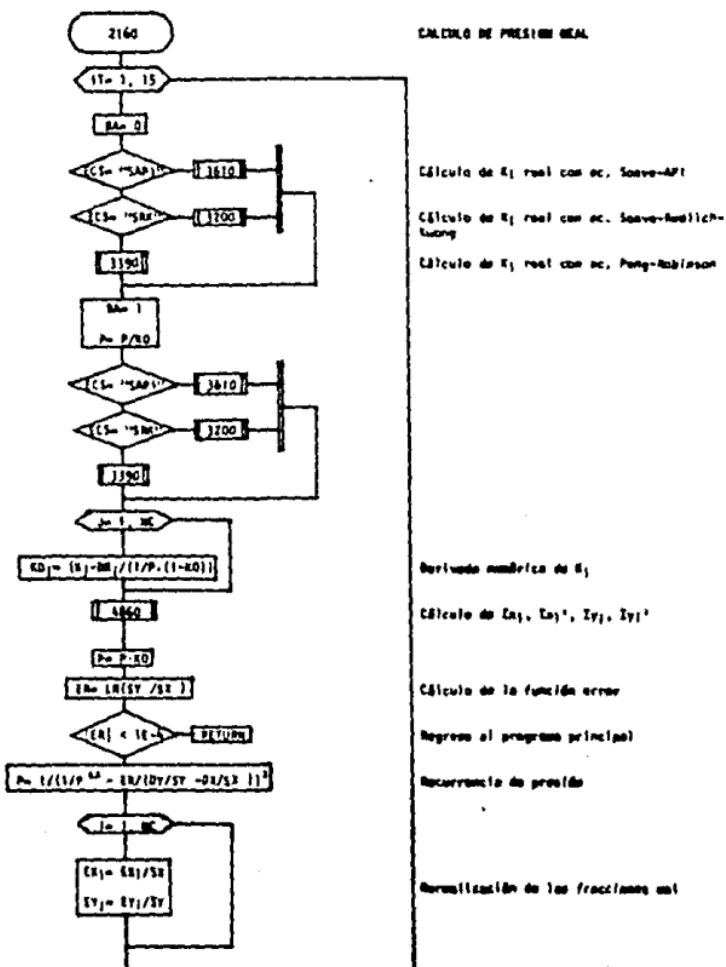


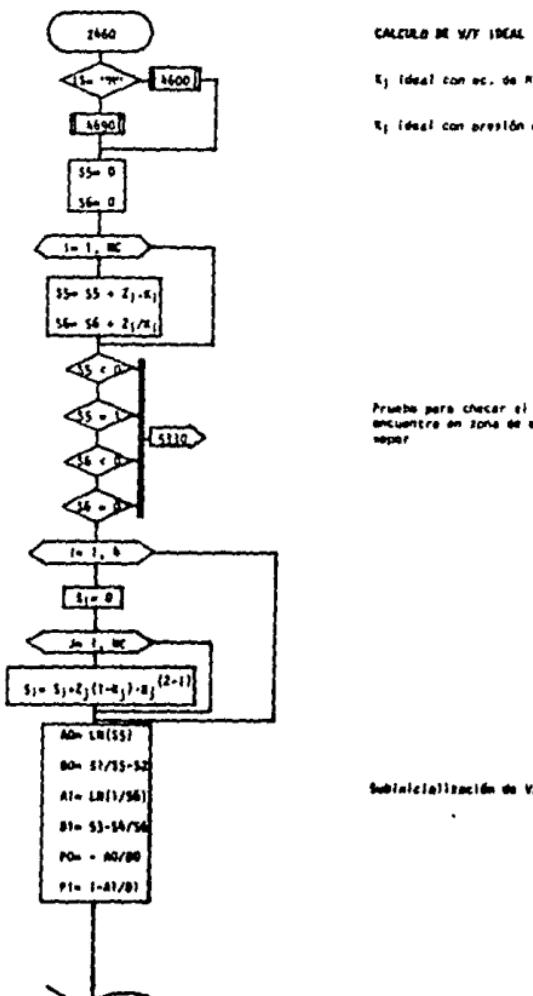




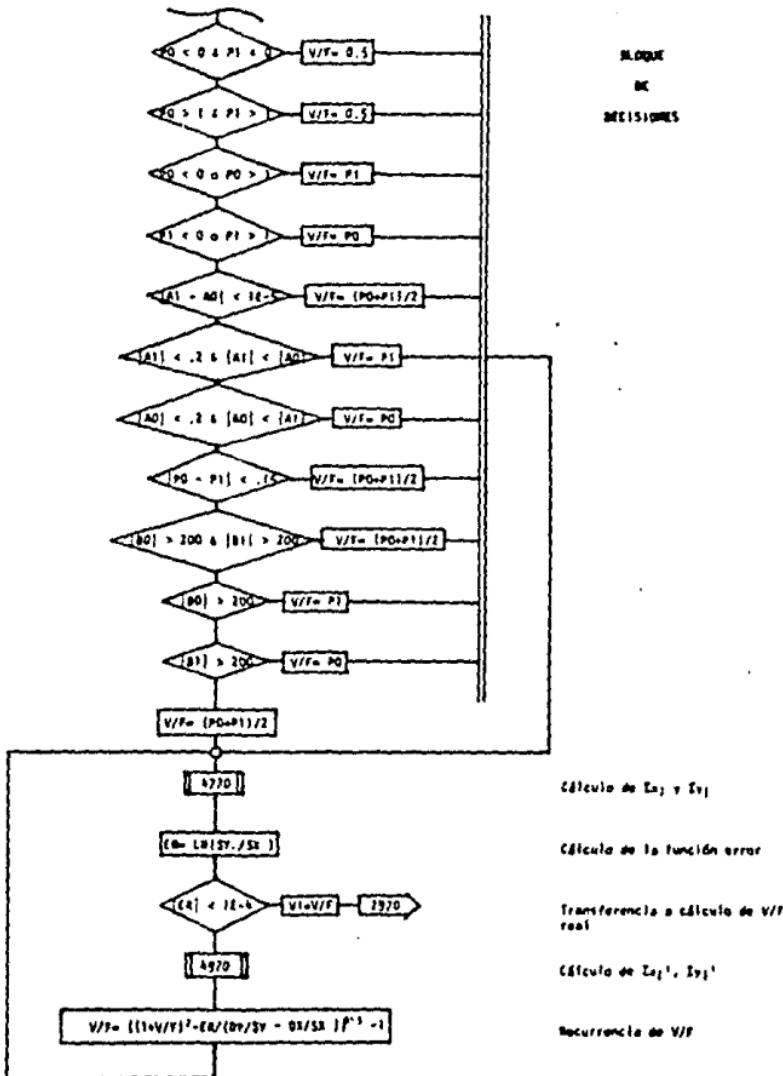
ESTA TESIS NO DEBE SALIR DE LA BIBLIOTECA

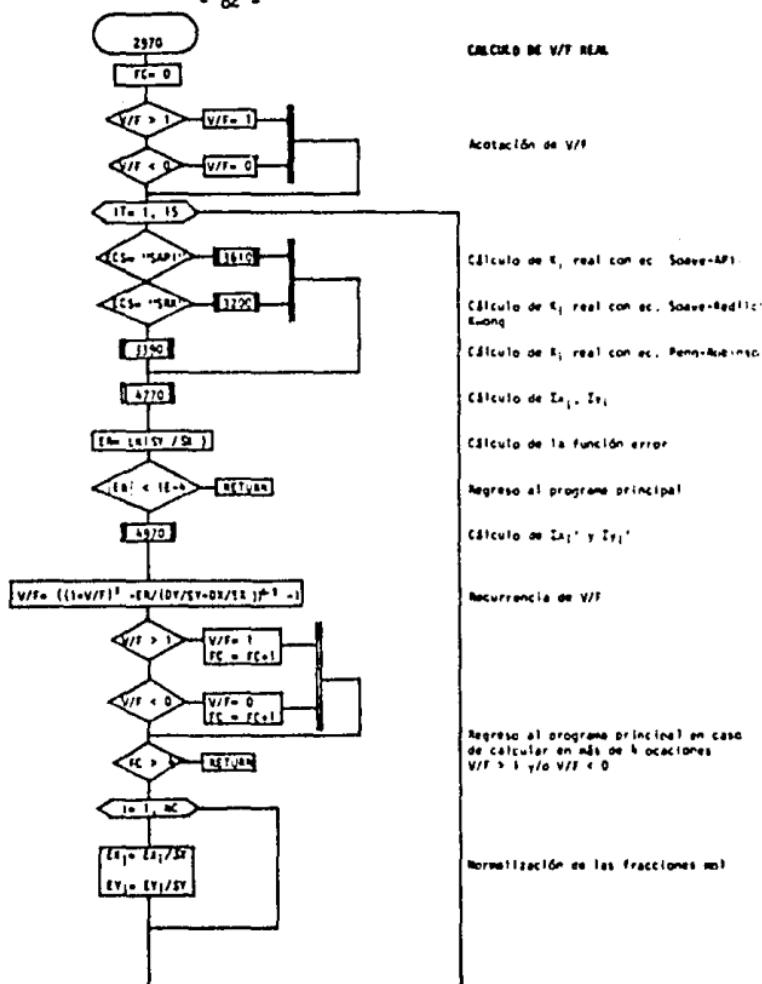
- 79 -

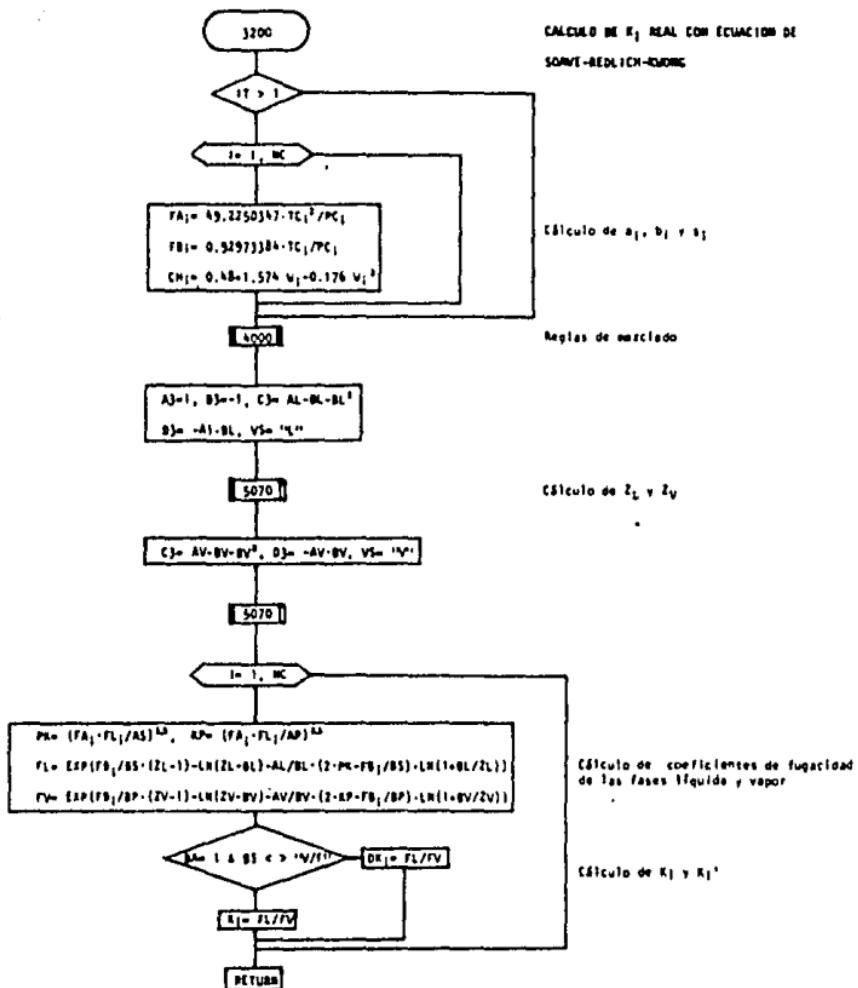


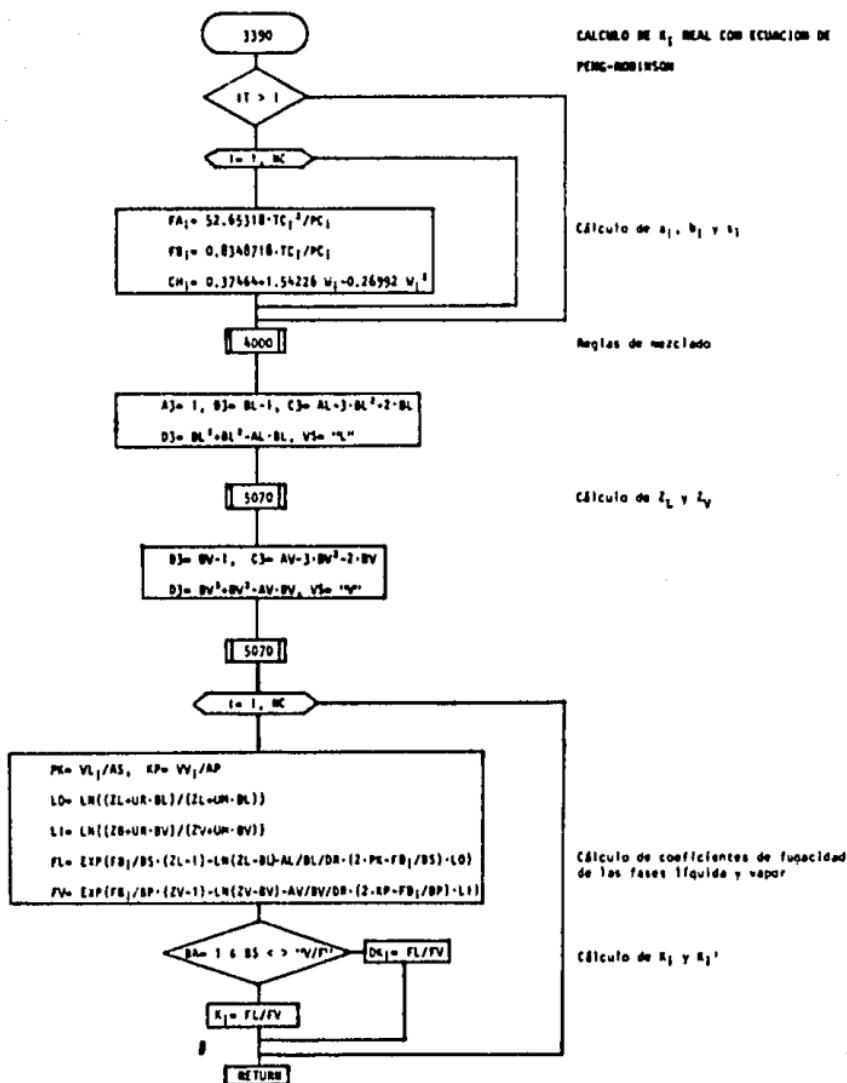


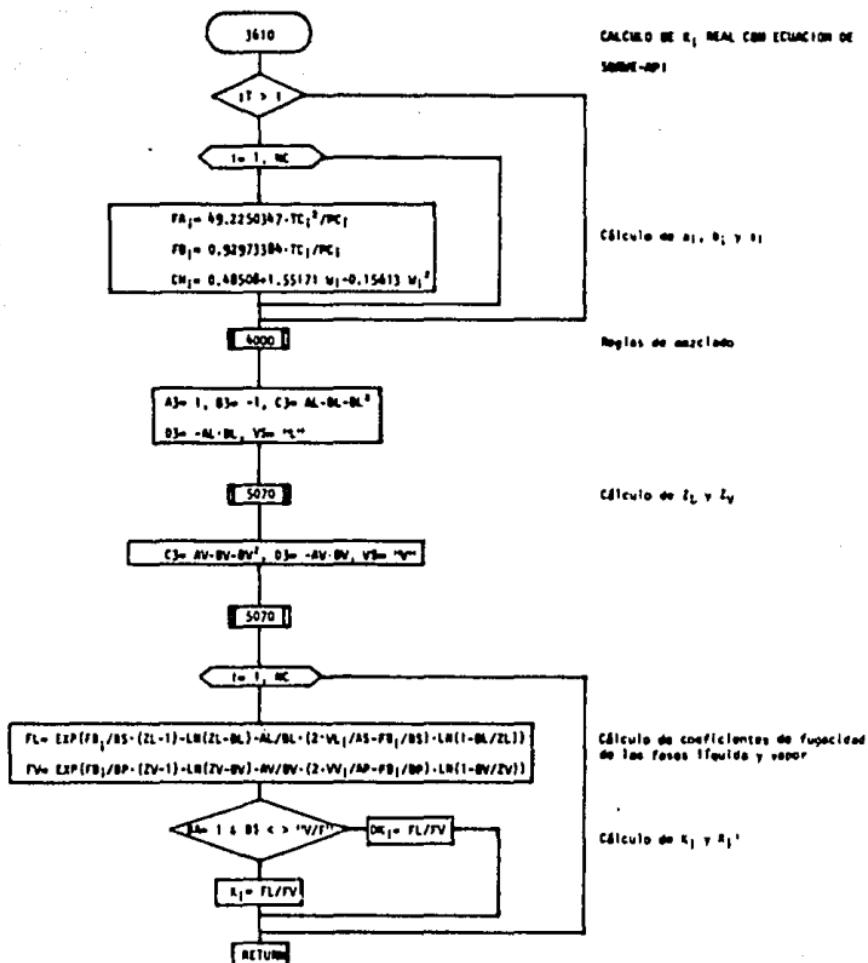
- 81 -

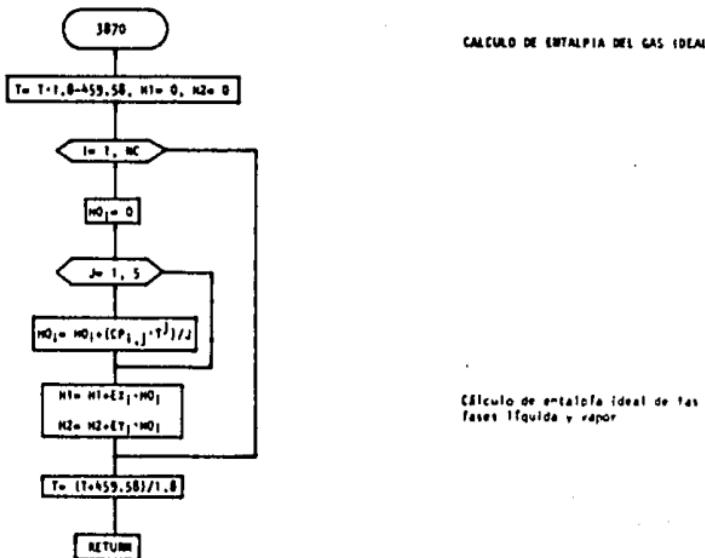
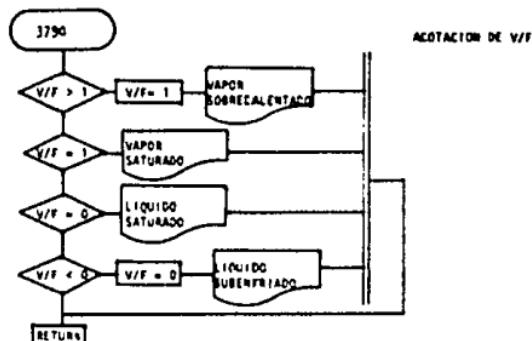


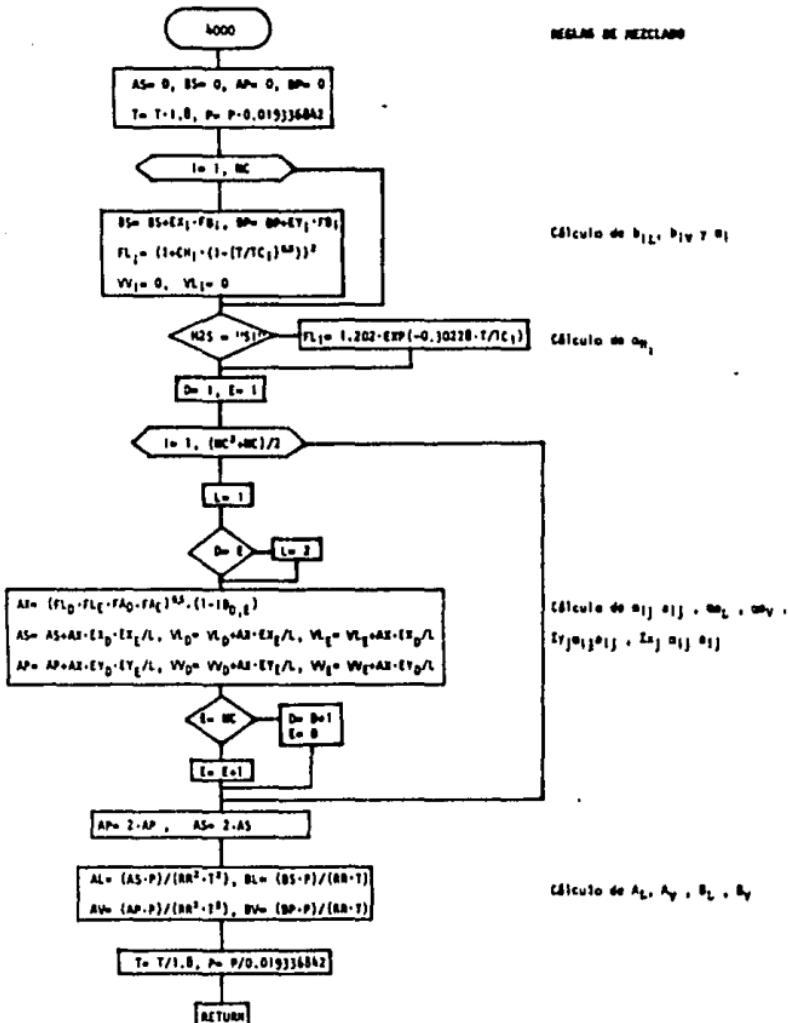


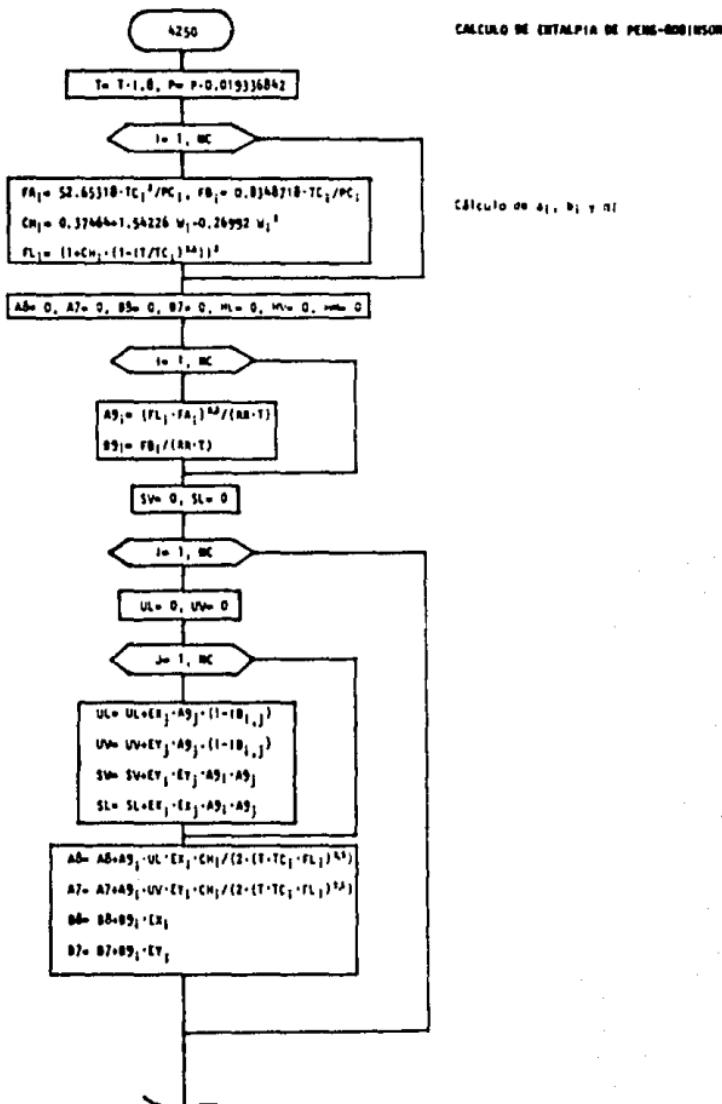


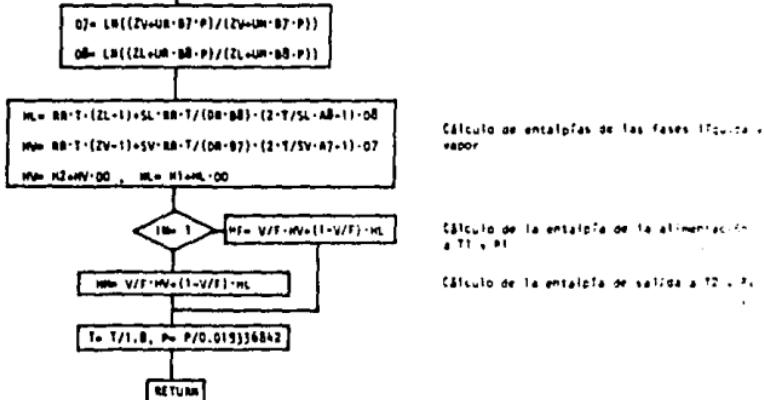


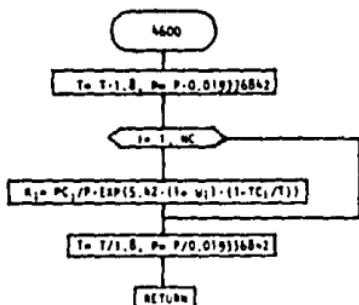




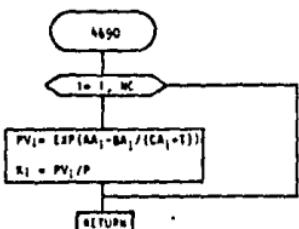




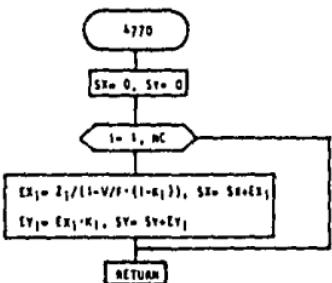




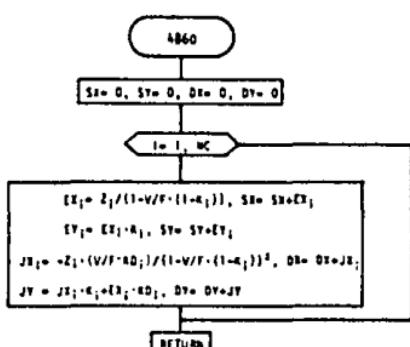
CALCULO DE  $K_1$  IDEAL CON ECUACION DE RAOULT



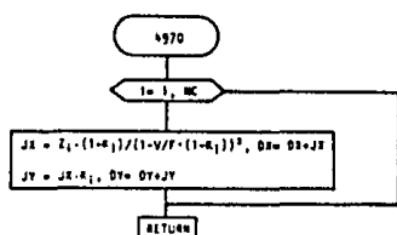
CALCULO DE  $K_1$  IDEAL CON PRESION DE VAPOR CALCULADA CON ECUACION DE RAOULT



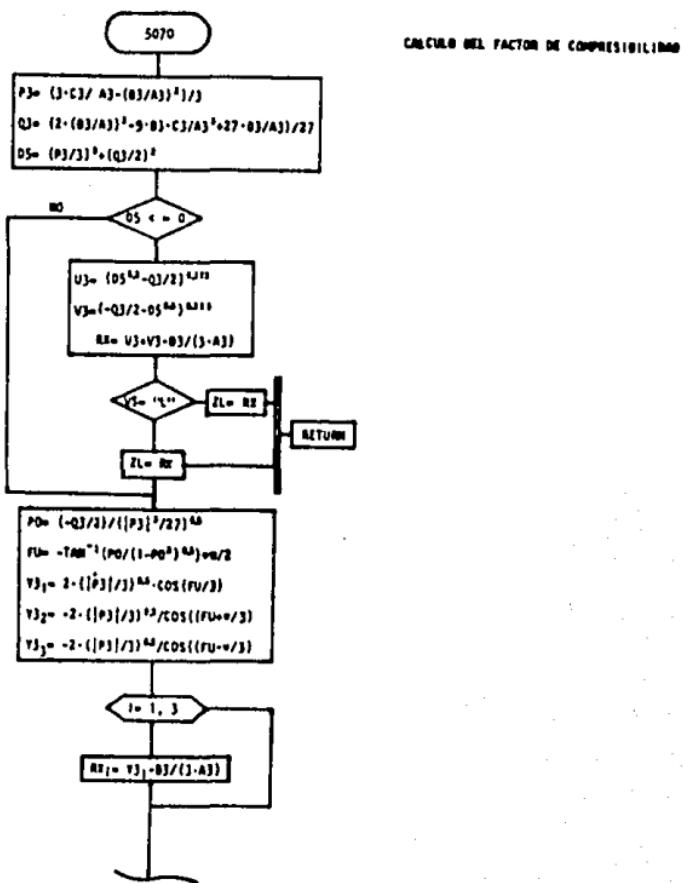
CALCULO DE  $Z_1, SX, SY$

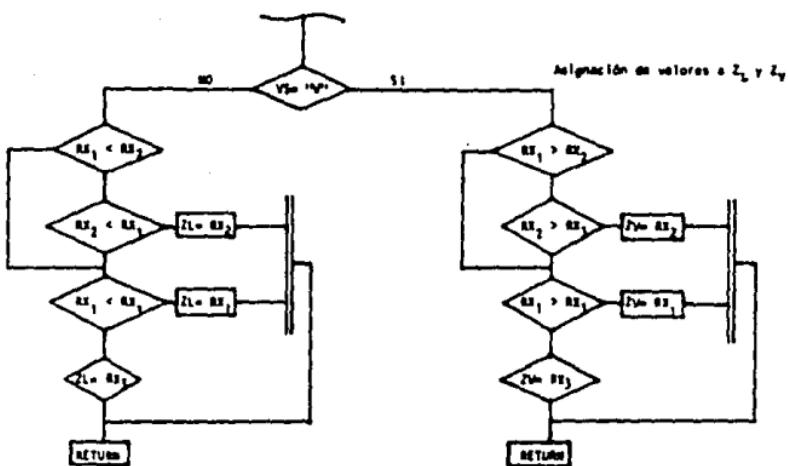


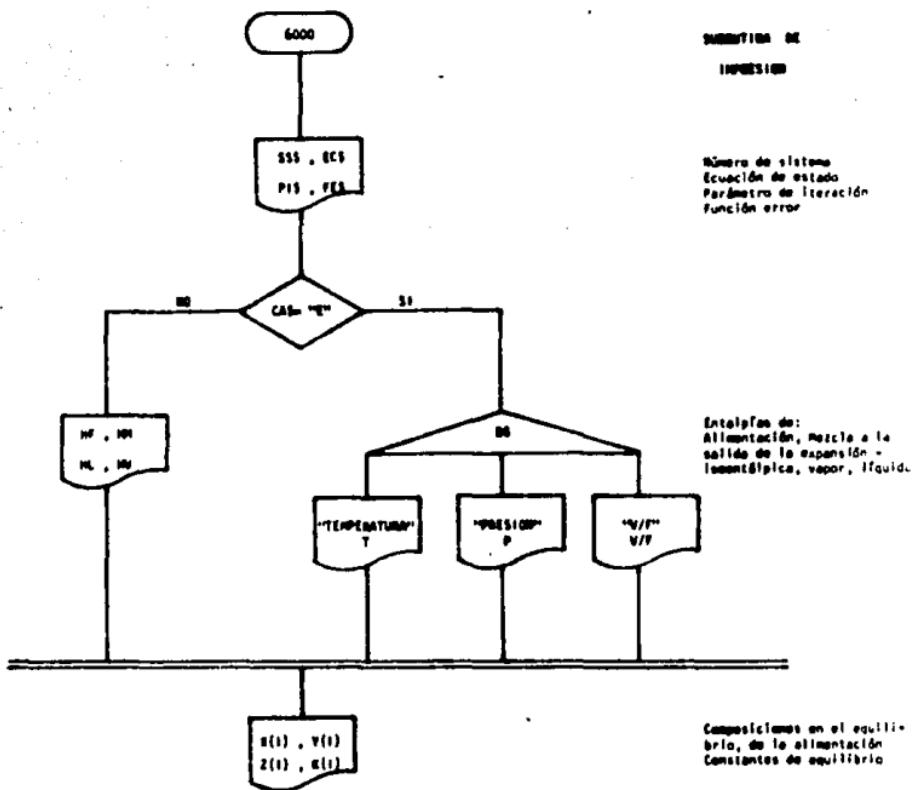
CALCULO DE  $E_1$ ,  $E_{T1}$ ,  $J_1$  Y  $J_Y$   
PARA CALCULOS DE TEMPERATURA Y PRESION



CALCULO DE  $J_1$  Y  $J_Y$  PARA CALCULOS  
DE V/F







2. LISTADO DEL PROGRAMA

```
10 REM*****  
20 REM# ALGORITMO PARA *  
30 REM# CALCULAR *  
40 REM# EQUILIBRIO *  
50 REM# LIQUIDO - VAPOR *  
60 REM*****  
70 DIM PC(14),FC(14),FB(14),FL(14),K(14),VL(14),VV(14),BK(14),KD(14),PY(14)  
80 DIM AR(14),BR(14),CH(14),Z(14),EX(14),EY(14),W(14),TC(14),X(14),Y(14)  
90 DIM CR(14),IR(20,20),CP(20,20),IN(20)  
100 RR=10,731;RG=1.9872;x0=1.00001;RD=SQR(2);DR=2*RD;UR=1+RD;UM=1-RD;OO=.185193  
110 REM *****  
120 REM # ENTRADA DE INFORMACION *  
130 REM # AL PROGRAMA *  
140 REM *****  
150 INPUT# 0 DE SISTEMA";SSA  
160 PRINT"QUIERES LOS RESULTADOS IMPRESOS EN PAPEL"  
170 INPUT PS  
180 IFPS# "N" THEN 200  
190 OPEN#,4,7:POS=CHR$(16)  
200 INPUT "DE CUANTOS COMPUESTOS CONSTA LA MEZCLA";NC  
210 INPUT "CONTIENE HIDROGENO LA MEZCLA";H2S  
220 PRINT"Z";OPEN1,8,15:OPEN2,8,2,"FROPIE"  
230 PRINT"TECLEA EL NUMERO Y LA COMPOSICION EN LA ALIMENTACION DE"  
240 PRINT"LOS COMPUESTOS QUE CONTIENE LA MEZCLA" PRINT-PRINT  
250 FORI=1TO28  
260 PRINT01,"P";CHR$(2+96)CHR$(1)CHR$(0)CHR$(1)  
270 INPUT#2,ZB:PRINT TAB(2),I,TAB(6);"-";TAB(10),ZB  
280 NEXT I  
290 PO(1)=1:PO(2)=16:PO(3)=23:PO(4)=39  
300 FORI=1TONC  
310 INPUT INC(I),Z(I)  
320 FOR J=1 TO 4  
330 PRINT01,"P";CHR$(2+96)CHR$(INC(I))CHR$(0)CHR$(PO(J))  
340 INPUT#2,ZB(J)  
350 NEXT J  
360 N8(I)=ZB(I):TCC(I)=VAL(ZB(2))+1.8:PC(I)=VAL(ZB(3))+14.696:W(I)=VAL(ZB(4))  
370 NEXTI  
380 CLOSE2  
390 SZ=0  
400 FOR I=1 TO NC  
410 SZ=SZ+Z(I)  
420 NEXT I  
430 IF SZ=1 THEN 470  
440 FORI=1TONC  
450 Z(I)=Z(I)/SZ  
460 NEXT I  
470 OPEN7,8,7,"INBI"  
480 FORI=1 TO NC  
490 PRINT"IN(I)=",INC(I)  
500 IF INC(I)=14 THEN PO=1:GOTO 550  
510 IF INC(I)=15 THEN PO=2:GOTO 550  
520 IF INC(I)=17 THEN PO=3:GOTO 550  
530 IF INC(I)=18 THEN PO=4:GOTO 550  
540 GOTO 690  
550 FOR J=1 TO NC  
560 PRINT01,"P";CHR$(7+96)CHR$(INC(J))CHR$(0)CHR$(PO#7-6)  
570 INPUT#7,ZB  
580 IR(J,INC(I))=VAL(ZB):PRINT"IB(",J,INC(I),")=";IB(J,INC(I))  
590 NEXT J  
600 NEXT I  
610 CLOSE7
```

```
620 PRINT"QUE INICIALIZACION QUIERES UTILIZAR P,VAPOR(P) O MICHELSEN(M)"  
630 INPUT 1$  
640 IF 1$="M" THEN 740  
650 OPEN3,8,3,"ANTOINE":PO(1)=1:PO(2)=10:PO(3)=19  
660 FORI=1 TO NC  
670 FORJ=1 TO 3  
680 PRINT#1,"P"CHR$(3+96)CHR$(IN(I))CHR$(0)CHR$(PO(J))  
690 INPUTB3,Z$(J)  
700 NEXT J  
710 AR(I)=VAL(Z$(1)):BM(I)=VAL(Z$(2)):CR(I)=VAL(Z$(3))  
720 NEXT I  
730 CLOSE3  
740 PRINT"QUE ECUACION DE ESTADO QUIERES UTILIZAR PARA CALCULAR EL EQUILIBRIO"  
750 PRINT"SOAVE A.P.I.(SAPI), SOAVE-REDLICH-KWONG(SRK), PENG-ROBINSON(PR)"  
760 INPUT EC$  
770 PRINT";"  
780 PRINT"QUE CALCULO QUIERES EFECTUAR:"  
790 PRINT:PRINT:PRINT:PRINT" EQUILIBRIO L-V ----- (E)"  
800 PRINT:PRINT"FLASH ADIABATICO ----- (H)"  
810 INPUT CAS$  
820 IF CAS$="H" THEN 950  
830 PRINT";"  
840 PRINT" CUAL ES LA VARIABLE DESCONOCIDA,V/F,T, o P"  
850 INPUT BS$  
860 PRINT";"  
870 IF BS$="T"THEN INPUT"TECLEA V/F,P(MM HG) Y T INIC(*K)",VF,P,T:GOSUB1260  
880 IF BS$="P"THEN INPUT"TECLEA V/F,T(*K) Y P INIC(MM HG)",VF,T,P:GOSUB1360  
890 IF BS$="V/F"THEN INPUT"TECLEA T(*K) Y P(MM HG)",T,P:GOSUB2460  
900 GOTO 6000
```

```
910 REM *****CALCULO DE *****
920 REM *      FLASH ADIABATICO   *
930 REM *****CALCULO DE *****
940 REM *****CALCULO DE *****
950 PRINT "J PRINT TECLEM T(J,K), P1(MM HG) Y P2(MM HG)*"
950 INPUT T,P,F
970 OPEN 4,5,4,"CP"
980 FOR I=1 TO 2: PO(2)=1: PO(3)=26: PO(4)=41: PO(5)=56
990 FOR I=1 TO 4
1000 FOR J=1 TO 5
1010 PRINT I,J,CHR$((4+95)*(CHR$(IN(I)))-CHR$(8)*(CHR$(PO(J))
1020 INPUT A,B,C,D
1030 NEXT J
1040 CP(I,1)=VAL(ZB(1)): CP(I,2)=VAL(ZB(2)): CP(I,3)=VAL(ZB(3))
1050 CP(I,4)=VAL(ZB(4)): CP(I,5)=VAL(ZB(5))
1060 NEXT I
1070 CLOSE 4
1080 GOSUB2460
1090 GOSUB3750
1100 GOSUB3870
1110 IN=1: C=0
1120 GOSUB4250
1130 IN=0: T=T#,S=P#P2
1140 GOSUB4260
1150 GOSUB4270
1160 GOSUB4280
1170 IF C=1 THEN 1210
1180 IF ABS(HV-HF-1)/1E-4 THEN 6000
1190 F1=(HF-HP)/HV
1200 T=T#+D:C=1:GOTO1140
1210 T=T#+D
1220 D=D-(H4-HF)/HV
1230 T=t: F2=F1//(F2-F1*t): C=0
1240 GOTO1140
```

```
1250 REM *****CALCULO DE TEMPERATURA ****
1260 REM *****SUMA DE Y/SUM X*****
1270 IT=0:FE$="LN(SUM Y/SUM X)":PI$="LN(T)"
1280 PRINT"J"
1290 IF I$="M"THEN1330
1310 GOSUB 4630
1320 GOT01340
1330 GOSUB 4630
1340 GOSUB 4770
1350 ER=LOG(SY/SX)
1360 IFRBS(EP)<IE-4THEN T0=T:GOT01588
1370 DX=0:DY=0
1380 IF I$="M"THEN1450
1390 FOR I=1 TO NC
1400 DK=K(I)*ER(I)+T0/(CR(I)+T)12
1410 JX=Z(I)/(1-VF*(1-K(I)))*T2*VF*DK:DX=DX+JX
1420 JV=K(I)*JX-EX(I)*DK:DY=DY+JV
1430 NEXT I
1440 GOT01530
1450 FOR I=1 TO NC
1460 TC(I)=TC(I)/1.8:PC(I)=PC(I)*51.7147523
1470 DK=PC(I)/P*EXP(5.42*(1-TC(I)/T))+TC(I)*5.42
1480 JX=Z(I)*VF/(1-VF*(1-K(I)))*T2*DK
1490 DX=DX+JX
1500 JV=K(I)*JX-EX(I)*DK:DY=DY+JV
1510 TC(I)=TC(I)/1.8:PC(I)=PC(I)/51.7147523
1520 NEXT I
1530 T=EXP(LOG(T)-ER/(DY/SY-DX/SX)):IT=IT+1
1540 GOT0 1100
1550 REM ****CALCULO DE T PERI*
1560 REM * CALCULO DE T PERI *
1570 REM ****CALCULO DE T PERI ****
1580 FOR IT=17015
1590 BA=0
1600 IFEC$="EAPI"THEN 1630
1610 IFEC$="EPN"THEN 1640
1620 GOSUB 3390:GOT01650
1630 GOSUB 3310:GOT01650
1640 GOSUB 3200
1650 BA=1:T=T*0
1660 IFEC$="EAPI"THEN 1690
1670 IFEC$="EPN"THEN 1700
1680 GOSUB 3370:GOT01710
1690 GOSUB 3310:GOT01710
1700 GOSUB 3200
1710 FOR J=1 TO NC
1720 KDJ:=K(J)-DK(J)/(1/T*(1-K0))
1730 NEXT J
1740 GOSUB 4360
1750 T=T*0
1760 ER=LOG(SY/SX)
1770 IF HE>EP(IE-4 THEN 1840
1780 T=EXP(LOG(T)-ER/(DY/SY-DX/SX))
1790 FOR I=1 TO NC
1800 EX(I)=EX(I)/X:EV(I)=EV(I)/SY
1810 NEXT I
1820 NEXT IT
1830 IT=IT-1
1840 RETURN
```

```
1850 REM ##### DE LA PRESIÓN #####
1860 REM + CALCULO DE LA PRESIÓN +
1870 REM ##### DE LA PRESIÓN #####
1880 IT=0:FE=LN(SUM Y/SUM X)^(PIS=1)/(P)^(1/2)
1890 PRINT "T"
1900 IF IS="H" THEN 1930
1910 GOSUB 4520
1920 GOTO 1940
1930 GOSUB 4600
1940 GOSUB 4770
1950 ER=L0G(SY/SX)
1960 IF ABS(EP)<IE-4 THEN PI=P-00T02160
1970 DX=0:DY=0
1980 IF IS="M" THEN 2050
1990 FOR I=1 TO NC
2000 JX=-Z(I)*PV(I)/(1-VF*(1-K(I)))^2
2010 JV=JX*K(I)*EX(I)*PV(I)
2020 DX=DX+JX:DY=DY+JV
2030 NEXT I
2040 GOTO 2110
2050 FOR J=1 TO NC
2060 TC(I)=TC(I)/1.8:PC(I)=PC(I)*51.7147523:DK=PC(I)*EXP(5.42*(1-TC(I)/T))
2070 JK=-Z(I)*VF*DK/(1-VF*(1-K(I))^(1/2)):DX=DX+JK
2080 JV=K(I)*EX(I)*DK:DY=DY+JV
2090 TC(I)=TC(I)*51.8:PC(I)=PC(I)/51.7147523
2100 NEXT I
2110 PI=(1/P1.5-ER)/(DY/SY-DX/SX)^2:IT=IT+1
2120 GOTO 1900
2130 REM ##### DE F REAL +
2140 REM + CALCULO DE F REAL +
2150 REM ##### DE F REAL +
2160 FOR IT=1 TO 15
2170 BA=0
2180 IF EC="SAP1" THEN 2210
2190 IF EC="SAK" THEN 2220
2200 GOSUB 3390:GOTO 2230
2210 GOSUB 3510:GOTO 2230
2220 GOSUB 3200
2230 BA=1:P=P+10
2240 IF EC="SAP1" THEN 2270
2250 IF EC="SAK" THEN 2260
2260 GOSUB 3390:GOTO 2250
2270 GOSUB 3510:GOTO 2250
2280 GOSUB 3200
2290 FOR J=1 TO NC
2300 KD(J)=K(J)-BA(J)/(1/PC(I)+0)
2310 NEXT J
2320 GOSUB 4860
2330 P=P+0
2340 EP=L0G(SY/SX)
2350 IF ABS(EP)<IE-4 THEN 2420
2360 F=1/1/P1.5-EP/(DY/SY-DX/SX)^2
2370 FOR I=1 TO NC
2380 EX(I)=EX(I)/SX:EV(I)=EV(I)/SY
2390 NEXT I
2400 NEXT IT
2410 IT=IT-1
2420 RETURN
```

```
2430 REM *****  
2440 REM * CALCULO DE V/F *  
2450 REM *****  
2460 FE=LN(SUM Y/SUM X)**PIB=(1+V/F)*2  
2470 IF IS="M" THEN 2500  
2480 GOSUB 4690  
2490 GOT0 2510  
2500 GOSUB 4600  
2510 S(5)=0: S(6)=0  
2520 FOR I=1 TO NC  
2530 S(5)=S(5)+Z(I)*K(I): S(6)=S(6)+Z(I)/K(I)  
2540 NEXT I  
2550 IF S(5)<0 THEN 5330  
2560 IF S(5)=1 THEN 5330  
2570 IF S(6)<0 THEN 5330  
2580 IF S(6)=1 THEN 5330  
2590 FOR I=1 TO 4  
2600 S(I)=0  
2610 FOR J=1 TO NC  
2620 S(I)=S(I)+Z(J)*(1-K(J))*K(J)*(2-I)  
2630 NEXT J  
2640 NEXT I  
2650 R0=LOG(S(5))  
2660 B0=S(1)/S(5)-S(2)  
2670 A1=LOG(1/S(6))  
2680 B1=S(3)-S(4)/S(6)  
2690 P0=-R0/E0: P1=1-R1/B1  
2700 REM *****  
2710 REM * BLOQUE DE DECISIONES *  
2720 REM *****  
2730 IF P0<0 AND P1>0 THEN VF=.5: GOT0 2850  
2740 IF P0>1 AND P1<1 THEN VF=.5: GOT0 2850  
2750 IF P0<0 OR P0>1 THEN VF=P1: GOT0 2850  
2760 IF P1<0 OR P1>1 THEN VF=P0: GOT0 2850  
2770 IF ABS((R1-H0)/C1)<.5 THEN VF=(P0+P1)/2: GOT0 2850  
2780 IF ABS((R1-H0)/C2) AND ABS((R1-H0)/CAB3(R0)) THEN VF=P1: GOT0 2850  
2790 IF ABS((R1-H0)/C2) AND ABS((R0)/CAB3(R1)) THEN VF=P0: GOT0 2850  
2800 IF ABS(P0-P1)<.5 THEN VF=(P0+P1)/2: GOT0 2850  
2810 IF ABS((B0)/200) AND ABS((B1)/200) THEN VF=(P0+P1)/2: GOT0 2850  
2820 IF ABS((B0)/200)>200 THEN VF=P1: GOT0 2850  
2830 IF ABS((B1)/200)>200 THEN VF=P0: GOT0 2850  
2840 VF=(P0+P1)/2  
2850 V0=VF  
2860 GOSUB 4770  
2870 ER=LOG(ABS(SV/SX))  
2880 IF ABS(ER)/CIE<4 THEN 2920  
2890 GOSUB 4670  
2900 VF=((1+V/F)*2-ER/(INV/3V-DV/SX))/1.5-1  
2910 GOT0 2360  
2920 IF VF<1 THEN VF=1: GOT0 2970  
2930 IF VF<0 THEN VF=0: GOT0 2970
```

```
2940 REM *****  
2950 REM * CALCULO DE V/F REAL *  
2960 REM *****  
2970 FC=0  
2980 FOR IT=1 TO 15  
2990 IF EC<="SAPI" THEN 3020  
3000 IF EC>="ERK" THEN 3030  
3010 GOSUB 3190:GOTO 3040  
3020 GOSUB 3610:GOTO 3040  
3030 GOSUB 3200  
3040 GOSUB 4770  
3050 PRINT "X", SX, "Y", SY  
3060 ER=LOG(HDS(SY/SX))  
3070 IF ABS(ER/CIE-4) THEN 3160  
3080 GOSUB 4970  
3090 VF=(1+VF)/2-ER/(DY/SY-(DX/SX))+.5-.1  
3100 IF VF>1 THEN FC=FC+1:VF=1:GOTO 3120  
3110 IF VF<0 THEN FC=FC+1:VF=0  
3120 IF FC>4 THEN 3160  
3130 FOR I=1 TO NC-EX(I)*EX(I)/SX-EY(I)*EY(I)/SY-NEXTI  
3140 NEXTIT  
3150 IT=IT-1  
3160 RETURN
```

3170 REM \*\*\*\*\*  
3180 REM \* K SORVE-FEDLICH-KWONG \*  
3190 REM \*\*\*\*\*  
3200 IF IT>1 THEN 3230  
3210 FOR I=1 TO NC:FB(I)=49.2250347eTC(I)12/PC(I):FB(I)=.92973384eTC(I)/PC(I)  
3220 CH(I)=.481.5740W(I)-.176W(I)12:NEXTI  
3230 GOSUB 4000  
3240 R3=1:B3=-1:C3=AL-BL-BL12:D3=-AL+BL:VS="L"  
3250 GOSUB 5070  
3260 C3=AV-BV12:D3=-AV+BV:VS="V"  
3270 GOSUB 5070  
3280 FOR I=1 TO NC  
3290 FK=SQR(FB(I)\*FL(I)/AS)\*KP=SQR(FB(I)\*FL(I)/AP)  
3300 FL=EXP(FB(I)/BS\*(ZL-1)-LOG(ZL-BL)-AL/BL\*(2\*PK-FB(I)/BS)\*LOG(1+BL/ZL))  
3310 FV=EXP(FB(I)/BP\*(ZV-1)-LOG(ZV-BV)-AV/BV\*(2\*PK-FB(I)/BP)\*LOG(1+BV/ZV))  
3320 IF BA=1 AND BC>"V/F" THEN DK(I)=FL/FV:GOTO3340  
3330 K(I)=FL/FV  
3340 NEXT I  
3350 RETURN  
3360 REM \*\*\*\*\*  
3370 REM \* K PENG - ROBINSON \*  
3380 REM \*\*\*\*\*  
3390 IF IT>1 THEN 3420  
3400 FOR I=1 TO NC:FB(I)=52.65318eTC(I)12/PC(I):FB(I)=.8348718eTC(I)/PC(I)  
3410 CH(I)=.37454+1.54226W(I)-.26592W(I)12:NEXTI  
3420 GOSUB 4000  
3430 R3=1:B3=BL-1:C3=AL-3BL12:D3=BL13+BL12-AL+BL  
3440 VS="L"  
3450 GOSUB 5070  
3460 B3=BV-1:C3=AV-3BV12-2BV:D3=BV13+BV12-AV+BV:VS="V"  
3470 GOSUB 5070  
3480 FOR I=1 TO NC  
3490 FK=L(I)/AS:KP=VV(I)/AP  
3500 LO=LOU((ZL+UR+BL)/(ZL+UM+BL))  
3510 LI=LOU((ZV+UR+BV)/(ZV+UM+BV))  
3520 FL=EXP(FB(I)/BS\*(ZL-1)-LOG(ZL-BL)-AL/BL\*DR\*(2\*PK-FB(I)/BS)\*LO)  
3530 FV=EXP(FB(I)/BP\*(ZV-1)-LOG(ZV-BV)-AV/BV\*DR\*(2\*PK-FB(I)/BP)\*LI)  
3540 IF BA=1 AND BC>"V/F" THEN DK(I)=FL/FV:GOTO3560  
3550 K(I)=FL/FV  
3560 NEXT I  
3570 RETURN  
3580 REM \*\*\*\*\*  
3590 REM \* K SOHVE A. P. I. \*  
3600 REM \*\*\*\*\*  
3610 IF IT>1 THEN 3640  
3620 FOR I=1 TO NC:FB(I)=49.2250347eTC(I)12/PC(I):FB(I)=.92973384eTC(I)/PC(I)  
3630 CH(I)=.48508+1.55171W(I)-.15613W(I)12:NEXTI  
3640 GOSUB 4000  
3650 R3=1:B3=-1:C3=AL-BL-BL12:D3=-AL+BL:VS="L"  
3660 GOSUB 5070  
3670 C3=AV-BV-BV12:D3=-AV+BV:VS="V"  
3680 GOSUB 5070  
3690 FOR I=1 TO NC  
3700 FL=EXP(FB(I)/BS\*(ZL-1)-LOG(ZL-BL)-AL/BL\*(2\*VL(I)/MS-FB(I)),ES)\*LOU(1+FL/ZL)  
3710 FV=EXP(FB(I)/BP\*(ZV-1)-LOG(ZV-BV)-AV/BV\*(2\*VV(I)/MP-FB(I)),BP)\*LOU(1+EV/ZV)  
3720 IF BA=1 AND BC>"V/F" THEN DK(I)=FL/FV:GOTO3740  
3730 K(I)=FL/FV  
3740 NEXT I  
3750 RETURN

```
3760 REM ***** ACOTACION DE V/F ****
3770 REM *      ACOTACION DE V/F *
3780 REM ***** ACOTACION DE V/F ****
3790 IF VF>1 THEN VF=1 PRINT "VAPOR SOBERCALENTADO": GOTO 3830
3800 IF VF<1 THEN PRINT "VAPOR SATURADO": GOTO 3830
3810 IF VF=0 THEN PRINT "LQUIDO SATURADO": GOTO 3830
3820 IF VF<0 THEN VF=0 PRINT "LQUIDO SUBENFRIDADO"
3830 RETURN
3840 REM **** CALCULO DE H0(I) ****
3850 REM * CALCULO DE H0(I) *
3860 REM **** CALCULO DE H0(I) ****
3870 T=T*1.8-459.58 H1=0 H2=0
3880 FOR I=1 TO NC
3890 H0(I)=0
3900 FOR J=1 TO 5
3910 H0(I)=H0(I)+CP(I,J)*T*T/J
3920 NEXT J
3930 H1=H1+EX(I)*H0(I)-H2=H2+EV(I)*H0(I)
3940 NEXT I
3950 T=(T+459.58)/1.8
3960 RETURN
3970 REM **** PEGLAS DE NEZILADO ***
3980 REM * PEGLAS DE NEZILADO *
3990 REM **** PEGLAS DE NEZILADO ***
4000 RS=0 BS=0 AP=0 EP=0 P=P0,019336842 T=T*1.8
4010 FOR I=1 TO NC
4020 BS=BS+EX(I)*FB(I)-BP=BP+EV(I)*FB(I)
4030 FLC(I)=(1+CH(I)/(1-SOR(T/TC(I))))/12
4040 VV(I)=0 VL(I)=0
4050 NEXT I
4060 IF H2>="SI" THEN FLC(I)=1.202*EXP(-.30228*T/TC(I))
4070 D=1 E=1
4080 FOR I=1 TO (NC+2+NC)/2
4090 L=1
4100 IF D=E THEN L=2
4110 RX=SOR(FLC(D)*FLC(E)*FA(D)*FA(E))*(1-IB(D,E))
4120 RS=RS+RX*EX(D)*EX(E)/L VL(D)=VL(D)+RA*EX(E)/L VL(E)=VL(E)+RK*EX(D)/L
4130 AP=AP+RK*EV(D)*EV(E)/L VV(D)=VV(D)+RK*EV(E)/L VV(E)=VV(E)+RK*EV(D)/L
4140 IF E=NC THEN D=D+1 E=0 GOTO 4160
4150 E=E+1
4160 NEXT I
4170 RS=2*RS AP=2*AP
4180 RL=(RS+P)/(R1*12+T*12) BL=(RS+P)/(R2*T)
4190 RV=(AP+P)/(R2*T+T*12) BV=(BP+P)/(R2*T)
4200 P=P/,019336842 T=T/1.8
4210 RETURN
```

```
4220 REM *****  
4230 REM * CALCULO DE HV, HL, HM Y HF *  
4240 REM *****  
4250 T=T+1.8*P/P0,.019336842  
4260 FOR I=1TOIC.FAI)=52.5531E+TC(I)*T2/PC(I)*FB(I)=.8348718*T2/PC(I)/PC(I)  
4270 CH(I)=.37464+1.54226W(I)-.26992W(I)*T2*FL(I)=(1*CH(I)*C1-SOR(T/TC(I)))*T2  
4280 NEXT I  
4290 AB=0.R7=0.BB=0.BT=0.HL=0.HV=0.HM=0  
4300 FOR I=1TOIC  
4310 R9(I)=SOR(FL(I)*FA(I))/RR0T  
4320 B9(I)=FB(I)/RR0T  
4330 NEXT I  
4340 SV=0.SL=0  
4350 FOR I=1TOIC  
4360 UL=0.UV=0  
4370 FOR J=1TOIC  
4380 UL=UL+EX(J)/AB9(J)*C1-I*(I,J))  
4390 UV=UV+EY(J)/AB9(J)*(1-I*(I,J))  
4400 SV=SV+EY(I)*EY(U)/AB9(I)*AB9(J)  
4410 SL=SL+EX(I)*EX(J)/AB9(I)*AB9(J)  
4420 NEXT J  
4430 RS=AB9*RS(I)+UL*EX(I)*CH(I)/(2*SOR(T/TC(I)*FL(I)))  
4440 R7=R7+RS(I)*UV+EY(I)*CH(I)/(2*SOR(T/TC(I)*FL(I)))  
4450 BB=BB+B9(I)*EX(I)  
4460 BT=BT+B9(I)*EY(I)  
4470 NEXT I  
4480 07=LOG((ZV+UP*BT*P)/(ZV+UM*BT*P))  
4490 08=LOG((ZL+U0*BT*P)/(ZL+UN*BT*P))  
4500 HL=RR0T*(CL-1)+SL*RR0T/(DR*BB)+(ZT/SL)*AB-1)*002  
4510 HV=RR0T*(ZV-1)+SV*RR0T/(DR*BT)+(ZT/SV)*R7-1)*07  
4520 HV=H2+HV*00-HL*H1+HL*000  
4530 IF IN=1 THEN HF=VF*HV*(1-VF)*HL-GOT04550  
4540 HM=VF*HV*(1-VF)*HL  
4550 T=T/1.8*P/P0,.019336842  
4560 RETURN
```

```
4570 REM *****  
4580 REM * K DE MICHELEN *  
4590 REM *****  
4600 P=P*.019336842:T=T+1.8  
4610 FOR I=1 TO NC  
4620 K(I)=PC(I)/P*EXP(.5.42*(1+H(I)))*(1-TG(I)/T)  
4630 NEXT I  
4640 P=P/.019336842:T=T/1.8  
4650 RETURN  
4660 REM *****  
4670 REM * K DE PHTOINE *  
4680 REM *****  
4690 FOR I=1 TO NC  
4700 PV(I)=EXP(CR(I))-BK(I)/(CR(I)+T)  
4710 K(I)=PV(I)/P  
4720 NEXT I  
4730 RETURN  
4740 REM *****  
4750 REM * SUMX SUMY *  
4760 REM *****  
4770 SX=0:SY=0  
4780 FOR I=1 TO NC  
4790 EX(I)=Z(I)/(1-VF*(1-K(I))):SX=SX+EX(I)  
4800 EV(I)=EX(I)*K(I):SY=SY+EV(I)  
4810 NEXT I  
4820 RETURN  
4830 REM *****  
4840 REM *SUMX SUMY DX DY FFM T Y P*  
4850 REM *****  
4860 SX=0:SY=0:DX=0:DY=0  
4870 FOR I=1 TO NC  
4880 EX(I)=Z(I)/(1-VF*(1-K(I))):SX=SX+EX(I)  
4890 EV(I)=EX(I)*K(I):SY=SY+EV(I)  
4900 JK(I)=Z(I)*(VF*KD(I))/(1-VF*(1-K(I)))*2:DX=DX+JK(I)  
4910 JV=JK(I)*K(I)+EX(I)*KD(I):DY=DY+JV  
4920 NEXT I  
4930 RETURN  
4940 REM *****  
4950 REM * DX V DY FFM V/F *  
4960 REM *****  
4970 DX=0:DY=0  
4980 FOR I=1 TO NC  
4990 JV=Z(I)*(1-K(I))/(1-VF*(1-K(I)))*2:DX=DX+JV  
5000 JV=JV*K(I):DY=DY+JV  
5010 NEXT I  
5020 RETURN
```

```
5030 REM #####  
5040 REM # SOLUCION DE ECUACION DE #  
5050 REM # FACTOR DE COMFRESIBILIDAD#  
5060 REM #####  
5070 P3=(3*B3/M3-(B3/A3)*I3)/3  
5080 Q3=(2*(B3/M3)*I3-3*B3*I3/A3+2*27*B3/A3)/27  
5090 D5=(P3/3)+3*(Q3/2)*I2  
5100 IF D5<=0 THEN 5170  
5110 U3=SGN(SQR(D5)-Q3/2)*ABS(SQR(D5)-Q3/2)*I(1/3)  
5120 V3=SGN(-Q3/2-SQR(D5))*ABS(-Q3/2-SQR(D5))*I(1/3)  
5130 RX=U3*V3-B3/(3*A3)  
5140 PRINT"SOLO UNA RAIZ REAL PARA Z";V3;"-",RX  
5150 IF V3="L" THEN ZL=PX:GOT05320  
5160 ZV=RX:GOT0520  
5170 P0=(-Q3/2)/SQR(ABS(P3)+3/27)  
5180 FU=ATNC(P0/SQR(1-P0*I2))+#/#  
5190 Y3(1)=2*SQR(ABS(P3)/3)*COS((FU+@)/3)  
5200 Y3(2)=-2*SQR(ABS(P3)/3)*SIN((FU+@)/3)  
5210 Y3(3)=-2*SQR(ABS(P3)/3)*COS((FU-@)/3)  
5220 FOR I=1 TO 3:RX(I)=Y3(I)-B3/(3*A3):NEXT I  
5230 IF V3="V" THEN 5290  
5240 IF RX(1)<RX(2) THEN 5260  
5250 IF RX(2)<RX(3) THEN ZL=RX(2):GOT05320  
5260 IF RX(1)<RX(3) THEN ZL=RX(1):GOT05320  
5270 ZL=RX(3):GOT05320  
5280 IF RX(1)>RX(2) THEN 5300  
5290 IF RX(2)>RX(3) THEN ZV=RX(2):GOT05320  
5300 IF RX(1)>RX(3) THEN ZV=RX(1):GOT05320  
5310 ZV=RX(3)  
5320 RETURN  
5330 PRINT" NO EXISTE EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR A ESTAS CONDICIONES":GOT05320
```

5970 PEM 00000000000000000000  
5980 PEM SUBRUTINA DE IMPRESION 0  
5990 PEM 00000000000000000000  
6000 IF PI="10"; THEN 6500  
6010 PRINT01:PRINT01  
6020 GOSUB 6550  
6030 PRINT01,"1",.PRINT01,PO8"06SISTEMA":;PRINT01,PO8"15\$SS:  
6040 IF CR8="E" THEN 6050  
6050 PRINT01,PO8"221":.PRINT01,PO8"25CALCULO: FLASH ADIABATICO",  
6060 PRINT01,PO8"53":  
6070 FPINT01,PO8"55ECUACION":.PRINT01,PO8"63"ECB:.GOTO6110  
6080 PRINT01,"1":.PRINT01,PO8"25CALCULO":;.PRINT01,PO8"38"BS:  
6090 PRINT01,PO8"51":  
6100 PRINT01,PO8"54ECUACION":.PRINT01,PO8"64"ECB:  
6110 PRINT01,PO8"77":.GOSUB6530  
6120 PRINT01,PO8"1":.PRINT01,PO8"02INC":.PRINT01,PO8"6"IS:PRINT01,PO8"25":  
6130 PRINT01,PO8"25R,MECLADO CLASICA":.PRINT01,PO8"51":  
6140 PRINT01,PO8"52ETODO MM.M,NEWTON U.P.O.":.FPINT01,PO8"77":.GOSUB 6530  
6150 PRINT01,"1",.PRINT01,PO8"0251":.PRINT01,PO8"27"EEPOR":  
6160 PRINT01,PO8"35"FE8:.PRINT01,PO8"51":.PRINT01,PO8"77":.GOSUB6550  
6170 PRINT01:PRINT01  
6180 P=PO.1333237:P=PO.1333237  
6190 IF CR8="H" THEN 6500  
6200 GOSUB 6550  
6210 PRINT01,"1":  
6220 IF B8<"V/F" THEN PRINT01,PO8"01V/F":.PRINT01,PO8"06"VF:.GOTO 6240  
6230 PRINT01,PO8"01TEMP":.PRINT01,PO8"06"T":.PRINT01,PO8"10"K":  
6240 PRINT01,PO8"25":  
6250 IF B8<"P" THEN PRINT01,PO8"26PRESSION":.PRINT01,PO8"35"PI:.GOTO 6270  
6260 PRINT01,PO8"26TEMP":.PRINT01,PO8"32"T":.PRINT01,PO8"36"K":.GOTO6290  
6270 PRINT01,PO8"15K":  
6280 PRINT01,PO8"51":  
6290 IF B8<"V/F" THEN PRINT01,PO8"52V/F [IDEAL]":.PRINT01,PO8"62"VI:.GOTO 6340  
6300 IF B8<"P" THEN PRINT01,PO8"52P,[IDEAL]":.PRINT01,PO8"62"PI:.GOTO 6330  
6310 IF B8<"T" THEN PRINT01,PO8"52T,[IDEAL]":.PRINT01,PO8"62"TI:.GOTO 6340  
6320 PRINT01,PO8"73"K":.GOTO6340  
6330 PRINT01,PO8"71"PR":  
6340 PRINT01,PO8"77":  
6350 GOSUB 6550  
6360 PRINT01:PRINT01:PRINT01:PRINT01  
6370 PRINT01,PO8"01COMPUESTO":.PRINT01,PO8"19Z(I)":.PRINT01,PO8"35X(I)":  
6380 PRINT01,PO8"49Y(I)":.PRINT01,PO8"65K(I)":  
6390 PRINT01,PO8"01\_\_\_\_\_":.PRINT01,PO8"19\_\_\_\_":.PRINT01,PO8"35\_\_\_\_":  
6400 PRINT01,PO8"49\_\_\_\_":.PRINT01,PO8"65\_\_\_\_":  
6410 PRINT01:PRINT01  
6420 FOR I=1 TO NC  
6430 PRINT01,PO8"05":.PRINT01,PO8"17Z(I)":.PRINT01,PO8"33X(I)":  
6440 PRINT01,PO8"47Y(I)":.PRINT01,PO8"65K(I)":  
6450 PRINT01  
6460 NEXT I  
6470 PRINT01:PRINT01  
6480 IF B8<"V/F" THEN PRINT01,PO8"30V/F":.PRINT01,PO8"37"VF:.GOTO 6520  
6490 IF B8<"P" THEN PRINT01,PO8"30P":.PRINT01,PO8"37"PI:.GOTO 6520  
6500 FPINT01,PO8"30T":.PRINT01,PO8"37":  
6510 GOTO 6670  
6530 FOR I=1 TO 15:PRINT01,"-----":NEXT I:PRINT01,PO8"75":  
6540 RETURN

- 10 -

```
6530 FOR I=1 TO 15:PRINT#1,"":NEXT I:PRINT#1,PO8"75":"
6560 RETURN
6600 FOR I=1 TO NC
6610 PRINT TAB(1);"COMP";TAB(7);"Z(I)";TAB(16);"X(I)";TAB(23);"Y(I)";TAB(30);"K(I"
6620 PRINT TAB(1);"____";TAB(7);"____";TAB(16);"____";TAB(23);"____";TAB(30));"____"
6630 PRINT .PRINT
6640 PRINT TAB(1);I;TAB(5);Z(I);TAB(15);X(I);TAB(25);Y(I);TAB(35);K(I)
6650 NEXT I
6660 PRINT .PRINT
6670 INPUT "QUIERES HACER OTRO CALCULO":KS
6680 IF KS="SI" THEN 200
6690 STOP
```

## **CAPITULO X**

### **CONCLUSIONES**

Son varios los factores que se deben tomar en cuenta en la elaboración de un algoritmo para calcular de una manera estricta (tomando en cuenta las composiciones de las fases), el equilibrio líquido-vapor en sistemas multicomponentes - por medio de ecuaciones de estado, como son:

- a) La ecuación de estado
- b) La inicialización de los cálculos
- c) El método numérico utilizado (de partición o global)
- d) La linearización de los cálculos
- e) El evitar caer en la solución trivial por medio de artificios en los cálculos

a) Cada ecuación de estado genera diferentes resultados debido a que los coeficientes que utilizan son ajustes de casos reales y como es obvio, no se aplican a todos los sistemas en todas las regiones en donde existe el equilibrio líquido vapor con la misma efectividad.

De las tres ecuaciones de estado probadas en esta tesis, la modificación del A.P.I. (American Petroleum Institute), a la ecuación de Soave fué la que arrojó mejores resultados. Las tres se probaron con sistemas cuyas condiciones (temperatura, presión, V/F y composiciones) están reportadas en artículos de revistas especializadas o en libros.

Por ejemplo:

Sistema 1 - Refrigerante Industrial (26)

Sistema 2 - Gas natural típico de México (14)

Sistema 3 - Sistema estudiado por Michelsen (14)

Sistema 4 - Sistema estudiado por Henley y Seader (22)

Sistema 5 - Sistema estudiado por Gundersen (11)

Sistema 6 - Sistema estudiado en el Curso de Simulación del ESIQIE-IMP (15)

b) La inicialización de los cálculos es sumamente importante, ya que de ella depende en parte el llegar rápidamente a la solución del problema debido a que su función es proporcionar valores cercanos al resultado pero sin las complicaciones de un cálculo estricto.

c) Como se señaló en el Capítulo V, la forma más común en la que se calcula el equilibrio líquido-vapor es por medio de métodos de partición debido a que consumen mucho menos tiempo de CPU que los métodos globales.

En esta tesis se utilizó un método de partición como es el de Newton Unidimensional de primer orden (NUPO), ya que como el algoritmo se implementó en una microcomputadora Commodore 64, de escasa memoria, sin macroinstrucciones para resolver matrices y muy lenta en el procesamiento de datos, resultaba inoperante implementar los cálculos con un método global como el de Newton-Raphson.

Se recomienda utilizar métodos de partición para la resolución de problemas de equilibrio líquido-vapor ya que como se indica en el Capítulo V, los métodos globales realizan muchísimos más cálculos que los de partición.

d) La linearización de los cálculos es un aspecto sumamente importante que se debe tomar en cuenta en la elaboración de un algoritmo. Como se demostró en el Capítulo VIII, es más importante tener un parámetro de iteración y una función error que linearice los cálculos, que un método numérico muy sofisticado. Se llega en menos tiempo y de forma más segura al resultado de un problema teniendo una función bien linearizada más que utilizando un método numérico mejor.

De las pruebas realizadas se observó que las mejores funciones error son  $\ln(\Sigma Y / EX)$  y  $(HM - H_F) / HV$  y los mejores parámetros de iteración son:

para cálculos de temperatura:  $1/T^3$  y  $\ln(T)$

para cálculos de presión:  $1/P^{1/3}$

para cálculos de V/F:  $(1+V/F)^2$  y  $\ln(1+V/F)$

Un problema que se presenta cuando los cálculos se realizan cerca del punto crítico o en la región retrógrada es la tendencia a caer en la solución trivial.

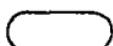
Como se explica en el Capítulo III cuando se utilizan ecuaciones de estado de las llamadas cúbicas, en las que se define el factor de compresibilidad como una función de tercer grado, se puede presentar el problema de que la ecuación solo genere una raíz real que puede ser muy alta para la fase líquida o muy baja para la fase vapor. En este caso es necesario utilizar ciertas técnicas que permitan volver a tener tres raíces reales en la ecuación (como el método propuesto por Jovanović y Paunović (12)), o generar un valor falso del factor de compresibilidad o de la densidad de las fases, pero adecuado a la elaboración de los cálculos con lo que se evita caer en la solución trivial (como el método propuesto por Mathias, Boston y Watanasiri (13)).

Tomando en cuenta lo anterior se puede construir un algoritmo que funcione en la mayoría de los sistemas incluso en la región retrógrada y en la cercana al punto crítico, aunque no se puede afirmar que sea el mejor o el más rápido ya que en algunas ocasiones un parámetro de iteración, una función error o una combinación de ambos que funciona muy bien con algunos sistemas, puede no ser el mejor en otros.

## **APENDICES**

APENDICE A

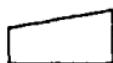
SIMBOLOGIA  
UTILIZADA EN EL  
DIAGRAMA DE FLUJO



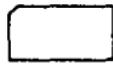
LOCALIDAD



OPERACION MATEMATICA O ASIGNACION DE UN VALOR A UNA VARIABLE



ACceso DE INFORMACION POR PARTE DEL USUARIO



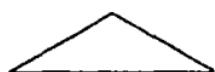
ACceso DE INFORMACION DE UN DISPOSITIVO PERIFERICO



CICLO



CONDICIONAL



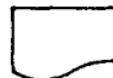
TRANSFERENCIA CONDICIONAL SELECTIVA



TRANSFERENCIA A UNA SUBRUTINA



TRANSFERENCIA



IMPRESION

## LISTA DE VARIABLES DEL PROGRAMA

A3	Coefficiente "A" de la ecuación cúbica del factor de compresibilidad
AA(1)	Coefficiente "A" de la ecuación de presión de vapor de Antoine
AL	Coefficiente "A" de fase líquida en ecuación de fugacidad
AS	aa de fase líquida en ecuación de fugacidad
AP	aa de fase vapor en ecuación de fugacidad
AV	Coefficiente "A" de fase vapor en ecuación de fugacidad
AX	$a_{ij}a_{lj}$ en ecuación de fugacidad
B3	Coefficiente "B" de la ecuación cúbica del factor de compresibilidad
BA(1)	Coefficiente "B" de la ecuación de presión de vapor de Antoine
BL	Coefficiente "B" de fase líquida en ecuación de fugacidad
BS	$b_j$ en ecuación de fugacidad en fase líquida
BP	$b_j$ en ecuación de fugacidad en fase vapor

BV	Coefficiente "B" de fase vapor en ecuación de fugacidad
BS	Tipo de cálculo de equilibrio líquido-vapor (Temperatura, Presión o V/F)
C3	Coefficiente "C" de la ecuación cúbica del factor de compresibilidad
CA(I)	Coefficiente "C" de la ecuación de presión de vapor de Antoine
CA\$	Tipo de cálculo a realizar (Expansión isoentálpica o ELV)
CP(I,J)	Coefficientes para el cálculo de la entalpía del gas ideal
CH(I)	$S_i$ en ecuación de fugacidad
D3	Coefficiente "D" de la ecuación cúbica del factor de compresibilidad
DR	$2 \cdot (2)^{0.9}$
DX	$\Sigma x_i'$
DY	$\Sigma y_i'$
EC\$	Tipo de ecuación de estado utilizada para calcular el ELV

ER	Función error en cálculos de equilibrio líquido-vapor
EX(i)	Composición en la fase líquida
EY(i)	Composición en la fase vapor
F1	Función error en expansión isoentálpica a T
F2	Función error en expansión isoentálpica a T incrementada en 1.00001
FA(i)	$a_j$ en ecuación de fugacidad
FB(i)	$b_j$ en ecuación de fugacidad
FES	Nombre de la función error para impresión de resultados
FL	Coeficiente de fugacidad en fase líquida
FL(i)	$a_j$ en ecuación de fugacidad
FW	Coeficiente de fugacidad en fase vapor
HO(i)	Entalpía del gas ideal del compuesto i
HI	Entalpía del gas ideal de la fase líquida

H2	Entalpía del gas ideal de la fase vapor
H2\$	Indicador de presencia de hidrógeno en la mezcla
HF	Entalpía de la alimentación en la expansión isoentálpica
HL	Entalpía de la fase líquida a la salida de la expansión isoentálpica
HM	Entalpía de la mezcla de salida de la expansión isoentálpica
HV	Entalpía de la fase vapor a la salida de la expansión isoentálpica
IB(i,j)	Coeficiente de interacción binaria entre los compuestos i,j
IT	Contador de las iteraciones en los cálculos de equilibrio
IS	Indicador del tipo de inicialización de cálculos de equilibrio
JX	$x_j'$ , Derivada de fracciones molares del líquido respecto al parámetro de iteración particular
JY	$y_j'$ , Derivada de fracciones molares del vapor respecto al parámetro de iteración particular
K0	1.00001. Tamaño de paso implícito usado en el cálculo de las derivadas numéricas
K(1)	Constante de equilibrio del compuesto 1

KD(i)	$K_i^*$
KP	$\sum y_j \alpha_{ij} z_{ij} / \alpha$
NC	Número de compuestos de la mezcla
OO	Factor de conversión de PSIA-ft <sup>3</sup> a BTU = 0.185183
P	Presión del sistema
P0	Presión calculada de forma ideal
P0	Valor de la primera aproximación a V/F partiendo de V/F = 0
P1	Valor de la primera aproximación a V/F partiendo de V/F = 1
P2	Presión a la salida de la expansión isoentálpica
PS	Indicador para impresión de resultados en papel
PC(i)	Presión crítica del compuesto i
PIS	Nombre del parámetro de iteración para impresión de resultados
PK	$\sum x_j \alpha_{ij} z_{ij} / \alpha$

PV(i)	Presión de vapor del compuesto i
RD	2 <sup>43</sup>
RG	Constante de los gases = 1.9872 BTU/(lb mol °R)
RR	Constante de los gases = 10.731 (PSIA + ft <sup>3</sup> )/(lb mol °R)
RX	Valor del factor de compresibilidad cuando sólo existe una raíz en la ecuación cúbica
RX(t)	Valor del factor de compresibilidad cuando existen tres raíces en la ecuación cúbica
SX	$\Sigma x_i$
SY	$\Sigma y_i$
SZ	$\Sigma z_i$
T	Temperatura del sistema
TO	Temperatura calculada de forma ideal
TC(i)	Temperatura crítica del compuesto i

UM  $1 + 2^{0.5}$

UR  $1 + 2^{0.4}$

VF Relación de vaporización V/F

VI V/F calculado en forma ideal

VL(i)  $\Sigma x_i \alpha_{ij} s_{ij}$

WL(i)  $\Sigma y_i \alpha_{ij} s_{ij}$

V\$ Indicador de fase en el cálculo del factor de compresibilidad

W(i) Factor acéntrico del compuesto i

Z(i) Composición de la alimentación

ZL Factor de compresibilidad de la fase líquida

ZV Factor de compresibilidad de la fase vapor

APENDICE C

NOMENCLATURA

- A Coeficiente "A" de la ecuación de presión de vapor de Antoine
- A Parámetro de las ecuaciones de Soave-Redlich-Kwong, Soave-API y Peng-Robinson (Capítulo III)
- a Parámetro de las ecuaciones de Soave-Redlich-Kwong, Soave-API , Peng-Robinson, Berthelot y Redlich-Kwong (Capítulo III)
- B Coeficiente "B" de la ecuación de presión de vapor de Antoine
- B Parámetro de las ecuaciones de Soave-Redlich-Kwong, Soave-API y Peng-Robinson (Capítulo III)
- b Parámetro de las ecuaciones de Soave-Redlich-Kwong, Soave-API , Peng-Robinson, Berthelot y Redlich-Kwong (Capítulo III)
- C Coeficiente "C" de la ecuación de presión de vapor de Antoine
- F Corriente de alimentación
- H Entalpía de una corriente
- h° Entalpía del gas ideal

$h$	Depertura o Partición de entalpía
$K$	Constante de equilibrio
$k$	Coefficiente de interacción binaria
$L$	Corriente en fase líquida
$P$	Presión
$p^*$	Presión de vapor
$p^{\circ}$	Presión de vapor
$s$	Parámetro de las ecuaciones de Soave-Redlich-Kwong, Soave-API y Peng-Robinson (Capítulo III)
$T$	Temperatura
$V$	Corriente en fase vapor
$V$	Volumen
$x$	Fracción mol en la fase líquida

y Fracción mol en la fase vapor

z Fracción mol en la alimentación

**SUBINDICES**

A Compuesto A en mezclas binarias

B Compuesto B en mezclas binarias

C Propiedad crítica

F Final de una expansión

F Corriente de alimentación

L Corriente en fase líquida

m Propiedad de mezcla

o Inicio de una expansión

P Presión

**PC** Propiedad pseudocrítica

**r** Propiedad reducida

**T** Temperatura

**V** Corriente en fase vapor

#### **SUPERINDEXES**

**n** Fase (líquida o vapor)

#### **LETRAS GRIEGAS**

**α** Parámetro de las ecuaciones de Soave-Redlich-Kwong, Soave-API y Peng-Robinson (Capítulo III)

**β** Parámetro de las ecuaciones de Beattie-Bridgeman y Benedict-Webb-Rubin (Capítulo III)

- Y Parámetro de la ecuación de Beattie-Bridgeman (Capítulo III)
- δ Parámetro de la ecuación de Beattie-Bridgeman (Capítulo III)
- n Parámetro de la ecuación de Benedict-Webb-Rubin (Capítulo III)
- o Parámetro de la ecuación de Benedict-Webb-Rubin (Capítulo III)
- ψ Variable función de temperatura, presión o V/F
- w Parámetro de la ecuación de Benedict-Webb-Rubin (Capítulo III)
- w Factor acéntrico

**APENDICE D**

**PRUEBAS DE LINEALIZACION**

D.1 PRUEBAS DE LINEALIZACIÓN EN CÁLCULOS DE TEMPERATURA.

D.1 PRUEBAS DE LINEALIZACIÓN EN CÁLCULOS DE TEMPERATURA.

```
=====
| Sistemas: 1           | Calculo Temperatura | Ecuacion: Esolver-APL |
| Inic: Ec. de Michelsoen | R.Mezclada: Clasica   | Metodo Num:Newton U.P.O. |
|                         | F.Error ln(sunY/sunX) | |
=====
```

```
=====
| V/Fr: 1               | Presion= 101.225001 kPa | T.ideal= 214.274698 *K |
=====
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (*K)
T	4	.99996631	226.361087
1/T	3	1.00000048	226.361047
T12	4	.99994793	226.361049
1/T12	3	.9999399506	226.361123
T13	4	.9999362773	226.361069
1/T13	3	.999936975	226.361127
T14	4	.9999315677	226.361057
1/T14	4	.9999323203	226.361073
ln(T)	3	.999969454	226.360244
1/ln(T)	3	1.00005239	226.36087

```
=====
| V/Fr: .5              | Presion= 101.325001 kPa | T.ideal= 214.196593 *K |
=====
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (*K)
T	4	.99998777	226.274903
1/T	3	.999999641	226.274736
T12	4	.999980323	226.274802
1/T12	3	.999999664	226.274857
T13	4	.999936751	226.274796
1/T13	3	.999936853	226.275751
T14	4	.99972164	226.274782
1/T14	4	.999972503	226.274802
ln(T)	3	1.00002667	226.274019
1/ln(T)	3	1.00003756	226.274633

```
=====
| V/Fr: 0               | Presion= 101.325001 kPa | T.ideal= 213.925497 *K |
=====
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (*K)
T	4	.999987981	225.925047
1/T	3	1.00000123	225.925032
T12	4	.999949763	225.925041
1/T12	3	.999999314	225.925232
T13	4	.999666382	225.925036
1/T13	3	.999936772	225.925442
T14	4	.999724251	225.925023
1/T14	4	.999972653	225.925049
ln(T)	3	1.00002129	225.924416
1/ln(T)	3	1.00002672	225.924859

Sistemas	Calculo: Temperatura	Ecuacion: Soave-RP
Inic: Ec. de Michelsen	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:sumY-sumX	

V/F= 1	Presion= 101.325001 kPa	T.ideal= 214.274515 °K
--------	-------------------------	------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	5	.999814836	226,36107
1/T	4	.999996369	226,35955
T <sub>12</sub>	5	.99906714	226,361071
1/T <sub>12</sub>	4	.999992058	226,36044
T <sub>13</sub>	5	.999305872	226,36107
1/T <sub>13</sub>	4	.999945546	226,360742
T <sub>14</sub>	5	.998909919	226,361059
1/T <sub>14</sub>	4	.9998724846	226,36089
ln(T)	4	.999934756	226,359218
1/ln(T)	4	1.00001802	226,359649

V/F= .5	Presion= 101.325001 kPa	T.ideal= 214.196853 °K
---------	-------------------------	------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	1.00000149	226,274693
1/T	3	1.00000025	226,274512
T <sub>12</sub>	3	.99999192	226,273304
1/T <sub>12</sub>	3	.999998918	226,275415
T <sub>13</sub>	4	.999954531	226,274201
1/T <sub>13</sub>	4	.999979587	226,274804
T <sub>14</sub>	4	.999873697	226,274799
1/T <sub>14</sub>	4	.99990802	226,274911
ln(T)	3	1.00005072	226,274727
1/ln(T)	3	1.00001406	226,27446

V/F= 0	Presion= 101.325001 kPa	T.ideal= 213.925497 °K
--------	-------------------------	------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	4	.999764641	225,925431
1/T	5	.999984783	225,925046
T <sub>12</sub>	4	.999652558	225,925185
1/T <sub>12</sub>	5	.999965316	225,925049
T <sub>13</sub>	4	.999594508	225,925096
1/T <sub>13</sub>	5	.99968012	225,925041
T <sub>14</sub>	4	.999589658	225,925072
1/T <sub>14</sub>	5	.998954599	225,925035
ln(T)	4	.999880415	225,926137
1/ln(T)	4	.999923433	225,926414

```
=====
| Sistema: 1          | Calculo: Temperatura | Ecucion: Soave-RPI   |
| Inic: Ec. de Michelsen | R.Mezclado: Clasica | Metodo Num:Newton U.P.O. |
|                         | F.Error:ln(sumYt3/sumXt2) |
=====
```

```
=====
| V/F= 1              | Presion= 101.325001 kPa | T.ideal= 214.274515 °K |
=====
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	4	.999982581	226.36107
1/T	3	1.00000103	226.361063
T12	4	.99994835	226.361071
1/T12	3	1.00000006	226.361121
T13	4	.999864217	226.361068
1/T13	3	.99997306	226.362096
T14	4	.999716471	226.361065
1/T14	3	.999873327	226.361073
ln(T)	4	.999991642	226.360257
1/ln(T)	3	1.00009516	226.360871

```
=====
| V/F= .5             | Presion= 101.325001 kPa | T.ideal= 214.196853 °K |
=====
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	4	.999975553	226.274802
1/T	3	.99999744	226.274159
T12	4	.999921502	226.274802
1/T12	3	.99999761	226.274777
T13	4	.999815406	226.274783
1/T13	3	.999999558	226.274834
T14	4	.999639296	226.27475
1/T14	3	.999991605	226.276079
ln(T)	4	1.00006038	226.274802
1/ln(T)	3	1.00005813	226.273039

```
=====
| V/F= 0              | Presion= 101.325001 kPa | T.ideal= 213.925496 °K |
=====
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	4	.999987486	225.925046
1/T	3	1.00000081	225.925002
T12	4	.999943935	225.925043
1/T12	3	.999999802	225.925143
T13	4	.9998672	225.925049
1/T13	3	.999996876	225.926275
T14	4	.999725917	225.925016
1/T14	3	.999972925	225.925046
ln(T)	4	1.00000383	225.924287
1/ln(T)	3	1.00004869	225.924975

```
=====
| Sistema: 1      | Calculo: Temperatura | Ecuacion: Soave-Redlich-Kwong |
|inic: Ec. de Michelsen | R.Mezclado: Clasica | Metodo Num: Newton U.P.O. |
|          | F.Error: sumYt3-sumXt2 |
```

```
=====
| V/F= 1           | Presion= 101.325001 kPa | T.ideal= 214.274515 *K |
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (*K)
T	5	.999730759	226.360799
1/T	5	.999992965	226.360597
T12	5	.999447106	226.360691
1/T12	5	.999985172	226.361
T13	5	.999064035	226.360493
1/T13	5	.999891897	226.361017
T14	5	.998572018	226.360376
1/T14	5	.999719299	226.361044
ln(T)	5	.999945285	226.360379
1/ln(T)	5	.999949947	226.360938

```
=====
| V/F= .5          | Presion= 101.325001 kPa | T.ideal= 214.196853 *K |
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (*K)
T	4	.999975597	226.274802
1/T	4	.999997982	226.274805
T12	3	.999983029	226.275368
1/T12	4	.999992162	226.27482
T13	3	.99999366	226.274678
1/T13	4	.999915577	226.274873
T14	3	1.000000018	226.274798
1/T14	4	.999695919	226.275135
ln(T)	4	1.00007498	226.274806
1/ln(T)	4	.999986494	226.2749

```
=====
| V/F= 0           | Presion= 101.325001 kPa | T.ideal= 213.925497 *K |
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (*K)
T	7	.996515679	225.925091
1/T	8	.999858411	225.925047
T12	7	.99368237	225.925048
1/T12	8	.999759322	225.925147
T13	6	.990921086	225.927268
1/T13	9	.997081214	225.925047
T14	6	.987421668	225.925579
1/T14	9	.993453049	225.925414
ln(T)	7	.998654035	225.925597
1/ln(T)	7	.999268251	225.926218

```
=====
| Sistema: 1 | Calculo: Temperatura | Ecuacion: Soave-API |
| Inic: Presion de Vapor | R.Mezclado: Clasica | Metodo Num:Newton U.P.O. |
| F.Error:ln(sumY/sumX) |
=====
```

```
=====
| V/F= 1 | Presion= 101.325001 kPa | T.ideal= 225.673365 °K |
=====
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	1.00029635	226.36107
1/T	2	.999970394	226.360521
T12	3	1.0000302	226.361059
1/T12	2	1.0000289	226.361772
T13	3	.999983952	226.361072
1/T13	2	.999990153	226.36298
T14	3	1.000009262	226.361059
1/T14	3	.999990252	226.361072
ln(T)	2	1.01340742	226.359402
1/ln(T)	2	.987600684	226.360126

```
=====
| V/F= .5 | Presion= 101.325001 kPa | T.ideal= 225.578842 °K |
=====
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	1.00037999	226.274802
1/T	2	.99995505	226.274395
T12	3	1.0002639	226.274902
1/T12	2	1.00012591	226.275409
T13	3	1.00003568	226.274804
1/T13	2	.999979332	226.276414
T14	3	1.000009858	226.27498
1/T14	3	1.00001176	226.274803
ln(T)	2	.999252682	226.273116
1/ln(T)	2	1.00003145	226.273856

```
=====
| V/F= 0 | Presion= 101.325001 kPa | T.ideal= 225.212507 °K |
=====
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	1.00076785	225.925046
1/T	2	1.00010479	225.924588
T12	3	1.00015406	225.925045
1/T12	2	1.00007984	225.92508
T13	3	.999990534	225.92504
1/T13	3	.999990877	225.925047
T14	3	1.00007744	225.925043
1/T14	3	1.00000348	225.925046
ln(T)	2	1.01390568	225.923257
1/ln(T)	2	1.0076988	225.924025

---

I Sistemas: 1	I Calculo: Temperatura	I Ecuacion: Soave-Redlich-Kwong
I Inic: Presion de Vapor	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num: Newton U.P.O.
I F.Error:sumY-sumX		I

---



---

I V/F= 1	I Presion= 101.325001 kPa	I T.ideal= 225.673333 °K
----------	---------------------------	--------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	1.00076856	226.361066
1/T	3	1.00021772	226.361069
T <sub>12</sub>	3	1.00028052	226.361064
1/T <sub>12</sub>	3	.99997832	226.361071
T <sub>13</sub>	3	1.00000266	226.361063
1/T <sub>13</sub>	3	.999950332	226.361071
T <sub>14</sub>	3	1.00003727	226.361057
1/T <sub>14</sub>	3	1.00000309	226.361059
ln(T)	3	.999220007	226.361064
1/ln(T)	3	1.08775962	226.361071

---



---

I V/F= .5	I Presion= 101.325001 kPa	I T.ideal= 225.578841 °K
-----------	---------------------------	--------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	1.0005178	226.274802
1/T	2	.999922397	226.274593
T <sub>12</sub>	3	1.00015101	226.274803
1/T <sub>12</sub>	2	.999991975	226.27557
T <sub>13</sub>	3	1.00002024	226.274902
1/T <sub>13</sub>	2	.999979976	226.276657
T <sub>14</sub>	3	1.00009773	226.274802
1/T <sub>14</sub>	3	.999982002	226.274894
ln(T)	2	.999594218	226.273229
1/ln(T)	2	.996265768	226.273961

---



---

I V/F= 0	I Presion= 101.325001 kPa	I T.ideal= 225.212507 °K
----------	---------------------------	--------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	1.00032166	225.925052
1/T	3	1.00024875	225.925044
T <sub>12</sub>	3	1.00015801	225.925047
1/T <sub>12</sub>	3	1.00001176	225.92505
T <sub>13</sub>	3	.999946331	225.92505
1/T <sub>13</sub>	3	.999984579	225.925039
T <sub>14</sub>	3	1.00010351	225.925046
1/T <sub>14</sub>	3	.999952453	225.925074
ln(T)	3	1.00192713	225.925051
1/ln(T)	3	1.0132641	225.925046

- 136 -

Sistema: 1	Calculo: Temperatura	Ecuacion: Soave-APR
Inic: Presion de Vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num: Newton U.P.O.
F.Error:ln(sumYiT/sumXi2)		

IV/F= 1 | Presion= 101.325001 kPa | T.ideal= 225.673365 °K |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	1.00029635	226.36107
1/T	2	.999370394	226.360521
T12	3	1.00003302	226.361059
1/T12	2	1.0000289	226.361772
T13	3	.999993962	226.361072
1/T13	2	.999990153	226.36298
T14	3	1.00009262	226.361959
1/T14	3	.999990307	226.361072
ln(T)	2	1.01340742	226.359492
1/ln(T)	2	.987600684	226.360126

IV/F= .5 | Presion= 101.325001 kPa | T.ideal= 225.578342 °K |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	1.00091141	226.274902
1/T	2	1.00025556	226.273325
T12	3	1.0001877	226.274804
1/T12	2	1.00007845	226.274336
T13	3	.999977166	226.274901
1/T13	2	1.00003512	226.275337
T14	3	1.00009316	226.2748
1/T14	2	.999984256	226.276436
ln(T)	3	1.00293747	226.274902
1/ln(T)	2	1.00044955	226.272787

IV/F= 0 | Presion= 101.325001 kPa | T.ideal= 225.212509 °K |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	1.00019975	225.925046
1/T	2	1.00046111	225.924737
T12	3	1.00003409	225.925047
1/T12	2	.999988372	225.925996
T13	3	.999922665	225.925046
1/T13	3	.999992769	225.925047
T14	3	1.00010981	225.925041
1/T14	3	1.00001114	225.925046
ln(T)	2	1.01223184	225.923251
1/ln(T)	2	.98537598	225.924038

I Sistema: 1 Calculo: Temperatura Ecuacion: Soave-API  
I Inic: Presion de Vapor IR.Recalculado: Clasica Metodo Num:Newton U.P.O.  
I F.Error:sumVf3-sumXf2 I

I V/F= 1 Presion= 101.325001 kPa IT.ideal= 225.673332 °K I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	1.0005844	226.361044
1/T	3	1.0003349	226.361053
Tf2	3	1.00030408	226.361043
1/Tf2	3	.999991736	226.361049
Tf3	3	1.000082344	226.361048
1/Tf3	3	.999974344	226.361065
Tf4	3	1.00007913	226.361028
1/Tf4	3	.999976399	226.361063
ln(T)	3	.99907251	226.361042
1/ln(T)	3	1.01153882	226.361055

I V/F= .5 Presion= 101.325001 kPa IT.ideal= 225.578841 °K I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	2	1.00031568	226.276552
1/T	3	1.00009912	226.274603
Tf2	2	1.00022589	226.275545
1/Tf2	3	.999900758	226.274604
Tf3	2	.999999809	226.274322
1/Tf3	3	1.00000741	226.274804
Tf4	2	1.00000269	226.273417
1/Tf4	3	.999965775	226.274805
ln(T)	3	1.0175233	226.274804
1/ln(T)	3	1.00315872	226.274802

I V/F= 0 Presion= 101.325001 kPa IT.ideal= 225.212506 °K I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	1.00019432	225.925113
1/T	3	1.00036325	225.925129
Tf2	3	1.00009229	225.925093
1/Tf2	3	1.00003486	225.925124
Tf3	3	.999966196	225.925095
1/Tf3	3	1.000006254	225.925143
Tf4	3	1.000006630	225.925095
1/Tf4	3	.999967651	225.925142
ln(T)	3	1.01201307	225.925124
1/ln(T)	3	1.01525641	225.925111

! Sistema: I Calculo: Temperatura ! Ecuacion: Sosave-API !  
!inic: Ec. de Michelsoen IR.Mezclado: Clasica ! Metodo Num:Newton U.P.O. !  
! F.Error:ln(sumY/sumX) !

!V/F= 1 !Presion= 3452.79874 kPa !T.ideal= 346.714147 °K !

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	.999973615	346.874934
1/T	3	1.00015912	346.875003
T12	3	1.00001193	346.874995
1/T12	2	1.00002142	346.877774
T13	3	1.00000243	346.874933
1/T13	2	1.00000087	346.874009
T14	3	1.00000254	346.874952
1/T14	2	1.00000343	346.891344
ln(T)	3	1.00059476	346.875004
1/ln(T)	3	.999407534	346.875004

!V/F= .5 !Presion= 3452.79874 kPa !T.ideal= 346.599938 °K !

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	.999994912	346.816737
1/T	3	1.00016363	346.816744
T12	3	1.00000267	346.816735
1/T12	2	1.00004638	346.809301
T13	3	.999991698	346.816734
1/T13	2	1.00000071	346.816639
T14	3	1.00000132	346.816727
1/T14	2	.999995062	346.823769
ln(T)	3	1.00271038	346.816742
1/ln(T)	3	.997529615	346.816742

!V/F= 0 !Presion= 3452.79874 kPa !T.ideal= 346.359921 °K !

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	.99999499	346.736309
1/T	3	1.00021153	346.736212
T12	3	.999963707	346.736211
1/T12	2	1.00005606	346.728185
T13	3	1.00000252	346.725217
1/T13	2	.999991694	346.716767
T14	3	1.00000408	346.736153
1/T14	2	1.00000467	346.742796
ln(T)	3	1.01403561	346.736216
1/ln(T)	3	.998891163	346.736216

Sistema:	I	Calculo:	Temperatura	Ecuacion:	Soave-Redlich-Kwong
Inic:	Ecu. de Michelsen	R.Hecido:	Clasica	Metodo Num:	Newton U.P.O.
			F.Error:	sumV-sunX	

V/F=	1	Presion=	3452.79974 kPa	T.ideal=	346.71415 °K
------	---	----------	----------------	----------	--------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	.999986907	348.874932
1/T	3	1.000183992	348.874395
T <sub>12</sub>	3	1.00001073	348.874997
1/T <sub>12</sub>	3	1.00006136	348.874992
T <sub>13</sub>	3	.999996242	348.874963
1/T <sub>13</sub>	3	1.00000194	348.875006
T <sub>14</sub>	3	.999997179	348.874947
1/T <sub>14</sub>	2	.999993696	348.864406
ln(T)	3	1.00217003	348.874992
1/ln(T)	3	1.00053116	348.874994

V/F=	.5	Presion=	3452.79974 kPa	T.ideal=	346.599938 °K
------	----	----------	----------------	----------	---------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	1.00004489	348.816739
1/T	3	1.00009339	348.816742
T <sub>12</sub>	3	1.0000271	348.816739
1/T <sub>12</sub>	2	1.00002314	348.808779
T <sub>13</sub>	3	1.00000739	348.816716
1/T <sub>13</sub>	2	1.00000336	348.81678
T <sub>14</sub>	3	1.00000069	348.81677
1/T <sub>14</sub>	2	.999993475	348.823438
ln(T)	3	1.00043206	348.816743
1/ln(T)	3	.999775468	348.816742

V/F=	0	Presion=	3452.79974 kPa	T.ideal=	346.359921 °K
------	---	----------	----------------	----------	---------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	2	.999991358	348.726291
1/T	2	1.00012976	348.742224
T <sub>12</sub>	3	.999994848	348.736216
1/T <sub>12</sub>	3	1.00003401	348.736223
T <sub>13</sub>	3	.999991202	348.736203
1/T <sub>13</sub>	3	.999994272	348.736218
T <sub>14</sub>	3	1.00000717	348.736189
1/T <sub>14</sub>	2	1.00000325	348.736216
ln(T)	2	.999959922	348.734241
1/ln(T)	2	.99999493	348.737158

---

| Sistema: 1 | Calculo: Temperatura | Ecuacion: Soave-APR |  
| Inic: Ec. de Michelsen | R.Mezclado: Clasica | Metodo Num:Newton U.P.O. |  
| F.Error:ln(sunY13/sumXt2)|

---



---

| V/F= 1 | Presion= 3452.79874 kPa | T.ideal= 346.71415 °K |

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	.999990359	348.875006
1/T	2	1.00008593	348.861864
T12	3	.999999205	348.874995
1/T12	2	1.00003925	349.666531
T13	3	.999992977	348.874942
1/T13	2	.999997931	348.87543
T14	3	.999996515	348.874935
1/T14	2	1.00000511	349.682554
ln(T)	3	1.00487705	348.875005
1/ln(T)	3	.999869591	348.875004

---

| V/F= .5 | Presion= 3452.79874 kPa | T.ideal= 346.598938 °K |

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	.999994063	348.816735
1/T	2	1.00017634	348.816742
T12	3	1.00000926	348.816732
1/T12	2	1.00005958	348.807405
T13	3	1.00000285	348.816713
1/T13	2	1.00000091	348.81473
T14	3	.999999393	348.81671
1/T14	2	.999999764	349.621848
ln(T)	3	1.00491226	348.816741
1/ln(T)	3	.999563681	348.816741

---

| V/F= 0 | Presion= 3452.79874 kPa | T.ideal= 346.359821 °K |

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	.999894565	348.736208
1/T	3	1.00003205	348.736219
T12	3	.999990006	349.736199
1/T12	2	1.00001806	349.729706
T13	3	.999999012	349.736193
1/T13	2	.99999327	348.736881
T14	3	1.00000379	349.736192
1/T14	2	1.00000121	349.744269
ln(T)	3	1.00480196	348.736217
1/ln(T)	3	.99746234	348.736216

! Sistema: 1      ! Calculo: Temperatura    ! Ecuacion: Soave-AP1    !  
 !inic: Ec. de Michelsen !R.Mezclado: Clasica    !Metodo Num:Newton U.P.O.    !  
 ! F.Error:sumY12-sumX12    !

IV/F= 1      !Presion= 3452.79874 kPa ! T.ideal= 346.71415 °K !

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	.999993938	348.874942
1/T	3	1.00017698	348.874967
T12	3	1.00001183	348.874938
1/T12	3	1.00004474	348.874994
T13	3	.999996378	348.874992
1/T13	3	1.00000125	348.874983
T14	3	.999995154	348.874853
1/T14	3	1.00000175	348.874974
ln(T)	3	1.00205983	348.874965
1/ln(T)	3	1.00376342	348.874965

IV/F= .5      !Presion= 3452.79874 kPa ! T.ideal= 346.598938 °K !

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	1.00010947	348.816739
1/T	2	1.00069361	348.810256
T12	3	1.00002093	348.816739
1/T12	2	1.00005468	348.816934
T13	3	.999996555	348.816725
1/T13	2	.999998839	348.824384
T14	3	.999996428	348.816746
1/T14	3	1.00000462	348.816744
ln(T)	3	1.00265649	348.816744
1/ln(T)	2	1.00118586	348.80554

IV/F= 0      !Presion= 3452.79874 kPa ! T.ideal= 346.353821 °K !

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	.999993424	348.736219
1/T	3	1.00018011	348.736239
T12	3	1.00001968	348.736229
1/T12	3	1.00002379	348.736225
T13	3	1.00000938	348.736217
1/T13	3	.999995278	348.736243
T14	2	1.00000239	348.744836
1/T14	3	1.000002	348.736292
ln(T)	3	1.00249407	348.736226
1/ln(T)	3	1.00039036	348.736233

```

Sistema: 1   Calculo: Temperatura   Ecuacion: Soave-AP1
Iinic: Presion de Vapor  IR.Mezclado: Clasica  Metodo Num:Newton U.P.D.
I F.Error:ln(sumY/sumX)  I

```

```

IV/F= 1   IPresion= 3452.79845 kPa  IT.ideal= 352.689103 °K  I

```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	1.00000483	348.874615
1/T	3	1.00003948	348.874835
T12	3	.999995945	348.874318
1/T12	3	1.00000744	348.874942
T13	3	.999988786	348.874156
1/T13	3	.999993959	348.87495
T14	3	.999985167	348.873862
1/T14	3	1.0000017	348.87495
ln(T)	3	1.0012726	348.87473
1/ln(T)	3	.998507037	348.874735

```

IV/F= .5   IPresion= 3452.79845 kPa  IT.ideal= 352.574555 °K  I

```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	.999989744	348.816392
1/T	3	1.00003157	348.816336
T12	3	.999992553	348.816152
1/T12	3	1.00001185	348.816563
T13	3	.999991633	348.816036
1/T13	3	.999999247	348.816789
T14	3	.999986774	348.81355
1/T14	3	1.00000046	348.81663
ln(T)	3	1.00093207	348.816474
1/ln(T)	3	.999239681	348.816499

```

IV/F= 0   IPresion= 3452.79845 kPa  IT.ideal= 352.03994 °K  I

```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	1.00001194	348.735875
1/T	3	1.00004594	348.73605
T12	3	1.00000005	348.735764
1/T12	3	1.00001965	348.736145
T13	3	.999990446	348.735656
1/T13	3	.999998420	348.73619
T14	3	.999993451	348.735186
1/T14	3	1.0000032	348.7362
ln(T)	3	1.00174177	348.736004
1/ln(T)	3	.999883038	348.736035

```

=====
| Sistema: 1      | Calculo: Temperatura | Ecuacion: Soave-APR |
| Iinic: Presion de Vapor | R.Mezclado: Clasica | Metodo Num:Newton U.P.O. |
| F.Error:sunY-sumX |                         |
=====

```

```

=====
| V/F= 1          | Presion= 3452.79844 kPa | T.ideal= 352.689108 °K |
=====

```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	.99996763	348.874066
1/T	3	1.00005597	348.874509
T12	3	.999987101	348.873635
1/T12	3	1.00001625	348.874653
T13	3	.999964962	348.873379
1/T13	3	1.00000094	348.874717
T14	3	.999978378	348.872792
1/T14	3	.999999645	348.874757
ln(T)	3	1.081564	348.874298
1/ln(T)	3	.999776755	348.874367

```

=====
| V/F= .5         | Presion= 3452.79844 kPa | T.ideal= 352.574554 °K |
=====

```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	.999967592	348.816378
1/T	3	1.00002069	348.816534
T12	3	.999993238	348.816149
1/T12	3	1.00000995	348.816675
T13	3	.999989161	348.815863
1/T13	3	.99999834	348.816697
T14	3	.999985989	348.815591
1/T14	3	.999999377	348.81666
ln(T)	3	1.00219979	348.816492
1/ln(T)	3	.998764805	348.816506

```

=====
| V/F= 0          | Presion= 3452.79844 kPa | T.ideal= 352.33994 °K |
=====

```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	.999990167	348.735095
1/T	3	1.00000987	348.735211
T12	3	1.00000663	348.736976
1/T12	3	1.00001547	348.736195
T13	3	.999993451	348.735905
1/T13	3	.999999379	348.736287
T14	3	.99999128	348.73585
1/T14	3	1.0000015	348.736204
ln(T)	3	1.00200620	348.736169
1/ln(T)	3	1.00036009	348.736175

- 144 -

-----  
| Sistema: 1 | Calculo: Temperatura | Ecuacion: Soave-RP1 |  
|inic: Presion de Vapor | R.Mezclado: Clasica | Metodo Num:Newton U.P.O. |  
F.Error:ln(sumYt3/sumXt2)

-----  
| V/F= 1 | Presion= 3452.79844 kPa | T.ideal= 352.685581 °K |  
-----

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	.999999196	348.874575
1/T	3	1.00006552	348.87491
T12	3	.99999344	348.874507
1/T12	3	1.00001916	348.874915
T13	3	.999989977	348.874246
1/T13	3	1.0000018	348.875029
T14	3	.999985317	348.823912
1/T14	3	.999992818	348.874937
ln(T)	3	1.00070498	348.874729
1/ln(T)	3	.999644387	348.874767

-----  
| V/F= .5 | Presion= 3452.79844 kPa | T.ideal= 352.574555 °K |  
-----

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	1.00000134	348.816286
1/T	3	1.000005016	348.816522
T12	3	.999996973	348.816104
1/T12	3	1.00001325	348.816599
T13	3	.999984804	348.816026
1/T13	3	.999997235	348.816641
T14	3	.999985771	348.815449
1/T14	3	1.0000015	348.816652
ln(T)	3	1.00107318	348.816447
1/ln(T)	3	.999539185	348.816479

-----  
| V/F= 0 | Presion= 3452.79844 kPa | T.ideal= 352.33994 °K |  
-----

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (°K)
T	3	1.00000969	348.735293
1/T	3	1.00004502	348.736086
T12	3	.999995271	348.735703
1/T12	3	1.00001825	348.736155
T13	3	.999988974	348.735708
1/T13	3	.999996996	348.736151
T14	3	.999988439	348.735469
1/T14	3	.999999271	348.73621
ln(T)	3	1.00032059	348.736005
1/ln(T)	3	1.00034067	348.736023

```
=====
| Sistema: 1          | Calculo: Temperatura | Ecuacion: Soave-APR |
|inic: Presion de Vapor | R.Mezclado: Clasica   | Metodo Num:Newton U.P.O. |
|                           | F.Error:sumYt3-sumXt2 | |
=====
```

```
=====
| V/F= 1             | Presion= 3452.79844 kPa | T.ideal= 352.665591 *K |
=====
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (*K)
T	3	1.00001772	348.873137
1/T	3	1.00004514	348.873379
T12	3	.999967859	348.872594
1/T12	3	1.00001555	348.874124
T13	3	.999976353	348.872417
1/T13	3	1	348.874464
T14	3	.999971193	348.871445
1/T14	3	1.0000009	348.874777
ln(T)	3	1.00067425	348.873579
1/ln(T)	3	.999689041	348.873723

```
=====
| V/F= .5            | Presion= 3452.79844 kPa | T.ideal= 352.574553 *K |
=====
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (*K)
T	3	.999964264	348.816453
1/T	3	1.00006818	348.816541
T12	3	1.00000259	348.816430
1/T12	3	1.0000125	348.816538
T13	3	.999990011	348.816212
1/T13	3	.999996395	348.816577
T14	3	.999987779	348.81529
1/T14	3	1.00000092	348.816709
ln(T)	3	1.00226941	348.816579
1/ln(T)	3	.999829687	348.816601

```
=====
| V/F= 0            | Presion= 3452.79844 kPa | T.ideal= 352.33994 *K |
=====
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura (*K)
T	3	.999975257	348.736236
1/T	3	1.00002902	348.73622
T12	3	1.00000125	348.736259
1/T12	3	1.00001174	348.737538
T13	3	1.00000106	348.736239
1/T13	3	.999996834	348.736210
T14	3	.999999249	348.736255
1/T14	3	1.00000155	348.736257
ln(T)	3	1.00270377	348.736223
1/ln(T)	3	1.00055133	348.736210

I Sistema: 2	I Calculo: Temperatura	I Ecuacion: Soave-APR
I Inic: Ec. de Michelsen	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I	I F.Error:ln(suav/suah)	I

I V/F= 1 I Presion= 2469.90036 kPa I T.ideal= 343.161157 °K I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	4	.999999986	353.108688
1/T	4	.999999159	353.108716
T12	4	.999992343	353.108676
1/T12	4	.999990597	353.108729
T13	4	.999994243	353.108658
1/T13	4	.999999999	353.108735
T14	4	.999972621	353.108642
1/T14	4	1.00001065	353.108745
ln(T)	4	1.00013963	353.108701
1/ln(T)	4	.999948366	353.108763

I V/F= .5 I Presion= 2469.90036 kPa I T.ideal= 213.1565 °K I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	5	.997783345	214.368409
1/T	5	.997632348	214.36836
T12	5	.997710836	214.368432
1/T12	5	.997657264	214.368346
T13	5	.997675231	214.368444
1/T13	5	.997663742	214.368307
T14	5	.997711693	214.368434
1/T14	5	.997657972	214.368387
ln(T)	5	1.00219768	214.368397
1/ln(T)	5	1.00030718	214.368375

I V/F= 0 I Presion= 2469.90036 kPa I T.ideal= 186.070919 °K I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	2	1.00018677	185.278669
1/T	2	1.00010216	185.202543
T12	2	1.000003758	185.202629
1/T12	2	.999999069	185.2024555
T13	2	1.000004011	185.202682
1/T13	2	.999994297	185.202399
T14	2	1.000004222	185.202683
1/T14	2	1.0000053	185.207084
ln(T)	2	1.00002446	185.200446
1/ln(T)	2	1.00140308	185.201109

- 147 -

I Sistema: 2 I Calculo: Temperatura I Ecuacion: Soave-API  
I Inic: Ec. de Michel森 I R.Mezclado: Clasica I Metodo Num:Newton U.P.O.  
I I F.Error:sumY-sumX I

I V/F= 1 I Presion= 2469.98036 kPa I T.ideal= 345.161156 °K I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	4	.999979727	353.108561
I/T	4	1.00000091	353.108602
T <sub>12</sub>	4	.999967769	353.109543
I/T <sub>12</sub>	4	1.00000285	353.109623
T <sub>13</sub>	4	.999946746	353.108521
I/T <sub>13</sub>	4	1.000000082	353.108639
T <sub>14</sub>	4	.999918697	353.108491
I/T <sub>14</sub>	4	1.00000211	353.108652
ln(T)	4	1.00019425	353.10858
I/ln(T)	4	1.00007084	353.108593

I V/F= .5 I Presion= 2469.98036 kPa I T.ideal= 213.1565 °K I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	5	.997647788	214.968407
I/T	5	.9976783	214.968356
T <sub>12</sub>	5	.997699469	214.968432
I/T <sub>12</sub>	5	.997686205	214.968346
T <sub>13</sub>	5	.997687434	214.96846
I/T <sub>13</sub>	5	.997671779	214.968306
T <sub>14</sub>	5	.997710855	214.968462
I/T <sub>14</sub>	5	.99767203	214.968304
ln(T)	5	.997161768	214.968387
I/ln(T)	5	.998673344	214.968373

I V/F= 0 I Presion= 2469.98036 kPa I T.ideal= 186.078919 °K I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	2	1.00003364	185.284689
I/T	3	.99988191	185.282681
T <sub>12</sub>	2	1.00013053	185.28254
I/T <sub>12</sub>	3	1.00000761	185.282683
T <sub>13</sub>	2	.999993976	185.290552
I/T <sub>13</sub>	3	1.00000924	185.282683
T <sub>14</sub>	2	1.00001323	185.279561
I/T <sub>14</sub>	3	1.00001283	185.282689
ln(T)	2	1.00269967	185.29044
I/ln(T)	2	1.00025003	185.287892

Sistema: 2   Calculo: Temperatura   Ecuacion: Soave-API
Inic: Ec. de Michelsen   R.Mezclado: Clasica   Metodo Num:Newton U.P.O.
F.Error: ln(sumYt3/sumXt2)

V/F= 1   Presion= 2469.98036 kPa   T.ideal= 345.161156 °K
---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	4	.999999062	353.108689
1/T	4	1.00000313	353.108716
T <sub>12</sub>	4	.999992475	353.109677
1/T <sub>12</sub>	4	1.00000365	353.109728
T <sub>13</sub>	4	.999984598	353.108656
1/T <sub>13</sub>	4	.999939898	353.10874
T <sub>14</sub>	4	.999972187	353.108637
1/T <sub>14</sub>	4	1.00000094	353.108748
ln(T)	4	1.00010164	353.108701
1/ln(T)	4	1.000025042	353.108709

V/F= .5   Presion= 2469.98036 kPa   T.ideal= 213.1565 °K
--

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	5	.99717565	214.968415
1/T	5	.997662709	214.968372
T <sub>12</sub>	5	.997676828	214.968436
1/T <sub>12</sub>	5	.997635044	214.968194
T <sub>13</sub>	5	.997665909	214.968452
1/T <sub>13</sub>	5	.997645834	214.968389
T <sub>14</sub>	5	.997703423	214.968489
1/T <sub>14</sub>	5	.997651755	214.968297
ln(T)	5	.998862172	214.968392
1/ln(T)	5	.997635676	214.968379

V/F= 8   Presion= 2469.98036 kPa   T.ideal= 185.078919 °K
---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	2	1.00019677	185.270669
1/T	2	1.00010216	185.292545
T <sub>12</sub>	3	1.00010899	185.282681
1/T <sub>12</sub>	2	.999999009	185.284555
T <sub>13</sub>	3	1.000000411	185.282682
1/T <sub>13</sub>	2	.9999980297	185.286389
T <sub>14</sub>	3	1.000000222	185.281693
1/T <sub>14</sub>	2	1.00000055	185.287684
ln(T)	2	1.000502448	185.280446
1/ln(T)	2	1.00140388	185.201109

Sistema: 2	Calculo: Temperatura	Ecuacion: Soave-RP1
I Inic: Ec. de Michaelis	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error: sumY13-sumX12		I

I V/F= 1 I Presion= 2469.90036 kPa I T.ideal= 343.161156 °K I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	4	.999960048	353.109341
1/T	4	1.000011156	353.108426
T12	4	.999939129	353.109303
1/T12	4	1.00000249	353.109445
T13	4	.999903257	353.108227
1/T13	4	1.000000859	353.109485
T14	4	.999957392	353.108917
1/T14	4	.999999371	353.109513
ln(T)	4	1.00001743	353.108375
1/ln(T)	4	1.00030012	353.108487

I V/F= .5 I Presion= 2469.90036 kPa I T.ideal= 213.1563 °K I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	5	.997801744	214.968384
1/T	5	.997726035	214.96834
T12	5	.997744081	214.968419
1/T12	5	.997765751	214.968323
T13	5	.997716766	214.96843
1/T13	5	.997700164	214.968383
T14	5	.997736786	214.969437
1/T14	5	.997710135	214.968277
ln(T)	5	1.00035998	214.968367
1/ln(T)	5	.998829594	214.968353

I V/F= 0 I Presion= 2469.90036 kPa I T.ideal= 186.870919 °K I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	1.00041081	185.292687
1/T	3	1.00000592	185.292693
T12	3	1.00005115	185.292684
1/T12	3	.999962343	185.292697
T13	3	1.00002321	185.292695
1/T13	3	1.00000469	185.292699
T14	3	.999993252	185.292681
1/T14	3	1.00000624	185.292719
ln(T)	3	1.00076461	185.292659
1/ln(T)	3	1.00174698	185.292689

Sistema: 2	Calculo: Temperatura	Ecuacion: Soave-API
Iinic: Presion de Vapor	I.R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Neuton U.P.O.
I	F.Error:ln(sumV/sumX)	I

IV/F= 1      I Presion= 2469.90036 kPa    IT.ideal= 368.270299 °K    I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	4	.999983918	353.188761
1/T	4	1.00000109	353.188754
T12	4	.999936981	353.188721
1/T12	4	.999999275	353.188724
T13	4	.999032126	353.188626
1/T13	4	.999999893	353.188661
T14	4	.999632731	353.188563
1/T14	4	1.00000064	353.188661
ln(T)	4	1.000044885	353.188763
1/ln(T)	4	1.00006107	353.18877

IV/F= .5      I Presion= 2469.90036 kPa    IT.ideal= 220.704357 °K    I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	5	.998258482	214.980275
1/T	5	.998217246	214.979827
T12	6	.998266713	214.978671
1/T12	5	.998245846	214.979613
T13	4	.998474467	214.973831
1/T13	5	.998390295	214.979339
T14	4	.998581185	214.977781
1/T14	5	.998375585	214.979204
ln(T)	2	1.00005785	214.727235
1/ln(T)	5	.998317252	214.979967

IV/F= 0      I Presion= 2469.90036 kPa    IT.ideal= 190.268641 °K    I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	1.0000072	195.292541
1/T	3	1.0000005	195.282773
T12	3	.999998816	195.292207
1/T12	3	1.00000072	195.292772
T13	3	.999997162	195.291643
1/T13	3	.999999913	195.282773
T14	3	.999971675	195.280696
1/T14	3	.999999385	195.282915
ln(T)	3	.999999713	195.282792
1/ln(T)	3	1.00000371	195.282751

Sistemas: 2	Calculo: Temperatura	Ecuacion: Soave-Redlich-Kwong
Inic: Presion de Vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:sumY-sumX	

IV/F= 1 | Presion= 2469.90036 kPa | T.ideal= 368.270299 °K |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	4	.999804226	353.107471
1/T	4	.999995651	353.188359
T12	4	.99953967	353.106516
1/T12	4	.999999962	353.188523
T13	4	.999889484	353.184657
1/T13	4	.999983864	353.188645
T14	5	.998093738	353.188788
1/T14	4	.999965343	353.188719
ln(T)	4	.999969767	353.187983
1/ln(T)	4	.999981639	353.188173

IV/F= .5 | Presion= 2469.90036 kPa | T.ideal= 220.784357 °K |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	5	.998254393	214.980287
1/T	5	.998214432	214.979836
T12	6	.998271226	214.979665
1/T12	5	.998244968	214.97962
T13	4	.998476306	214.973832
1/T13	5	.998299769	214.979481
T14	4	.998583127	214.978837
1/T14	5	.99837258	214.97921
ln(T)	2	1.00017615	214.723649
1/ln(T)	5	.998345394	214.979978

IV/F= 0 | Presion= 2459.90036 kPa | T.ideal= 199.268641 °K |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	1.00001053	195.28276
1/T	3	.999992047	195.283008
T12	3	1.00000295	195.282757
1/T12	3	.9999999384	195.28332
T13	3	.9999999999	195.282724
1/T13	3	.999999494	195.283937
T14	3	.99999592	195.282683
1/T14	3	.999996775	195.284355
ln(T)	3	1.00004743	195.292947
1/ln(T)	3	1.00006069	195.282965

I Sistema: 2	I Calculo: Temperatura	I Ecucion: Soave-API
I Inic: Presion de Vapor	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Neuton U.P.O.
I F.Error:ln(sumYt3/sumXt2)I		

I V/F= 1	I Presion= 2469.90036 kPa	I T.ideal= 368.270299 °K
----------	---------------------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(*K)
T	4	.99990171	353.108763
1/T	4	1.00000499	353.108753
T12	4	.999933082	353.108723
1/T12	4	1.00000074	353.108721
T13	4	.999833195	353.108654
1/T13	4	.999998891	353.108674
T14	4	.999637111	353.108552
1/T14	4	1.00000094	353.108596
ln(T)	4	1.00007136	353.108766
1/ln(T)	4	1.00009688	353.108771

I V/F= .5	I Presion= 2469.90036 kPa	I T.ideal= 228.784357 °K
-----------	---------------------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(*K)
T	5	.998242597	214.980329
1/T	5	.998212598	214.979879
T12	4	.998483982	214.971075
1/T12	5	.998235896	214.979673
T13	4	.998480234	214.974664
1/T13	5	.998288223	214.97945
T14	4	.998590763	214.97816
1/T14	5	.998360916	214.979233
ln(T)	2	1.00012193	214.709327
1/ln(T)	5	.998106253	214.980016

I V/F= 0	I Presion= 2469.90036 kPa	I T.ideal= 193.269641 °K
----------	---------------------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(*K)
T	3	1.00001139	193.282498
1/T	3	1.00000044	193.282787
T12	3	.999997323	193.282252
1/T12	3	.999999266	193.28277
T13	3	.999986913	193.281272
1/T13	3	1.00000019	193.282757
T14	3	.999971569	193.28072
1/T14	3	.999993279	193.292996
ln(T)	3	.999949292	193.2827
1/ln(T)	3	1.00022499	193.282754

Sistema: 2	Calculo: Temperatura	Ecuacion: Soave-API
I Inic: Presion de VAPOR	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error:sumYt3-sumXt2 I		

I V/F= 1	I Presion= 2469.90036 kPa	I T.ideal= 368.278299 °K
----------	---------------------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	5	.999286694	353.108579
1/T	5	.999954275	353.108659
T12	5	.998581734	353.10847
1/T12	5	1.00000982	353.108718
T13	5	.997281734	353.108255
1/T13	4	.999951932	353.105422
T14	5	.995518948	353.107976
1/T14	4	.999858555	353.106709
ln(T)	5	.999782375	353.108646
1/ln(T)	5	.999826752	353.108669

I V/F= .5	I Presion= 2469.90036 kPa	I T.ideal= 220.704357 °K
-----------	---------------------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	2	1.00000314	214.71356
1/T	5	.998246232	214.979639
T12	5	.998300832	214.980322
1/T12	5	.998282201	214.97943
T13	4	.998455151	214.971207
1/T13	5	.998351887	214.979184
T14	4	.998549474	214.974956
1/T14	5	.998435602	214.978992
ln(T)	5	.998457942	214.979855
1/ln(T)	5	.999416599	214.979778

I V/F= 0	I Presion= 2469.30036 kPa	I T.ideal= 190.268641 °K
----------	---------------------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	1.00000362	193.287527
1/T	4	1.00000501	193.282659
T12	3	.999969882	193.285878
1/T12	4	1.00000029	193.282668
T13	3	.999984683	193.284698
1/T13	4	.999995466	193.282638
T14	3	.999984804	193.284698
1/T14	4	.99998496	193.282697
ln(T)	4	1.00027251	193.282685
1/ln(T)	4	1.00009847	193.282685

- 154 -

Sistema: 3	Calculo: Temperatura	Ecuacion: Soave-AP
Inic: Ec. de Michelsen	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
F.Error:ln(sumY/sumX)		

V/F= 1 Presion= 3039.75003 kPa T.ideal= 259.64898 °K

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	4	.999984005	259.638042
1/T	4	.99999184	259.63821
T <sub>12</sub>	4	.99995794	259.637955
1/T <sub>12</sub>	4	.99997711	259.638281
T <sub>13</sub>	4	.999917344	259.63786
1/T <sub>13</sub>	4	.99996728	259.63835
T <sub>14</sub>	4	.99964456	259.637768
1/T <sub>14</sub>	4	.99994727	259.638407
ln(T)	4	1.00007992	259.638126
1/ln(T)	4	1.00014186	259.638168

V/F= .5 Presion= 3039.75003 kPa T.ideal= 179.108295 °K

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	.999754231	179.997479
1/T	3	.999977079	179.997541
T <sub>12</sub>	3	.999772265	179.997418
1/T <sub>12</sub>	3	.999722187	179.99753
T <sub>13</sub>	3	.999694831	179.997335
1/T <sub>13</sub>	3	.999711302	179.99759
T <sub>14</sub>	3	.999691359	179.997403
1/T <sub>14</sub>	3	.999710163	179.997728
ln(T)	3	1.00232314	179.9975
1/ln(T)	3	1.00009869	179.997511

V/F= 0 Presion= 3039.75003 kPa T.ideal= 176.511578 °K

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	2	1.00007302	177.849488
1/T	3	1.00000654	177.852497
T <sub>12</sub>	3	1.00002666	177.852496
1/T <sub>12</sub>	3	1.00001267	177.8525
T <sub>13</sub>	3	.999995332	177.852497
1/T <sub>13</sub>	3	1.00000211	177.852501
T <sub>14</sub>	3	1.00000342	177.852501
1/T <sub>14</sub>	3	.999999324	177.852503
ln(T)	2	1.00133364	177.854641
1/ln(T)	2	.99947069	177.856637

---

Sistema: 3	Calculo: Temperatura	Ecuacion: Soave-APR
I Inic: Ec. de Michel sen	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Neuton U.P.O.
I F.Error:sumY-sumX		

---



---

IV/F: 1	I Presion: 3039.75003 kPa	I T.ideal= 259.848889 °K
---------	---------------------------	--------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	4	.999882641	259.636775
1/T	4	.99997955	259.637099
T <sub>12</sub>	4	.999979304	259.636566
1/T <sub>12</sub>	4	.99999376	259.637239
T <sub>13</sub>	4	.999984485	259.636336
1/T <sub>13</sub>	4	.999999866	259.637393
T <sub>14</sub>	4	.999544994	259.636086
1/T <sub>14</sub>	4	.999999586	259.637492
ln(T)	4	1.00005392	259.636913
1/ln(T)	4	1.00005770	259.637018

---



---

IV/F: .5	I Presion: 3039.75003 kPa	I T.ideal= 179.108296 °K
----------	---------------------------	--------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	.999792734	179.997494
1/T	3	.999921691	179.997575
T <sub>12</sub>	3	.999715625	179.997346
1/T <sub>12</sub>	3	.99968512	179.99754
T <sub>13</sub>	3	.999694485	179.997454
1/T <sub>13</sub>	3	.999744915	179.997568
T <sub>14</sub>	3	.999683399	179.997423
1/T <sub>14</sub>	3	.999706391	179.997582
ln(T)	3	1.00022948	179.997501
1/ln(T)	3	1.00184262	179.99752

---



---

IV/F: 0	I Presion: 3039.75003 kPa	I T.ideal= 176.511578 °K
---------	---------------------------	--------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	1.0000627	177.852496
1/T	3	1.0000495	177.852501
T <sub>12</sub>	2	1.00001063	177.859857
1/T <sub>12</sub>	3	1.00000229	177.852491
T <sub>13</sub>	2	1.00000485	177.854647
1/T <sub>13</sub>	3	1.00000532	177.85249
T <sub>14</sub>	2	1.0000007	177.849656
1/T <sub>14</sub>	3	.9999598993	177.85251
ln(T)	3	1.00067223	177.852497
1/ln(T)	3	1.00085182	177.852498

- 156 -

Sistema: 3      | Calculo: Temperatura | Ecuacion: Soave-API  
| Inic: Ec. de Michelsen | R.Mezclado: Clasica | Metodo Num:Newton U.P.O.  
| F.Error:ln(sumYf3/sumXf2)|

| V/F= 1      | Presion= 3039.75003 kPa | T.ideal= 258.840897 °K |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	4	.999980385	259.638048
1/T	4	.99997099	259.638214
T12	4	.999955427	259.637955
1/T12	4	.999957915	259.63829
T13	4	.999918099	259.637852
1/T13	4	.999996834	259.638352
T14	4	.999861928	259.637759
1/T14	4	.999994397	259.638396
ln(T)	4	1.00017325	259.638125
1/ln(T)	4	1.00013043	259.638168

| V/F= .5      | Presion= 3039.75003 kPa | T.ideal= 179.108296 °K |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	.999704889	179.997467
1/T	3	.999891558	179.997528
T12	3	.999757889	179.997436
1/T12	3	.999676062	179.997539
T13	3	.999672965	179.997418
1/T13	3	.999728421	179.997522
T14	3	.999682973	179.997387
1/T14	3	.999705446	179.99761
ln(T)	3	1.000069792	179.997498
1/ln(T)	3	1.00006006	179.997511

| V/F= 0      | Presion= 3039.75003 kPa | T.ideal= 176.511578 °K |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	2	1.00007302	177.849488
1/T	3	1.00000654	177.852497
T12	3	1.00002666	177.852436
1/T12	3	1.00001267	177.8525
T13	3	.999995332	177.852497
1/T13	3	1.00000211	177.852501
T14	3	1.00000342	177.852501
1/T14	3	.999999324	177.852503
ln(T)	2	1.00133364	177.854641
1/ln(T)	2	.99947069	177.856637

Sistemas: 3   Calculo: Temperatura   Ecuacion: Soave-Redlich-Kopp
Inic: Ec. de Michel sen   R.Mezclado: Clasica   Metodo Num: Newton U.P.O.
F.Error: sumY13-sumX12

IV/F= 1 | Presion= 3039.75003 kPa | T.ideal= 259.638889 °K |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	5	.999802414	259.638361
1/T	5	.999958418	259.638383
T12	5	.999678204	259.638351
1/T12	5	.999993014	259.638393
T13	5	.999517316	259.638339
1/T13	5	.999999863	259.638399
T14	5	.999321546	259.638321
1/T14	5	.999987941	259.638409
ln(T)	5	1.00001395	259.638371
1/ln(T)	5	.999959929	259.638379

IV/F= .5 | Presion= 3039.75003 kPa | T.ideal= 179.108296 °K |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	1.0001913	179.997513
1/T	3	.999470731	179.997395
T12	3	.999740577	179.997462
1/T12	3	.999658644	179.997625
T13	3	.999701288	179.997399
1/T13	3	.999708378	179.997622
T14	3	.999692898	179.997447
1/T14	3	.999685804	179.997505
ln(T)	3	1.00068871	179.997532
1/ln(T)	3	.995493691	179.997552

IV/F= 0 | Presion= 3039.75003 kPa | T.ideal= 177.511576 °K |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	1.00007802	177.852511
1/T	3	.999982881	177.852544
T12	3	1.0000253	177.852511
1/T12	3	.99999368	177.852556
T13	3	.999998037	177.852592
1/T13	3	1.00000188	177.852576
T14	3	1.00000521	177.852498
1/T14	3	1.00000275	177.852615
ln(T)	3	1.00036846	177.852529
1/ln(T)	3	1.00171752	177.852534

Sistema: 3	Calculo: Temperatura	Ecuacion: Soave-Redlich-Kwong
Inic: Ec. de Michaelis   R.Mezclado: Clasica		Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:ln(sumY/sumX)	

IV/F<sub>n</sub> 1 Presion= 6079.50007 kPa | T.ideal= 272.906894 °K |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	4	.999975388	256.229769
1/T	4	.999947804	256.226812
T <sub>12</sub>	4	.999999866	256.230645
1/T <sub>12</sub>	5	.999967275	256.230706
T <sub>13</sub>	4	.999942711	256.230863
1/T <sub>13</sub>	5	.999994518	256.230579
T <sub>14</sub>	4	.999674835	256.230272
1/T <sub>14</sub>	5	.9999695	256.230427
ln(T)	4	.99993199	256.228425
1/ln(T)	4	.999966624	256.227928

IV/F<sub>n</sub> .5 Presion= 6079.50007 kPa | T.ideal= 203.568893 °K |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	.387226755	203.608405
1/T	3	.38662298	203.60834
T <sub>12</sub>	3	.388862829	203.607114
1/T <sub>12</sub>	3	.38785421	203.607168
T <sub>13</sub>	3	.393132513	203.603568
1/T <sub>13</sub>	3	.384516678	203.609992
T <sub>14</sub>	3	.391503645	203.605292
1/T <sub>14</sub>	3	.38650061	203.6135
ln(T)	3	.391224981	203.605815
1/ln(T)	3	.387227754	203.611138

IV/F<sub>n</sub> 0 Presion= 6079.50007 kPa | T.ideal= 200.816902 °K |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	4	.470143972	206.581652
1/T	4	.445928922	206.765995
T <sub>12</sub>	4	.461656529	206.545222
1/T <sub>12</sub>	4	.438268491	207.096346
T <sub>13</sub>	4	.471696785	206.512627
1/T <sub>13</sub>	4	.416065495	207.606717
T <sub>14</sub>	4	.406757676	206.943866
1/T <sub>14</sub>	4	.401875929	203.37647
ln(T)	4	.46000675	206.703513
1/ln(T)	4	.456629473	206.755471

Sistema: 3	Calculo: Temperatura	Ecuacion: Soave-Redlich-Kwong
I Inic: Ec. de Michelsen	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error:sunV-sunX		

IV/F= 1	Presion= 6079.50007 kPa	T.ideal= 272.908218 °K
---------	-------------------------	------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	4	.999993484	256.228195
1/T	4	.999744141	256.2308
T12	5	.999915746	256.230334
1/T12	4	.999637591	256.230641
T13	5	.999410525	256.229671
1/T13	4	.999608958	256.230066
T14	5	.998155813	256.228496
1/T14	4	.999665516	256.22991
ln(T)	4	.999908733	256.230065
1/ln(T)	4	.999841419	256.23052

IV/F= .5	Presion= 6079.50007 kPa	T.ideal= 283.562803 °K
----------	-------------------------	------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	.384722092	283.610748
1/T	3	.385935309	283.60906
T12	3	.390243411	283.605822
1/T12	3	.38472465	283.610136
T13	3	.388752074	283.607689
1/T13	3	.384768456	283.60978
T14	3	.397586892	283.593601
1/T14	3	.372664067	283.621127
ln(T)	3	.3858007746	283.605902
1/ln(T)	3	.385244623	283.611181

IV/F= 0	Presion= 6079.50007 kPa	T.ideal= 286.816902 °K
---------	-------------------------	------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	4	.461161679	286.641874
1/T	4	.441909953	286.995249
T12	4	.473578977	286.624533
1/T12	4	.425221915	287.412454
T13	4	.483464111	286.495
1/T13	4	.415164461	287.761192
T14	4	.478999956	286.902323
1/T14	5	.410949681	287.584556
ln(T)	4	.45381364	286.765842
1/ln(T)	4	.449689166	286.843652

Sistema: 3	Calculo: Temperatura	Ecuacion: Soave-Redl
I Inic: Ec. de Michelson	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I	I F.Error:ln(sumYt3/sumXt2)	I

IV/F= 1	I Presion= 6079.50007 kPa	I T.ideal= 272.908218 °K
---------	---------------------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	4	.999977952	256.229774
1/T	4	.99998298	256.226822
T12	4	.99999776	256.230589
1/T12	5	.999967044	256.230706
T13	4	.999942526	256.230762
1/T13	5	.999994206	256.230576
T14	4	.999672744	256.230266
1/T14	5	.999989483	256.230428
ln(T)	4	.999978465	256.228423
1/ln(T)	4	.999981808	256.227927

IV/F= .5	I Presion= 6079.50007 kPa	I T.ideal= 203.568003 °K
----------	---------------------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	.398468004	203.605506
1/T	3	.388976265	203.6085959
T12	3	.392634539	203.603568
1/T12	3	.387531018	203.607492
T13	3	.379893945	203.616211
1/T13	3	.385346208	203.60232
T14	3	.388852359	203.607801
1/T14	3	.383944442	203.61019
ln(T)	3	.385787081	203.605505
1/ln(T)	3	.392013372	203.610624

IV/F= 0	I Presion= 6079.50007 kPa	I T.ideal= 208.816902 °K
---------	---------------------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	4	.469979237	206.655068
1/T	4	.445283391	206.977371
T12	4	.476307658	206.619201
1/T12	4	.43602601	207.10494
T13	4	.482966892	206.601489
1/T13	4	.420562496	207.55841
T14	4	.484493324	206.30908
1/T14	4	.388275333	208.496759
ln(T)	4	.468865553	206.695322
1/ln(T)	4	.456171547	206.758859

Sistemas: 3	Calculo: Temperatura	Ecuacion: Soave-Redlich-Kwong
I Inic: Ec. de Michelsen	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error:sumYt3-sumXt2		

I V/F= 1	I Presion= 6079.50007 kPa	I T.ideal= 272.903217 °K
----------	---------------------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	5	.999999189	256.227346
1/T	5	.999338286	256.239608
T12	6	.999600034	256.230568
1/T12	5	.998800411	256.230386
T13	6	.998212027	256.230245
1/T13	4	.998568945	256.229264
T14	6	.995399998	256.229693
1/T14	4	.998298428	256.229377
ln(T)	3	.999802948	256.228858
1/ln(T)	3	.999678369	256.229257

I V/F= .5	I Presion= 6079.50007 kPa	I T.ideal= 263.569003 °K
-----------	---------------------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	3	.380271753	263.607416
1/T	3	.384237936	263.610459
T12	3	.391929534	263.604148
1/T12	3	.384694348	263.610134
T13	3	.392656933	263.603941
1/T13	3	.388275359	263.606353
T14	3	.391885599	263.604057
1/T14	3	.379922148	263.613581
ln(T)	3	.389161732	263.606134
1/ln(T)	3	.384709339	263.610803

I V/F= 0	I Presion= 6079.50007 kPa	I T.ideal= 268.816902 °K
----------	---------------------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Temperatura(°K)
T	4	.451710942	266.805097
1/T	4	.4204798	267.271392
T12	4	.462543648	266.637236
1/T12	4	.412206184	267.301616
T13	4	.463325428	267.014841
1/T13	4	.365037915	266.203556
T14	4	.476736455	266.712664
1/T14	3	.421010561	267.988230
ln(T)	4	.441253985	266.958678
1/ln(T)	4	.435997671	267.850472

D.2 PRUEBAS DE LINEALIZACIÓN EN CÁLCULOS DE PRESIÓN.

---

Sistena: 1	Calculo: Presion	Ecuacion: Soave-Redlich-Kwong
Inic: Ec. de Michelsen	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num: Newton U.P.O.
	F.Error:ln(sumY/sumX)	

---



---

V/F= 1	Temp= 300 °K	P.Ideal= 1419.4562 kPa
--------	--------------	------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.999797099	1208.40955
1/P	3	.999996793	1208.4088
P12	4	.997983933	1208.39249
1/P12	4	.999841261	1208.39189
P13	4	.990510459	1208.38004
1/P13	4	.999809323	1208.39382
sqr(P)	3	.999974288	1209.33536
1/sqr(P)	3	1.0000002	1208.37352
ln(P)	3	1.000000835	1208.50076
1/ln(P)	3	.999997517	1208.20679

---



---

V/F= .5	Temp= 300 °K	P.Ideal= 1422.6737 kPa
---------	--------------	------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.999794542	1211.10118
1/P	3	.999997043	1211.09129
P12	4	.997961629	1211.08886
1/P12	4	.999841651	1211.09306
P13	4	.990564899	1210.96293
1/P13	4	.9991805	1211.08779
sqr(P)	3	.999973571	1211.02182
1/sqr(P)	3	1.00000019	1211.06498
ln(P)	3	1.00001254	1211.19182
1/ln(P)	3	1.00001437	1210.97766

---



---

V/F= 0	Temp= 300 °K	P.Ideal= 1430.35449 kPa
--------	--------------	-------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.99979199	1216.72999
1/P	3	.999997	1216.71723
P12	4	.997961251	1216.72197
1/P12	4	.99980167	1216.71112
P13	4	.990428425	1216.69779
1/P13	4	.9991807	1216.7133
sqr(P)	3	.9999736	1216.64662
1/sqr(P)	3	1.00000001	1216.69336
ln(P)	3	1.00000449	1216.8204
1/ln(P)	3	1.00000942	1216.60596

Sistema:	Calculo: Presion	Ecuacion: Soave-RP1
Inic: Ec. de Michelsen	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
F.Error:sumV-sumX		

V/F= 1	Tend= 300 °K	P.ideal= 1419.45622 kPa
--------	--------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999962298	1298.38081
1/P	4	.999993181	1298.39555
P <sub>T2</sub>	4	.9999939591	1298.40734
1/P <sub>T2</sub>	4	.9999959674	1298.39136
P <sub>T3</sub>	4	.994326294	1298.39194
1/P <sub>T3</sub>	4	.990711516	1298.40911
sqr(P)	3	.999994951	1298.42115
1/sqr(P)	3	1.000000033	1298.42194
ln(P)	3	1.000000346	1298.51968
1/ln(P)	3	1.000000642	1298.30165

V/F= .5	Tend= 300 °K	P.ideal= 1422.6737 kPa
---------	--------------	------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.999786307	1211.10119
1/P	3	.99997395	1211.08936
P <sub>T2</sub>	4	.99716614	1211.09733
1/P <sub>T2</sub>	4	.99942862	1211.09296
P <sub>T3</sub>	4	.99835839	1211.99877
1/P <sub>T3</sub>	4	.999112362	1211.00571
sqr(P)	3	.999972231	1211.01513
1/sqr(P)	3	1.000000051	1211.05485
ln(P)	3	1.00001004	1211.19134
1/ln(P)	3	1.00001072	1210.97735

V/F= 0	Tend= 300 °K	P.ideal= 1430.35448 kPa
--------	--------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.999495231	1216.72771
1/P	2	.999995674	1216.78411
P <sub>T2</sub>	4	.996369515	1216.67434
1/P <sub>T2</sub>	3	.999956127	1216.74587
P <sub>T3</sub>	5	.982499921	1216.7219
1/P <sub>T3</sub>	4	.999475562	1216.71333
sqr(P)	4	.999986382	1216.74154
1/sqr(P)	3	1.000000026	1216.65959
ln(P)	3	.999997126	1216.64514
1/ln(P)	4	.999994999	1216.60659

```

Sistema: I      Calculo: Presion      Ecuacion: Soave-APL
Inic: Ec. de Michelsen   IR.Mezclado: Clasica   Metodo Num:Neuton U.P.O.
I F.Error:ln(sumYt3/sumXt2)

```

```

IV/F= 1          Temp= 308 °K          P.ideal= 1419.43622 kPa

```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.999796065	1209.40976
1/P	3	.999997134	1209.40636
Pt2	4	.997940408	1209.39781
1/Pt2	4	.999839532	1209.3916
Pt3	4	.990528196	1209.32098
1/Pt3	4	.999094191	1209.39492
sqr(P)	3	.999974236	1209.32703
1/sqr(P)	3	1.00000039	1209.37331
ln(P)	3	1.00008749	1209.50087
1/ln(P)	3	1.00001212	1209.28645

```

IV/F= .5          Temp= 308 °K          P.ideal= 1422.6737 kPa

```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.999817029	1211.10107
1/P	3	.999996242	1211.1013
Pt2	4	.998091311	1211.09336
1/Pt2	4	.999929437	1211.03303
Pt3	4	.998922349	1210.99772
1/Pt3	4	.999052217	1211.00656
sqr(P)	3	.999978383	1211.04096
1/sqr(P)	3	1.00000087	1211.05535
ln(P)	3	1.0000046	1211.19534
1/ln(P)	3	.999994727	1210.97849

```

IV/F= 0          Temp= 300 °K          P.ideal= 1430.35449 kPa

```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.999759681	1216.72927
1/P	3	.999997042	1216.71715
Pt2	4	.997265573	1216.71523
1/Pt2	4	.995339382	1216.71159
Pt3	4	.990355012	1216.61749
1/Pt3	4	.999035268	1216.71372
sqr(P)	3	.99997357	1216.6433
1/sqr(P)	3	1.00000022	1216.65346
ln(P)	3	1.00000392	1216.5206
1/ln(P)	3	1.00000581	1216.60543

I Sistema: 1	I Calculo: Presion	I Ecuacion: Soave-APL
I Inic: Ec. de Michaelson	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I I F.Error: sumVf3-sumXT2	I	I

I V/F= 1 I Temp= 300 °K I P.ideal= 1419.45729 kPa I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	2	.999999906	1209.46742
1/P	4	.999965058	1208.38662
P12	3	.99977811	1208.29785
1/P12	4	.999559231	1208.39545
P13	4	.997106471	1208.39988
1/P13	4	.998366657	1208.41597
sqr(P)	3	.999993782	1208.43657
1/sqr(P)	4	.999999807	1208.37347
ln(P)	4	1.00000331	1208.56792
1/ln(P)	3	1.00000566	1208.46674

I V/F= .5 I Temp= 300 °K I P.ideal= 1422.6737 kPa I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.99969649	1211.18101
1/P	3	.999999605	1211.07956
P12	4	.997347807	1211.00223
1/P12	3	.999994664	1211.23154
P13	5	.996241945	1211.09291
1/P13	4	.999262582	1211.00546
sqr(P)	4	.999948279	1211.1133
1/sqr(P)	3	.999999719	1211.06447
ln(P)	3	1.00000265	1211.15797
1/ln(P)	3	1.00001194	1210.96419

I V/F= 0 I Temp= 300 °K I P.ideal= 1430.35449 kPa I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.999517109	1216.6271
1/P	4	.999955796	1216.70523
P12	5	.99934290	1216.72272
1/P12	3	.99963323	1216.67783
P13	5	.967727430	1216.62991
1/P13	3	.999901362	1216.7142
sqr(P)	4	.999568757	1216.71417
1/sqr(P)	4	.999997070	1216.69169
ln(P)	4	.999968236	1216.62223
1/ln(P)	4	.999993269	1216.60269

I Sistemas: 1	I Calculo: Presion	I Ecuacion: Soave-AP1
Iinic: Presion de vapor	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error:ln(sumY/sumX)	I	I

I V/F= 1	I Temp= 300 °K	I P.ideal= 1188.56971 kPa I
----------	----------------	-----------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999993974	1200.40995
1/P	2	1.00001422	1200.50274
P12	3	.999999212	1200.40379
1/P12	3	.999999997	1200.39158
P13	3	.999999593	1200.40099
1/P13	3	1.00000132	1200.39349
gtr(P)	2	1.000003964	1200.29019
1/gtr(P)	2	.999992086	1200.39097
ln(P)	2	1.00017783	1200.45111
1/ln(P)	2	.999911462	1200.26361

I V/F= .5	I Temp= 300 °K	I P.ideal= 1191.64713 kPa I
-----------	----------------	-----------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	1.00000458	1211.10121
1/P	2	.999997116	1211.17652
P12	3	1.00000168	1211.09466
1/P12	3	.999997682	1211.09301
P13	3	.999998153	1211.09357
1/P13	3	1.00000019	1211.08978
gtr(P)	2	1.000000834	1210.97343
1/gtr(P)	2	.999999875	1211.08629
ln(P)	2	1.00102579	1211.14296
1/ln(P)	2	.999737632	1210.95593

I V/F= 0	I Temp= 300 °K	I P.ideal= 1199.37693 kPa I
----------	----------------	-----------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	2	.999991629	1216.56583
1/P	2	1.00000117	1216.77949
P12	3	.999998339	1216.72332
1/P12	3	.999993214	1216.71169
P13	3	.999994643	1216.72061
1/P13	3	1.00000112	1216.71367
gtr(P)	2	.999997511	1216.63647
1/gtr(P)	2	.999998536	1216.70374
ln(P)	2	1.00073690	1216.76395
1/ln(P)	2	1.00073982	1216.58047

Sistema: 1	Calculo: Presion	Ecuacion: Soave-RP1
I Inic: Presion de vapor	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error:sumY-sumX	I	I

I V/F= 1	I Temp= 300 °K	I P.ideal= 1189.56965 kPa
----------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	2	1.00000634	1200.32404
1/P	3	1.00000741	1200.3956
P12	3	1.000002	1200.40408
1/P12	3	1.00000269	1200.39178
P13	3	1.00000002	1200.40246
1/P13	3	.999999022	1200.39423
sqrt(P)	2	.999999667	1200.40983
1/sqr(P)	2	1.000003857	1200.52494
ln(P)	3	1.00000451	1200.50777
1/ln(P)	2	.999941182	1200.39202

I V/F= .5	I Temp= 300 °K	I P.ideal= 1191.64713 kPa
-----------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	1.0000055	1211.10114
1/P	2	.999999011	1211.17718
P12	3	1.00000191	1211.09448
1/P12	3	.999994490	1211.09333
P13	3	1.00000021	1211.09292
1/P13	3	1.00000004	1211.08484
sqrt(P)	2	1.00004334	1210.97232
1/sqr(P)	2	1.000005589	1211.08786
ln(P)	2	1.00164316	1211.14303
1/ln(P)	2	1.00013569	1210.95616

I V/F= 0	I Temp= 300 °K	I P.ideal= 1199.37683 kPa
----------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	1.00000219	1216.7295
1/P	2	1.00000506	1216.68162
P12	3	.999996434	1216.72375
1/P12	2	1.00000043	1216.79573
P13	3	.999999082	1216.72176
1/P13	3	1.000000066	1216.71374
sqrt(P)	3	1.00021744	1216.7419
1/sqr(P)	2	.999997849	1216.69758
ln(P)	2	1.0003187	1216.69343
1/ln(P)	3	1.00000504	1216.69659

```

I Sistemas: 1           I Calculo: Presion      I Ecuacion: Soave-Redlich-Kwong
I Inic: Presion de vapor (R.Mezclado: Clasica)   I Metodo Num: Newton U.P.D.
I                                         I F.Error: ln(sumYf3/sumXf2)

```

```

I V/F= 1          I Temp= 300 °K      I P.ideal= 1168.56965 kPa

```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999995469	1208.40972
1/P	2	1.00001043	1208.40981
P12	3	1.00000056	1208.40348
1/P12	3	.999998126	1208.39155
P13	3	.999999028	1208.39978
1/P13	3	1.00000004	1208.39391
sqr(P)	2	1.00002652	1208.29137
1/sqr(P)	2	1.00001971	1208.39689
ln(P)	2	1.00110082	1208.44981
1/ln(P)	2	1.00078195	1208.26533

```

I V/F= .5          I Temp= 300 °K      I P.ideal= 1191.64713 kPa

```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	1.00000607	1211.1013
1/P	2	1.00000028	1211.18895
P12	3	.999999911	1211.09504
1/P12	3	.99999853	1211.08312
P13	3	.999999614	1211.09139
1/P13	3	1.00000258	1211.09503
sqr(P)	2	.999999753	1210.99547
1/sqr(P)	2	1.00005456	1211.09951
ln(P)	2	1.0003793	1211.15509
1/ln(P)	2	1.00090453	1210.96811

```

I V/F= 0          I Temp= 300 °K      I P.ideal= 1199.37603 kPa

```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	2	.999999852	1216.55167
1/P	2	1.00000426	1216.72806
P12	3	.999999918	1216.722342
1/P12	3	.999995074	1216.71146
P13	3	.999995343	1216.7213
1/P13	3	1.00000404	1216.71339
sqr(P)	2	.999993223	1216.63232
1/sqr(P)	2	1.00007864	1216.70788
ln(P)	2	1.00097803	1216.79316
1/ln(P)	2	.999430547	1216.59881

I Sistemat: I	I Calculo: Presion	I Ecuacion: Soave-API
I Inic: Presion de vapor	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Neuton U.P.O.
I	I F.Error:sumYt3-sumXt2	I

I V/F= 1	I Temp= 300 °K	I P.ideal= 1188.56965 kPa
----------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	2	1.0000034	1200.45014
1/P	3	1.00001078	1200.38593
Pt2	2	1.00000171	1200.26001
1/Pt2	3	.99997277	1200.39167
Pt3	3	.999998586	1200.48175
1/Pt3	3	1.00000103	1200.39435
sqr(P)	2	1.00004324	1200.53693
1/sqr(P)	3	.999976686	1200.37365
ln(P)	3	1.00158875	1200.5078
1/ln(P)	2	.999693763	1200.52962

I V/F= .3	I Temp= 300 °K	I P.ideal= 1191.64713 kPa
-----------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	1.00000645	1211.10108
1/P	2	.999995354	1211.12787
Pt2	3	1.00000136	1211.09534
1/Pt2	3	.999999899	1211.08302
Pt3	3	.999999258	1211.0917
1/Pt3	3	.999998794	1211.06547
sqr(P)	3	1.00005498	1211.11337
1/sqr(P)	2	.999961287	1211.08394
ln(P)	2	1.00171769	1211.09456
1/ln(P)	3	.999772233	1210.97873

I V/F= 0	I Temp= 300 °K	I P.ideal= 1199.37683 kPa
----------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999994376	1216.72997
1/P	3	1.0000050	1216.70539
Pt2	3	.999995063	1216.72264
1/Pt2	2	.999999157	1216.58257
Pt3	3	.99999994	1216.72203
1/Pt3	2	1.00000098	1216.74461
sqr(P)	3	1.00000067	1216.74164
1/sqr(P)	3	.999991727	1216.69307
ln(P)	3	1.00166007	1216.62947
1/ln(P)	3	1.00023002	1216.60646

I Sistema:	I Calculo: Presion	I Ecuation: Soave-APL
Iinic: Ec. de Michel森	I.R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error:ln(sumY/sumX) I		

IV/F= 1                    I Temp= 355 °K                    I P.ideal= 3944.8987 kPa I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999995722	3861.95292
1/P	3	1.00000229	3861.89105
P12	3	.999956469	3861.90945
1/P12	3	.999996977	3861.91066
P13	3	.999932809	3861.85143
1/P13	3	.99999951	3861.92362
sqr(P)	3	.999973159	3861.99354
1/sqr(P)	3	1.00002148	3861.84726
ln(P)	3	1.00000162	3862.31099
1/ln(P)	3	.999279805	3861.5213

IV/F= .3                    I Temp= 355 °K                    I P.ideal= 3952.1764 kPa I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999981541	3863.25644
1/P	3	1.00000004	3863.21675
P12	3	.99995182	3863.2285
1/P12	3	.999996592	3863.24537
P13	3	.999917262	3863.19587
1/P13	3	1.000000048	3863.24781
sqr(P)	3	.999994967	3863.31071
1/sqr(P)	3	.999997636	3863.17159
ln(P)	3	1.000043467	3863.6444
1/ln(P)	3	1.00035284	3864.84562

IV/F= 0                    I Temp= 355 °K                    I P.ideal= 3967.05893 kPa I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999964144	3869.50505
1/P	3	.999994433	3869.4673
P12	3	.999914269	3869.44373
1/P12	3	.999999282	3869.49639
P13	3	.999859052	3869.30043
1/P13	3	.99999341	3869.3179
sqr(P)	3	.999969659	3869.54983
1/sqr(P)	3	.999998421	3869.41866
ln(P)	3	1.000572945	3869.88974
1/ln(P)	3	1.000750884	3869.89793

Sistema: 1	Calculo: Preston	Ecuacion: Soave-APR
Iinic: Ec. de Michelsen	IR.Mezclado: Clasica	IMetodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error:sumY-sumX	I	I

IV/F= 1	ITemp= 355 °K	IP.ideal= 3944.69893 kPa
---------	---------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999999116	3861.95763
1/P	3	1.00000086	3861.8942
P12	3	.999963922	3861.90461
1/P12	3	.999996326	3861.92459
P13	3	.999937547	3861.86967
1/P13	3	.999999283	3861.92973
sqr(P)	3	1.000038922	3861.99564
1/sqr(P)	3	1.00002437	3861.84955
ln(P)	3	1.00117113	3862.32252
1/ln(P)	3	.999929462	3861.52398

IV/F= .5	ITemp= 355 °K	IP.ideal= 3952.1764 kPa
----------	---------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.9999983629	3863.27143
1/P	3	.999994024	3863.21829
P12	3	.999981136	3863.22859
1/P12	3	.999996812	3863.24416
P13	3	.99991436	3863.18682
1/P13	3	.999999878	3863.25257
sqr(P)	3	1.00003171	3863.31702
1/sqr(P)	3	1.00002177	3863.16773
ln(P)	3	1.00006444	3863.64494
1/ln(P)	3	1.00006093	3864.84408

IV/F= 0	ITemp= 355 °K	IP.ideal= 3967.05083 kPa
---------	---------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999964185	3869.48129
1/P	3	.999906785	3869.45239
P12	3	.99991295	3869.43013
1/P12	3	.999994645	3869.49856
P13	3	.999859786	3869.49517
1/P13	3	.999998667	3869.58233
sqr(P)	3	.999999463	3869.5457
1/sqr(P)	3	1.00001517	3869.40619
ln(P)	3	1.00006922	3869.88325
1/ln(P)	3	1.00001276	3869.88056

---

Sistema: 1	Calculo: Presion	Ecuacion: Soave-AP1
I Inic: Ec. de Michelsen	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Neuton U.P.O.
I	I F.Error:ln(sunYt3/sunXt2)	I

---



---

I V/F= 1	I Temp= 355 °K	I P.ideal= 3944.89893 kPa I
----------	----------------	-----------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999998691	3961.95018
1/P	3	1.00000087	3861.06224
P <sub>t2</sub>	3	.999999941	3861.9096
1/P <sub>t2</sub>	3	.999998272	3861.90413
P <sub>t3</sub>	3	.999934958	3861.87177
1/P <sub>t3</sub>	3	.999999851	3861.91948
sqr(P)	3	1.000000651	3861.99142
1/sqr(P)	3	1.00005168	3861.84649
ln(P)	3	1.00035377	3862.3198
1/ln(P)	3	.999758469	3861.52045

---



---

I V/F= .5	I Temp= 355 °K	I P.ideal= 3952.1764 kPa I
-----------	----------------	----------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999982477	3865.26758
1/P	3	.999997661	3865.2207
P <sub>t2</sub>	3	.999951591	3865.22162
1/P <sub>t2</sub>	3	.99999755	3865.23558
P <sub>t3</sub>	3	.999917091	3865.16702
1/P <sub>t3</sub>	3	1.00000024	3865.24721
sqr(P)	3	1.00001075	3865.31919
1/sqr(P)	3	.999994822	3865.16627
ln(P)	3	1.00040211	3865.64523
1/ln(P)	3	1.00090399	3864.84528

---



---

I V/F= 0	I Temp= 355 °K	I P.ideal= 3957.05883 kPa I
----------	----------------	-----------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999964717	3869.5011
1/P	3	.999991613	3869.45971
P <sub>t2</sub>	3	.999918114	3869.44434
1/P <sub>t2</sub>	3	.999996214	3869.4986
P <sub>t3</sub>	3	.999937651	3869.39948
1/P <sub>t3</sub>	3	.999992957	3869.51604
sqr(P)	3	1.00000489	3869.55375
1/sqr(P)	3	.999998976	3869.41307
ln(P)	3	1.00094444	3869.88751
1/ln(P)	3	1.00043132	3869.08696

I Sistema: 1	I Calculo: Presion	I Ecuacion: Soave-FP1
I Inic: Ec. de Michelsen	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I	I F.Error:sumY13-sumX12	I

I V/F= 1	I Temp= 355 °K	I P.Ideal= 3944.89993 kPa
----------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999998374	3861.94953
1/P	3	.999998497	3861.89074
P12	3	.99999656	3861.92409
1/P12	3	.999999241	3861.91843
P13	3	.999943589	3861.91465
1/P13	3	.99999858	3861.92093
sqr(P)	3	1.00002119	3861.99528
1/sqr(P)	3	1.00003389	3861.84991
ln(P)	3	1.00000103	3862.3241
1/ln(P)	3	1.00001442	3861.52649

I V/F= .5	I Temp= 355 °K	I P.Ideal= 3952.1764 kPa
-----------	----------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999985329	3865.25531
1/P	3	.999991012	3865.21885
P12	3	.999949063	3865.2317
1/P12	3	.999996295	3865.2367
P13	3	.999915384	3865.18087
1/P13	3	.999999415	3865.25863
sqr(P)	3	1.00003925	3865.31074
1/sqr(P)	3	.999969414	3865.17111
ln(P)	3	1.00041968	3865.64256
1/ln(P)	3	1.00077282	3864.84215

I V/F= 0	I Temp= 355 °K	I P.Ideal= 3967.05883 kPa
----------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999954325	3869.46445
1/P	3	.999968326	3869.44975
P12	3	.999937796	3869.48549
1/P12	3	.999993952	3869.4932
P13	3	.999926556	3869.37891
1/P13	3	.999997229	3869.52355
sqr(P)	3	.999973645	3869.52936
1/sqr(P)	3	.999996996	3869.4806
ln(P)	3	1.00068112	3869.86566
1/ln(P)	3	1.00002379	3869.8638

Sistema: 1	Calculo: Presion	Ecuacion: Soave-APR
Iinic: Presion de vapor	I.R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error:ln(sumV/sumX)		

IV/F= 1 I Temp= 355 °K I P.ideal= 3589.92947 kPa I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999833358	3861.39477
1/P	3	.999991959	3861.8383
P12	3	.999680132	3868.85586
1/P12	3	.999999885	3861.98348
P13	4	.999135077	3861.98472
1/P13	3	.999999996	3861.89581
sqr(P)	3	.999984806	3861.62382
1/sqr(P)	3	.999977005	3861.71251
ln(P)	3	.999977367	3862.89662
1/ln(P)	3	1.00004871	3861.32857

IV/F= .5 I Temp= 355 °K I P.ideal= 3596.64932 kPa I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999844085	3864.74265
1/P	3	.999991995	3863.17128
P12	3	.999623685	3864.19877
1/P12	3	1.000000003	3865.24159
P13	4	.999155119	3863.27994
1/P13	3	.999999998	3863.26273
sqr(P)	3	.999984624	3864.96948
1/sqr(P)	3	.999988976	3863.84963
ln(P)	3	1.00000696	3863.43855
1/ln(P)	3	.999930823	3864.66297

IV/F= 0 I Temp= 355 °K I P.ideal= 3610.71253 kPa I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999864646	3869.67923
1/P	3	.999993512	3869.4434
P12	3	.999667382	3868.59384
1/P12	3	.999999873	3869.50512
P13	4	.999267517	3869.53516
1/P13	3	.999999965	3869.51938
sqr(P)	3	.999923378	3869.28688
1/sqr(P)	3	.999979513	3869.3222
ln(P)	3	.999967942	3869.73133
1/ln(P)	3	.999962936	3869.95181

Sistemas: 1	Calculo: Presion	Ecuacion: Soave-APR
Inic: Presion de vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
F.Error:sunV-sunX		

IV/F= 1	Temp= 355 °K	IP.ideal= 3589.92933 kPa
---------	--------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.99963991	3661.40949
1/P	3	.999995011	3661.86315
P12	3	.999636349	3661.88326
1/P12	3	.99999971	3661.9182
P13	4	.999227133	3661.94507
1/P13	3	.999999937	3661.88184
ggr(P)	3	.999928687	3661.72935
1/ggr(P)	3	.999996498	3661.78211
ln(P)	3	1.00006924	3662.1762
1/ln(P)	3	.99969784	3661.39794

IV/F= .5	Temp= 355 °K	IP.ideal= 3596.64932 kPa
----------	--------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999844323	3664.74984
1/P	3	.9999927	3665.14403
P12	3	.99962335	3664.23857
1/P12	3	.999999733	3665.24012
P13	4	.99915941	3665.28229
1/P13	3	.999999914	3665.24462
ggr(P)	3	.999999983	3664.97819
1/ggr(P)	3	.99998367	3665.0534
ln(P)	3	.999646854	3665.43024
1/ln(P)	3	.99963344	3664.66324

IV/F= 0	Temp= 355 °K	IP.ideal= 3618.71253 kPa
---------	--------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999835833	3668.94768
1/P	3	.999990136	3669.3823
P12	3	.999617963	3668.46373
1/P12	3	.999999473	3669.49584
P13	4	.999168836	3669.53872
1/P13	3	.999999963	3669.51129
ggr(P)	3	.999904327	3669.16611
1/ggr(P)	3	.999972526	3669.27516
ln(P)	3	1.00001246	3669.64415
1/ln(P)	3	.999970661	3668.87007

Sistema: 1	Calculo: Presion	Ecuacion: Soave-RP1
Inic: Presion de vapor   R.Mezclado: Clasica		Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:ln(sunYt3/sunXt2)	

V/F= 1	Temp= 355 °K	P.ideal= 3589.92935 kPa
--------	--------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999829516	3861.48939
1/P	3	.999991718	3861.86998
P12	3	.999998861	3860.92614
1/P12	3	.999999669	3861.91751
P13	4	.999134775	3861.94861
1/P13	3	.999999994	3861.93787
sqr(P)	3	.99999875	3861.62725
1/sqr(P)	3	.999977083	3861.7882
ln(P)	3	1.00000007	3862.09084
1/ln(P)	3	1.00004542	3861.32658

V/F= .5	Temp= 355 °K	P.ideal= 3596.64932 kPa
---------	--------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999847655	3864.74352
1/P	3	.999992913	3863.17482
P12	3	.999626709	3864.32445
1/P12	3	1.00000013	3863.2476
P13	4	.999164739	3865.27394
1/P13	3	.999999992	3865.21791
sqr(P)	3	.999913559	3865.08186
1/sqr(P)	3	.999988144	3865.06481
ln(P)	3	.999896209	3865.44651
1/ln(P)	3	1.00002541	3864.67192

V/F= 0	Temp= 355 °K	P.ideal= 3610.71253 kPa
--------	--------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999863776	3869.07923
1/P	3	.999993512	3869.4434
P12	3	.999667304	3868.59304
1/P12	3	1.00000013	3869.587
P13	4	.999268583	3869.53892
1/P13	3	.999999965	3869.51938
sqr(P)	3	.999926474	3869.28689
1/sqr(P)	3	.999979513	3869.3222
ln(P)	3	.999967942	3869.73133
1/ln(P)	3	.999962936	3869.95181

Sistema: 1	Calculo: Presion	Ecuacion: Soave-AP
inic: Presion de vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:sumV13-sumX12	

V/F= 1	Temp= 355 °K	P.ideal= 3569.92935 kPa
--------	--------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999993642	3661.64764
1/P	3	.999999093	3661.88386
P12	3	.999711724	3661.21129
1/P12	3	.999999563	3661.96314
P13	3	.999378742	3660.87921
1/P13	3	.999999086	3661.83731
sqr(P)	3	.999947955	3661.83607
1/sqr(P)	3	.999995949	3661.812
ln(P)	3	.999943104	3662.24831
1/ln(P)	3	1.00001415	3661.45826

V/F= .5	Temp= 355 °K	P.ideal= 3596.64932 kPa
---------	--------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999931894	3664.69652
1/P	3	.999991281	3665.16425
P12	3	.999599733	3664.21382
1/P12	3	.999999925	3665.25309
P13	4	.999123583	3665.27526
1/P13	3	.999999914	3665.2405
sqr(P)	3	.999981598	3664.92152
1/sqr(P)	3	.999973876	3665.8274
ln(P)	3	.999925214	3665.48353
1/ln(P)	3	.999996263	3664.62749

V/F= 0	Temp= 355 °K	P.ideal= 3618.71254 kPa
--------	--------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999770093	3668.62793
1/P	3	.999978179	3669.24427
P12	4	.999475664	3669.34373
1/P12	3	.999997982	3669.44938
P13	4	.999845187	3669.52669
1/P13	3	1.000000003	3669.51333
sqr(P)	3	.999659839	3668.89178
1/sqr(P)	3	.999954853	3669.86949
ln(P)	3	.999938366	3669.41312
1/ln(P)	3	.999921746	3668.65005

Sistema: 1	Calculo: Presion	Ecuacion: Soave-RP1
Inic: Presion de vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:suavT3-suavX12	

V/F= 1	Temp= 355 °K	P.ideal= 3569.92935 kPa
--------	--------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999993642	3861.64764
1/P	3	.999999993	3861.88386
P12	3	.999711724	3861.21129
1/P12	2	.999999563	3861.98314
P13	3	.999378742	3868.87921
1/P13	3	.999999986	3861.83731
sqr(P)	3	.999947955	3861.83607
1/sqr(P)	3	.999959594	3861.812
ln(P)	3	.999943184	3862.24831
1/ln(P)	3	1.00001415	3861.45826

V/F= .5	Temp= 355 °K	P.ideal= 3596.64932 kPa
---------	--------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999631894	3864.68632
1/P	3	.999991281	3865.16425
P12	3	.999959733	3864.21382
1/P12	3	.999999925	3863.25309
P13	4	.999123583	3865.27526
1/P13	3	.999999914	3865.2495
sqr(P)	3	.999901598	3864.92152
1/sqr(P)	3	.999973876	3863.8274
ln(P)	3	.999925214	3863.48353
1/ln(P)	3	.999996265	3864.62749

V/F= 0	Temp= 355 °K	P.ideal= 3610.71254 kPa
--------	--------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999778893	3868.62795
1/P	3	.999978179	3869.24427
P12	4	.999473664	3869.54373
1/P12	3	.99999782	3869.44938
P13	4	.9998045187	3869.52869
1/P13	3	1.000000003	3869.51333
sqr(P)	3	.999658893	3868.89178
1/sqr(P)	3	.999954053	3869.06949
ln(P)	3	.999938566	3869.41312
1/ln(P)	3	.999921746	3868.63905

I Sistema: 4	I Calculo: Presion	I Ecuacion: Soave-APL
I Inic: Ec. de Michaelis	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I	I F.Error:ln(sumY/sumX)	I

I V/F= 1	I Temp= 400 °K	I P.ideal= 1116.78029 kPa I
----------	----------------	-----------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.996874927	848.711988
1/P	3	.999997347	848.753331
P12	5	.96356722	848.717266
1/P12	4	.999065846	848.718017
P13	6	.783045287	848.638934
1/P13	4	.99512796	848.734736
sqr(P)	4	.999440790	848.731497
1/sqr(P)	3	.999999914	848.701342
ln(P)	3	.99975983	848.693975
1/ln(P)	3	1.00000141	848.638222

I V/F= .5	I Temp= 400 °K	I P.ideal= 1347.18352 kPa I
-----------	----------------	-----------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.998283206	1046.69615
1/P	4	.999997914	1046.52538
P12	5	.979261463	1046.60554
1/P12	4	.999451558	1046.48474
P13	5	.89635238	1046.44426
1/P13	4	.996748309	1046.46559
sqr(P)	4	.999723684	1046.6611
1/sqr(P)	4	.999997343	1046.54376
ln(P)	4	.999992573	1046.69259
1/ln(P)	4	1.00000133	1046.48937

I V/F= 0	I Temp= 400 °K	I P.ideal= 1850.64704 kPa I
----------	----------------	-----------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.996421525	1415.8436
1/P	3	.9999986	1414.995
P12	5	.964413441	1415.05873
1/P12	4	.999461742	1415.04788
P13	6	.811888431	1415.8182
1/P13	4	.996534961	1415.06601
sqr(P)	4	.999249906	1415.0821
1/sqr(P)	3	.999999777	1414.96791
ln(P)	4	.999993963	1415.187
1/ln(P)	4	.999998653	1414.92484

Sistema: 4	Calculo: Presion	Ecuacion: Soave-Redlich-Kwong
Inic: Ec. de Michelsen	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:suav-suak	

V/F= 1	Temp= 400 °K	P.ideal= 1116.77307 kPa
--------	--------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.9999645	848.722964
1/P	4	.999923137	848.706691
P12	4	.984110691	848.63956
1/P12	4	.998430726	848.722532
P13	5	.878915622	848.655738
1/P13	4	.993829961	848.813963
sqr(P)	2	.999943822	848.718068
1/sqr(P)	4	.999999824	848.697945
ln(P)	2	1.000000321	848.793557
1/ln(P)	3	.99999613	848.688981

V/F= .5	Temp= 400 °K	P.ideal= 1347.18354 kPa
---------	--------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.998188983	1846.69734
1/P	4	.99999847	1846.532721
P12	3	.978576296	1846.6855
1/P12	4	.99947946	1846.48655
P13	5	.892304236	1846.44739
1/P13	4	.996807166	1846.46341
sqr(P)	4	.999704461	1846.66293
1/sqr(P)	4	.999997011	1846.54566
ln(P)	4	.999993944	1846.69493
1/ln(P)	4	.999998517	1846.49154

V/F= 0	Temp= 400 °K	P.ideal= 1658.64784 kPa
--------	--------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	5	.991950509	1415.87005
1/P	3	.999930344	1414.97005
P12	5	.947172582	1414.92646
1/P12	3	.999668916	1415.13042
P13	8	.687998668	1415.03885
1/P13	4	.997800884	1415.05236
sqr(P)	4	.999239494	1415.83619
1/sqr(P)	4	.999999323	1415.92739
ln(P)	4	.999768745	1415.18267
1/ln(P)	4	.999948921	1414.92286

I Sistemas: 4	I Calculo: Presion	I Ecuacion: Soave-APL
I Inic: Presion de Vapor	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I	I F.Error:ln(sumY/sumX)	I

I V/F= 1	I Temp= 400 °K	I P.ideal= 790.195481 kPa
----------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999999623	848.721995
1/P	3	1.000000111	848.706413
P <sub>12</sub>	3	.999991035	848.708061
1/P <sub>12</sub>	3	.999996983	848.715696
P <sub>13</sub>	3	.9999631	848.689674
1/P <sub>13</sub>	3	.999979946	848.735463
sqr(P)	3	.99995714	848.731363
1/sqr(P)	3	1.00000318	848.698015
ln(P)	3	1.00006431	848.788329
1/ln(P)	3	1.00012667	848.641224

I V/F= .5	I Temp= 400 °K	I P.ideal= 1026.75234 kPa
-----------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999997706	1046.6828
1/P	3	1.00000012	1046.58213
P <sub>12</sub>	3	.999999329	1046.59774
1/P <sub>12</sub>	2	.999997796	1046.55371
P <sub>13</sub>	3	.999998923	1046.59671
1/P <sub>13</sub>	3	.999999201	1046.58955
sqr(P)	3	1.00000252	1046.61329
1/sqr(P)	3	1.00005339	1046.57143
ln(P)	3	1.00033797	1046.68624
1/ln(P)	3	1.00115239	1046.49849

I V/F= 0	I Temp= 400 °K	I P.ideal= 1578.20044 kPa
----------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999965783	1414.91376
1/P	3	1.00000049	1415.04145
P <sub>12</sub>	4	.999588073	1415.06343
1/P <sub>12</sub>	3	.999973597	1415.09559
P <sub>13</sub>	4	.998116532	1415.05675
1/P <sub>13</sub>	4	.999789438	1415.05093
sqr(P)	3	.99995637	1415.03239
1/sqr(P)	3	1.00000042	1415.02754
ln(P)	3	1.00001537	1415.1778
1/ln(P)	3	1.00000308	1414.92092

I Sistemas: 4	I Calculo: Presion	I Ecuacion: Soave-Redlich-Kwong
Iinic: Presion de Vapor	IR.Mezclado: Clasica	IMetodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error:sumY-sumX	I	I

I V/F= 1 I Temp= 400 °K I P.ideal= 798.281845 kPa I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	1.00000091	840.722956
1/P	3	.999999983	840.708434
P12	3	.999996076	840.716753
1/P12	3	.99999448	840.727555
P13	3	.999979033	840.706725
1/P13	3	.99996937	840.768522
sqr(P)	2	.999996059	840.699827
1/sqr(P)	3	1.00000196	840.638437
ln(P)	3	1.00000497	840.788457
1/ln(P)	3	1.00011837	840.641487

I V/F= .5 I Temp= 400 °K I P.ideal= 1026.75234 kPa I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999995687	1046.60273
1/P	3	.999992573	1046.53199
P12	3	.999997858	1046.59726
1/P12	2	.999999841	1046.35425
P13	3	.999999276	1046.59417
1/P13	3	.999999179	1046.58848
sqr(P)	3	.999997766	1046.6131
1/sqr(P)	3	1.00003447	1046.57149
ln(P)	3	1.00036715	1046.68625
1/ln(P)	3	1.00001427	1046.49849

I V/F= 0 I Temp= 400 °K I P.ideal= 1578.20344 kPa I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.999999616	1415.06997
1/P	3	.999999385	1415.03773
P12	4	.999318491	1415.06105
1/P12	3	.999995721	1415.05109
P13	4	.997268317	1415.03819
1/P13	3	.999999985	1415.12831
sqr(P)	3	.9999936416	1414.86459
1/sqr(P)	3	.999999472	1415.00474
ln(P)	3	1.00001748	1415.10666
1/ln(P)	3	1.000001986	1414.07343

---

Sistema: 4	Calculo: Presion	Ecuacion: Soave-APR
Iinic: Ec. de Michelsen	IR.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Neuton U.P.O.
I F.Error:ln(sumY/sumX) I		

---



---

IV/F= 1	Temp= 440 °K	I P.ideal= 2037.17883 kPa I
---------	--------------	-----------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999802891	1858.74143
1/P	3	.99999734	1859.02278
P12	4	.998978398	1859.0468
1/P12	3	1.00000006	1859.04324
P13	4	.997047118	1859.04253
1/P13	3	.99999034	1859.08452
sqr(P)	3	.939920984	1858.93763
1/sqr(P)	3	.999993678	1858.98973
ln(P)	3	.999983915	1859.16003
1/ln(P)	3	1.00001945	1858.83275

---



---

IV/F= .5	Temp= 440 °K	I P.ideal= 2401.47741 kPa I
----------	--------------	-----------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.999502311	2144.69014
1/P	4	.999997722	2144.56882
P12	4	.997780272	2144.7195
1/P12	2	.999999976	2143.61024
P13	4	.99302844	2144.69379
1/P13	4	.9999956872	2144.53617
sqr(P)	4	.999824005	2144.69015
1/sqr(P)	4	.999998189	2144.56517
ln(P)	4	.999999845	2144.63492
1/ln(P)	4	.999989697	2144.41051

---



---

IV/F= 0	Temp= 440 °K	I P.ideal= 3140.80095 kPa I
---------	--------------	-----------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	5	.982542389	2517.6781
1/P	4	.939999775	2517.61997
P12	5	.931603494	2517.40657
1/P12	3	.999899933	2517.81543
P13	7	.754558846	2517.65443
1/P13	3	.999999368	2517.54349
sqr(P)	4	.994175243	2517.35699
1/sqr(P)	4	.999726082	2517.56555
ln(P)	4	.998242081	2517.7978
1/ln(P)	4	.999061406	2517.3353

I Sistema: 4	I Calculo: Presion	I Ecuacion: Soave-RP1
I Inic: Ec. de Michaelis	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I	I F.Error:sumY-sumX	I

I V/F= 1	I Temp= 440 °K	I P.ideal= 2037.17067 kPa
----------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999869326	1858.91277
1/P	3	1.00000029	1859.0289
P12	4	.999282984	1859.04362
1/P12	3	.999999813	1859.04351
P13	4	.997737035	1859.04474
1/P13	3	.999984933	1859.15935
sqr(P)	3	.999953607	1859.02055
1/sqr(P)	3	.999998278	1859.00637
ln(P)	3	.999982876	1859.20856
1/ln(P)	3	1.00004118	1858.86074

I V/F= .5	I Temp= 440 °K	I P.ideal= 2401.47741 kPa
-----------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.999499493	2144.69043
1/P	4	.999997623	2144.56234
P12	4	.997771018	2144.72356
1/P12	4	.999994604	2144.55308
P13	4	.992993373	2144.68251
1/P13	4	.999996951	2144.53674
sqr(P)	4	.99982481	2144.69105
1/sqr(P)	4	.9999998187	2144.56528
ln(P)	4	1.00000438	2144.83424
1/ln(P)	4	.999993954	2144.41075

I V/F= 0	I Temp= 440 °K	I P.ideal= 3140.60094 kPa
----------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	5	.979225119	2517.65364
1/P	4	1.00000001	2517.60093
P12	6	.914412531	2517.66098
1/P12	3	.999794532	2517.68128
P13	3	.999965229	2517.51175
1/P13	3	.99126386	2517.70547
sqr(P)	4	.99966659	2517.5198
1/sqr(P)	4	.997685625	2517.63418
ln(P)	4	.998731964	2517.23591
1/ln(P)	4		

Sistema: 4	Calculo: Presion	Ecuacion: Soave-Redlich-Kwong
Iinic: Presion de Vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:ln(sumY/sumX)	

IV/F= 1                    I Temp= 448 °K                    I P.ideal= 1677.23104 kPa |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999925822	1658.93185
1/P	3	.999999848	1659.05025
P12	4	.999639858	1659.04852
1/P12	3	.999397181	1659.09022
P13	4	.999046301	1659.04361
1/P13	3	.999925329	1659.0297
sqr(P)	3	.99997459	1659.03385
1/sqr(P)	3	1.00000002	1659.02821
ln(P)	3	1.00000226	1659.22549
1/ln(P)	3	1.00000007	1658.87935

IV/F= .5                    I Temp= 448 °K                    I P.ideal= 2053.60923 kPa |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999994757	2144.64971
1/P	3	.999993004	2144.63224
P12	3	.999988798	2144.60634
1/P12	3	.999998954	2144.64533
P13	3	.999962569	2144.58033
1/P13	3	.999999856	2144.65041
sqr(P)	3	1.000000624	2144.68393
1/sqr(P)	3	.999997996	2144.60818
ln(P)	3	1.0002547	2144.85765
1/ln(P)	3	1.00010033	2144.4421

IV/F= 0                    I Temp= 448 °K                    I P.ideal= 2856.293561 kPa |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.999853166	2517.64859
1/P	3	.99985938	2517.46508
P12	4	.998097583	2517.51531
1/P12	3	.999901651	2517.66286
P13	5	.990163575	2517.67015
1/P13	2	1	2517.32864
sqr(P)	4	1.000000018	2517.6913
1/sqr(P)	4	.999871354	2517.60702
ln(P)	4	.999979548	2517.89984
1/ln(P)	4	.999939773	2517.40581

I Sistemas: 4	I Calculo: Presion	I Ecuacion: Soave-APR
Iinic: Presion de Vapor	I.R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I	I F.Error:sumV-sumX	I

I V/F= 1	I Temp= 440 °K	I P.ideal= 1677.23453 kPa
----------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999963471	1859.82144
1/P	3	.999999185	1859.85436
P12	3	.999784181	1858.76851
1/P12	3	.999993244	1859.156
P13	4	.999262663	1859.04378
1/P13	4	.99982903	1859.03179
sqr(P)	3	.999994742	1859.08357
1/sqr(P)	3	.999999182	1859.03162
ln(P)	3	1.00003149	1859.24469
1/ln(P)	3	.999968397	1858.89077

I V/F= .5	I Temp= 440 °K	I P.ideal= 2053.69923 kPa
-----------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	3	.999997002	2144.65369
1/P	3	.999997889	2144.63688
P12	3	.999998639	2144.61932
1/P12	3	.999998825	2144.64557
P13	3	.999962532	2144.5906
1/P13	3	.999999872	2144.64735
sqr(P)	3	1.00000325	2144.68166
1/sqr(P)	3	.999994871	2144.61173
ln(P)	3	1.00019375	2144.85762
1/ln(P)	3	.999865266	2144.44192

I V/F= 0	I Temp= 440 °K	I P.ideal= 2856.29561 kPa
----------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.999782376	2517.62133
1/P	4	.999731649	2517.63267
P12	4	.997539957	2517.3655
1/P12	3	.999794806	2517.65249
P13	5	.987833462	2517.66822
1/P13	3	.99994967	2517.6523
sqr(P)	4	.999995179	2517.69048
1/sqr(P)	4	.99983256	2517.60171
ln(P)	4	.999933644	2517.89294
1/ln(P)	4	.9999683144	2517.39955

---

I Sistema: 5	I Calculo: Presion	I Ecuacion: Soave-API
Iinic: Ec. de Michelsen	IR.Mezclado: Clasica	IMetodo Num:Neuton U.P.O.
I	I F.Error:ln(sumY/sumX)	I

---



---

IV/F= .6693	ITemP= 360 *K	IP.ideal= 1524.85339 kPa
-------------	---------------	--------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	9	.228193129	818.545804
1/P	8	.06589074e-03	810.449072
1/P12	9	.026116138	810.446545
1/P13	9	.0635591756	810.414703
sqr(P)	9	.129383677	810.414055
1/sqr(P)	8	.0172202534	810.491133
ln(P)	8	.00825115	810.601522
1/ln(P)	7	.0866036071	810.491251

---



---

IV/F= .6618	ITemP= 340 *K	IP.ideal= 4037.85374 kPa
-------------	---------------	--------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	6	.999741117	3245.44876
1/P	5	.998043484	3246.8159
P12	6	.991390492	3245.20232
1/P12	5	.999009919	3246.55634
P13	6	.94234469	3245.461
1/P13	5	.999668279	3246.28259
sqr(P)	6	.999282918	3245.58658
1/sqr(P)	5	.997994869	3246.87393
ln(P)	4	.998478419	3246.72327
1/ln(P)	5	.998233285	3246.67823

---



---

IV/F= .35	ITemP= 320 *K	IP.ideal= 25624.4252 kPa
-----------	---------------	--------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	6	.93737514	17397.8144
1/P	5	.97246176	17450.0961
1/P12	4	.986114485	17425.996
1/P13	5	.99289452	17447.788
sqr(P)	6	.990032533	17413.18
1/sqr(P)	4	.986322056	17482.7694
ln(P)	4	.998027387	17517.9189
1/ln(P)	6	.993026352	17415.2583

Sistema: 3	Calculo: Presion	Ecuacion: Soave-API
Iinic: Ec. de Michelsen	I.R.Mezclado: Clasica	IMetodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error:surY-surX	I	I

I V/F= .8693 I Temp= 300 °K I P.ideal= 1524.86573 kPa I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	6	.941924919	810.416894
1/P	5	.999479711	810.400466
1/P12	6	.98924783	810.440289
1/P13	5	.96790073	810.396635
sqr(P)	5	.996761729	810.633458
1/sqr(P)	5	.999914826	810.478568
ln(P)	4	.999918587	810.718108
1/ln(P)	5	.999783322	810.441292

I V/F= .8618 I Temp= 340 °K I P.ideal= 4838.0737 kPa I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	6	.999744862	3245.48883
1/P	5	.998854487	3246.77518
P12	6	.993325368	3245.23593
1/P12	5	.999669748	3246.51623
P13	6	.948632812	3245.31367
1/P13	5	.999681552	3246.9889
sqr(P)	4	.999078485	3247.91428
1/sqr(P)	5	.997925529	3246.84321
ln(P)	4	.998338392	3246.84962
1/ln(P)	5	.998892133	3246.64638

I V/F= .35 I Temp= 320 °K I P.ideal= 25624.4326 kPa I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	7	.933857412	17427.202
1/P	5	.971676131	17450.414
1/P12	4	.983200959	17425.8155
1/P13	5	.994135288	17445.9294
sqr(P)	5	.996521737	17419.1895
1/sqr(P)	5	.991367999	17419.8292
ln(P)	4	.998185984	17511.8973
1/ln(P)	5	.993278782	17415.8969

Sistema: 5	Calculo: Presion	Ecuacion: Soave-AP	
Inic: Ec. de Michelsen	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.	
	F.Error:ln(sumV13/sumV12))		

| V/F= .8693 | Temp= 300 °K | P.ideal= 1524.86373 kPa |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	9	.230896544	810.571245
1/P	8	1.12574792e-03	810.439233
1/P12	9	.826861686	810.441208
1/P13	9	.8635735269	810.489983
sqr(P)	9	.131348389	810.416314
1/sqr(P)	8	.0176406262	810.489235
ln(P)	8	.0894715697	810.602235
1/ln(P)	7	.0001784677	810.457725

| V/F= .8618 | Temp= 340 °K | P.ideal= 4838.8737 kPa |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	9	.111959869	3245.44946
1/P	8	.031100151	3246.81902
P12	9	.193953729	3245.21941
1/P12	8	9.32886864e-03	3246.59535
P13	9	.266246436	3245.42613
1/P13	8	7.42458749e-04	3246.2317
sqr(P)	9	.0788245426	3245.58979
1/sqr(P)	8	.0466568195	3246.87252
ln(P)	7	.112989581	3246.6663
1/ln(P)	8	.0683061358	3246.67613

| V/F= .35 | Temp= 320 °K | P.ideal= 25624.534 kPa |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	7	.0683234272	17632.7898
1/P	8	4.32721673e-03	17450.1698
1/P12	4	.392407286	17426.4826
1/P13	3	.99279857	17447.5563
sqr(P)	8	.991097565	17418.8597
1/sqr(P)	4	.996445635	17459.3143
ln(P)	4	.997999354	17520.3676
1/ln(P)	6	.99295094	17415.2844

Sistemas: 5	Calculo: Presion	Ecuacion: Soave-API
Inic: Ec. de Michelsen	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num: Newton U.P.O.
F.Error:sumVt3-sumXt2		

V/F = .8693	Temp = 300 °K	P.ideal = 1524.86573 kPa
-------------	---------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	9	.29496711	810.481636
1/P	8	3.39428762e-03	810.351724
1/P12	9	.8239826434	810.433159
1/P13	9	.0684495688	810.352843
sqr(P)	8	.195254061	810.572898
1/sqr(P)	8	.827638776	810.452022
ln(P)	7	.162135777	810.322388
1/ln(P)	8	.8766426184	810.431936

V/F = .8618	Temp = 340 °K	P.ideal = 4838.8737 kPa
-------------	---------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	9	.121446560	3245.51496
1/P	8	.8352500522	3246.75051
P12	9	.20859963	3245.26963
1/P12	8	.8111763999	3246.47151
P13	9	.2871113886	3245.18696
1/P13	8	1.21705794e-03	3246.94607
sqr(P)	7	.146621528	3247.25344
1/sqr(P)	8	.8543368804	3246.81609
ln(P)	9	.8648905994	3245.96837
1/ln(P)	8	.8755389630	3246.61982

V/F = .35	Temp = 320 °K	P.ideal = 25624.534 kPa
-----------	---------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	10	.115384532	17438.821
1/P	8	6.94900252e-03	17451.9599
1/P12	7	8.25716706e-03	17432.0866
1/P13	8	.0336519273	17446.4204
sqr(P)	9	.71144277e-03	17421.8671
1/sqr(P)	9	.03728449e-03	17418.0929
ln(P)	9	.5.87163516e-04	17417.5648
1/ln(P)	7	3.66026670e-05	17312.6146

Sistema: 3	Calculo: Presion	Ecuacion: Soave-RP1
Inic: Presion de Vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:ln(sumY/sumX)	

V/F= .8693	Temp= 368 °K	P.ideal= 742.458286 kPa
------------	--------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.999989439	810.584965
1/P	4	.999857149	810.396158
P12	4	.999982925	810.539071
1/P12	4	.999962407	810.340947
P13	4	.999972992	810.564798
1/P13	4	.999985797	810.290478
sqr(P)	4	.999870561	810.490123
1/sqr(P)	2	1.00000042	811.401194
In(P)	4	.999847026	810.522403
1/ln(P)	4	.999876941	810.373524

V/F= .8618	Temp= 348 °K	P.ideal= 2548.29297 kPa
------------	--------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	5	.999461374	3244.36725
1/P	6	.998893325	3245.49163
P12	5	.999315431	3244.96119
1/P12	6	.999785821	3245.76761
P13	5	.996910345	3245.72337
1/P13	6	.969748786	3246.0162
sqr(P)	5	.998924766	3244.17696
1/sqr(P)	6	.997878951	3245.35779
In(P)	5	.998295127	3244.25556
1/ln(P)	6	.998841399	3245.05323

V/F= .33	Temp= 328 °K	P.ideal= 19356.5834 kPa
----------	--------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.976190917	17486.8274
1/P	5	.967546348	17426.641
P12	5	.969934947	17427.3151
1/P12	5	.97125674	17426.3478
P13	6	.965670165	17446.5796
1/P13	2	1.00000001	17142.9323
sqr(P)	4	.9749953	17486.183
1/sqr(P)	5	.966333764	17426.5799
In(P)	4	.974513469	17487.0444
1/ln(P)	5	.966848621	17423.0524

Sistema: 5	Calculo: Presion	Ecuacion: Soave-API
Iinic: Presion de Vapor	IR.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	I F.Error:sumY-sumX	

IV/F= .8693	ITemp= 300 °K	IP.ideal= 742.450206 kPa
-------------	---------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.999901184	810.489436
1/P	4	.999984628	810.383498
P12	4	.99997772	810.525059
1/P12	4	.999971915	810.321697
P13	4	.999982023	810.557299
1/P13	4	.999975184	810.290225
sqr(P)	4	.9998618	810.480095
1/sqr(P)	4	.99963862	810.398053
ln(P)	4	.999664544	810.513119
1/ln(P)	4	.999844133	810.363426

IV/F= .8618	ITemp= 340 °K	IP.ideal= 2548.29297 kPa
-------------	---------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	5	.999359723	3244.26173
1/P	4	.99828709	3243.88096
P12	5	.999825276	3244.70459
1/P12	6	.999683842	3243.82281
P13	3	.99974295	3257.71594
1/P13	6	.996149638	3243.98369
sqr(P)	6	.998706419	3243.35288
1/sqr(P)	6	.99784361	3243.49274
ln(P)	5	.998175878	3244.19318
1/ln(P)	6	.997926537	3245.89385

IV/F= .35	ITemp= 320 °K	IP.ideal= 19356.5834 kPa
-----------	---------------	--------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.975989761	17410.4531
1/P	5	.966974836	17426.5906
P12	5	.971738393	17429.3006
1/P12	5	.970415171	17426.7751
P13	6	.98571311	17445.2322
1/P13	2	.999999997	17137.8207
sqr(P)	4	.974445354	17413.4134
1/sqr(P)	5	.966844128	17426.6202
ln(P)	4	.97432571	17407.8965
1/ln(P)	4	.974643016	17402.8206

Sistema: 5	Calculo: Presion	Ecuacion: Soave-AP
inic: Presion de Vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:ln(sumYt3/sumXt2)	

IV/F = .8693      | Tend= 300 °K      | P.ideal= 742.450206 kPa |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.9999889	810.506003
1/P	4	.999957621	810.393467
Pt2	4	.999992234	810.532786
1/Pt2	4	.999963789	810.348484
Pt3	4	.999973075	810.565014
1/Pt3	4	.999984992	810.288189
sqr(P)	4	.999865236	810.488773
1/sqr(P)	2	.999998822	811.453347
ln(P)	4	.999851672	810.521549
1/ln(P)	4	.999799929	810.372348

IV/F = .8618      | Tend= 340 °K      | P.ideal= 2348.29297 kPa |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	5	.999453804	3244.3409
1/P	6	.998102362	3245.4953
Pt2	5	.999320426	3244.93942
1/Pt2	6	.999789289	3245.77248
Pt3	5	.996917747	3245.69526
1/Pt3	6	.989512113	3245.98589
sqr(P)	5	.99991421	3244.17159
1/sqr(P)	6	.997876136	3245.36008
ln(P)	5	.999288117	3244.25825
1/ln(P)	6	.999044897	3245.85586

IV/F = .35      | Tend= 320 °K      | P.ideal= 19356.5834 kPa |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.975370597	17420.6876
1/P	5	.967413266	17426.7164
Pt2	5	.977211314	17428.434
1/Pt2	5	.971441119	17427.8393
Pt3	6	.985643849	17440.7587
1/Pt3	2	.999999993	17444.3578
sqr(P)	4	.974715475	17411.9749
1/sqr(P)	5	.966432746	17426.5984
ln(P)	4	.974614837	17406.8456
1/ln(P)	5	.966174274	17425.8328

I Sistemas: 5	I Calculo: Presion	I Ecuacion: Soave-API
I Inic: Presion de Vapor	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I	I F.Error:sumVf3-sumXf2	I

I V/F= .8693	I Temp= 300 °K	I P.ideal= 742.453286 kPa
--------------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	4	.999892871	810.491422
1/P	4	.999871213	810.374464
P12	4	.999971727	810.514087
1/P12	4	.999979581	810.306807
P13	4	.999986707	810.555527
1/P13	4	.999961689	810.288681
sqr(P)	4	.999854309	810.473214
1/sqr(P)	4	.999841658	810.398535
ln(P)	4	.999863046	810.584178
1/ln(P)	2	.999992348	811.536479

I V/F= .8618	I Temp= 340 °K	I P.ideal= 2348.23297 kPa
--------------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	5	.999248524	3244.17011
1/P	4	.998385775	3242.85359
P12	3	.999444857	3244.64375
1/P12	6	.999551682	3245.87156
P13	5	.997311112	3245.35378
1/P13	6	.982564096	3245.91607
sqr(P)	6	.995548528	3245.38907
1/sqr(P)	6	.997811695	3245.41485
ln(P)	6	.997967946	3245.71893
1/ln(P)	6	.997826099	3245.13056

I V/F= .35	I Temp= 320 °K	I P.ideal= 19356.5834 kPa
------------	----------------	---------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	Presion (kPa)
P	5	.967938128	17429.2226
1/P	5	.966035064	17426.7437
P12	5	.976072733	17430.1612
1/P12	5	.976252289	17426.9811
P13	6	.986261988	17445.2093
1/P13	2	.999999995	17123.3307
sqr(P)	4	.973994429	17414.031
1/sqr(P)	5	.965287115	17426.5563
ln(P)	4	.973689785	17408.5791
1/ln(P)	4	.974810386	17483.2368

Sistema: I	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-API
inic: Ec. de Michelsen	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:ln(sumY/sumX)	

Temp= 226,275 °K	Presion= 101.325001 kPa	V/F ideal= .9999
------------------	-------------------------	------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	5	.29639901	.499921853
$\{(I-V/F)\}^{1/2}$	15	.347275122	1e-84
$(I+V/F)$	5	.179576641	.499921854
$(I+V/F)^{1/2}$	6	.268179314	.499434062
$\ln(I+V/F)$	4	.249727697	.438097387
$\exp(I+V/F)$	11	.156929485	.509648733

Sistema: I	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-API
inic: Ec. de Michelsen	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:sumY-sumX	

Temp= 226,275 °K	Presion= 101.325001 kPa	V/F ideal= .9999
------------------	-------------------------	------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	5	.295970954	.49998365
$\{(I-V/F)\}^{1/2}$	15	.999997974	1e-84
$(I+V/F)$	5	.179116369	.499983651
$(I+V/F)^{1/2}$	6	.287633957	.499567593
$\ln(I+V/F)$	4	.249188144	.498292391
$\exp(I+V/F)$	11	.15665144	.509686036

D.3 PRUEBAS DE LINEALIZACIÓN EN CÁLCULOS DE V/F.

Sistema: I	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-API
I Inic: Ec. de Michelsen	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
	I F.Error:sumYt3-sumXt2	

I Temp= 226.275 °K	I Presion= 101.325001 kPa	I V/F ideal= .9999
--------------------	---------------------------	--------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	7	.298340138	.500047943
$(10-V/F)^{1/2}$	15	.999997974	1e-84
$(1+V/F)$	7	.189732273	.500048073
$(1+V/F)^{12}$	7	.295669316	.493607463
$\ln(1+V/F)$	5	.290931361	.492128906
$\exp(1+V/F)$	10	.181442396	.5000994618

Sistema: I	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-API
I Inic: Ec. de Michelsen	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
	I F.Error:ln(sumYt3/sumXt2)	

I Temp= 226.275 °K	I Presion= 101.325001 kPa	I V/F ideal= .9999
--------------------	---------------------------	--------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	7	.296107857	.499749062
$(10-V/F)^{1/2}$	15	.999997974	1e-04
$(1+V/F)$	7	.191854496	.499748492
$(1+V/F)^{12}$	7	.294661448	.494576084
$\ln(1+V/F)$	6	.276526071	.500685208
$\exp(1+V/F)$	10	.182547399	.5000836987

Sistema: 1   Calculo: V/F   Ecuacion: Soave-API
Inic: Presion de Vapor   R.Mezclado: Clasica   Metodo Num:Newton U.P.O.
F.Error:ln(sumY/sumX)

Temp = 226.275 °K   Presion= .101.325001 kPa   V/F ideal= .9999
---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	4	.577598339	.500537894
(1-V/F)*2	5	.109038586	.507852441
(10-V/F)*11/2	15	.999999977	1e-04
(1+V/F)	4	.206962153	.500537894
(1+V/F)*2	5	.322579776	.500566374
ln(1+V/F)	3	.618002351	.500146779
exp(1+V/F)	10	.530816922	.509951679

Sistema: 1   Calculo: V/F   Ecuacion: Soave-API
Inic: Presion de Vapor   R.Mezclado: Clasica   Metodo Num:Newton U.P.O.
F.Error:sumY-sumX

Temp = 226.275 °K   Presion= .101.325001 kPa   V/F ideal= .9999
---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	4	.577730070	.500539107
(1-V/F)*2	5	.10790634	.507220114
(10-V/F)*11/2	15	.999999977	1e-04
(1+V/F)	4	.20947972	.500539106
(1+V/F)*2	5	.32564744	.500590235
ln(1+V/F)	3	.620492790	.500220751
exp(1+V/F)	10	.53104306	.509997034

Sistema: I	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-APL
I Inic: Presion de Vapor	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error:sumVt3-sumXt2		I

I Temp= 226.273 °K      I Presion= 181.325001 kPa    I V/F ideal= .9999      I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	3	.451389058	.495965042
(1-V/F)1/2	3	.228624682	.499704062
(10-V/F)11/2	15	.999999877	1e-84
(1+V/F)	3	.653685398	.495965042
(1+V/F)1/2	6	.221933325	.493889018
ln(1+V/F)	4	.496257283	.497382695
exp(1+V/F)	9	.507883997	.509778768

Sistema: I	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-APL
I Inic: Presion de Vapor	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error:ln(sumVt3/sumXt2)		I

I Temp= 226.273 °K      I Presion= 181.325001 kPa    I V/F ideal= .9999      I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	3	.449212289	.495835068
(1-V/F)1/2	3	.232645038	.499766062
(10-V/F)11/2	15	.999999877	1e-84
(1+V/F)	3	.6513522232	.495835067
(1+V/F)1/2	6	.222905674	.494576566
ln(1+V/F)	4	.495622666	.496943788
exp(1+V/F)	9	.505197353	.509631453

Sistema: 1	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-Redlich-Kwong	
Inic: Ec. de Michelsen	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.	
	F.Error:ln(sumY/sumX)		

Temp= 226.361 °K	Presion= 101.325001 kPa	V/F ideal= .9999	
------------------	-------------------------	------------------	--

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	2	.999999999	.999999
$\{1-V/F\}^{1/2}$	2	.999999999	.999999
$\{1+V/F\}$	2	.999999999	.999999
$\{1+V/F\}^{1/2}$	2	.999999999	.999999
$\ln(1-V/F)$	2	.999999999	.999999
$\exp(1+V/F)$	2	.999999999	.999999

Sistema: 1	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-Redlich-Kwong	
Inic: Ec. de Michelsen	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.	
	F.Error:sumY-sumX		

Temp= 226.361 °K	Presion= 101.325001 kPa	V/F ideal= .9999	
------------------	-------------------------	------------------	--

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	2	.999999999	.999999
$\{1-V/F\}^{1/2}$	19	.999999975	1e-04
$\{1+V/F\}$	2	.999999999	.999999
$\{1+V/F\}^{1/2}$	2	.999999999	.999999
$\ln(1-V/F)$	2	.999999999	.999999
$\exp(1+V/F)$	2	.999999999	.999999

Sistema: 1	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-APr	
Inic: Ec. de Michelsen	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.	
	F.Error:sumY73-sumX72		

| Temp = 226.361 °K | Presion= 101.325001 kPa | V/F ideal= .9999 |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	2	.999999999	.999999
$(10-V/F)^{11/2}$	15	.999999973	1e-84
$(1+V/F)$	2	.999999999	.999999
$(1+V/F)^{12}$	2	.999999998	.999999
$\ln(1+V/F)$	2	.999999998	.999999
$\exp(1+V/F)$	2	.999999999	.999999

Sistema: 1	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-APr	
Inic: Ec. de Michelsen	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.	
	F.Error:ln(sumY73/sumX72)		

| Temp = 226.361 °K | Presion= 101.325001 kPa | V/F ideal= .9999 |

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	2	.999999999	.999999
$(10-V/F)^{11/2}$	15	.999999973	1e-84
$(1+V/F)$	2	.999999999	.999999
$(1+V/F)^{12}$	2	.999999998	.999999
$\ln(1+V/F)$	2	.999999998	.999999
$\exp(1+V/F)$	2	.999999999	.999999

Sistema: 1	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-API
Inic: Presion de Vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Neuton U.P.O.
	F.Error:ln(sumV/sumX)	

Temp= 226.361 °K	Presion= 101.325001 kPa	V/F ideal= .9999
------------------	-------------------------	------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	2	1	.999999
$(10-V/F) t1/2$	15	.999997819	1e-04
$(1+V/F)$	2	1	.999999
$(1+V/F)^2$	2	.999999999	.999999
$\ln(1+V/F)$	2	.999999999	.999999
$\exp(1+V/F)$	2	.999999999	.999999

Sistema: 1	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-API
Inic: Presion de Vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Neuton U.P.O.
	F.Error:sumV-sumX	

Temp= 226.361 °K	Presion= 101.325001 kPa	V/F ideal= .9999
------------------	-------------------------	------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	2	1	.999999
$(10-V/F) t1/2$	15	.999997819	1e-04
$(1+V/F)$	2	1	.999999
$(1+V/F)^2$	2	.999999999	.999999
$\ln(1+V/F)$	2	.999999999	.999999
$\exp(1+V/F)$	2	.999999999	.999999

Sistema: 1	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-API
Inic: Presion de Vapor   R.Mezclado: Clasica		Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:sumYt3-sumXt2	

Temp= 226.361 °K	Presion= 101.325001 kPa	V/F ideal= .9999
------------------	-------------------------	------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	2	1	.999999
$(1-V/F)^{1/2}$	15	.999997819	1e-04
$(1+V/F)$	2	1	.999999
$(1+V/F)^{1/2}$	2	.999999999	.999999
$\ln(1+V/F)$	2	.999999999	.999999
$\exp(1+V/F)$	2	.999999999	.999999

Sistema: 1	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-API
Inic: Presion de Vapor   R.Mezclado: Clasica		Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:ln(sumYt3/sumXt2)	

Temp= 226.361 °K	Presion= 101.325001 kPa	V/F ideal= .9999
------------------	-------------------------	------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	2	1	.999999
$(1-V/F)^{1/2}$	15	.999997819	1e-04
$(1+V/F)$	2	1	.999999
$(1+V/F)^{1/2}$	2	.999999999	.999999
$\ln(1+V/F)$	2	.999999999	.999999
$\exp(1+V/F)$	2	.999999999	.999999

```
| Sistema: 2      | Calculo: V/F      | Ecuacion: Soave-APL |
| Inic: Ec. de Michel森 | R.Mezclado: Clasica | Metodo Num:Newton U.P.O. |
|          | F.Error:ln(sumY/sumX) |
```

```
| Temp= 214.968 °K      | Presion= 2469.30036 kPa | V/F ideal= .478961661 |
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.0858521928	.462815705
(1-V/F)²/2	6	.0451234691	.462816989
(10-V/F)¹¹/²	15	.0722670882	1e-94
(1+V/F)	6	.0742031167	.462815789
(1+V/F)²/2	6	.0790093557	.462815241
ln(1+V/F)	6	.0834228979	.462816169
exp(1+V/F)	15	.997719659	.462861392

```
| Sistema: 2      | Calculo: V/F      | Ecuacion: Soave-APL |
| Inic: Ec. de Michel森 | R.Mezclado: Clasica | Metodo Num:Newton U.P.O. |
|          | F.Error:sumY-sumX |
```

```
| Temp= 214.968 °K      | Presion= 2469.90036 kPa | V/F ideal= .478961661 |
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.0858158613	.462815672
(1-V/F)²/2	6	.0450952832	.462816956
(10-V/F)¹¹/²	15	.0722670882	1e-94
(1+V/F)	6	.0741708494	.462815573
(1+V/F)²/2	6	.0789739872	.462815204
ln(1+V/F)	6	.0833872173	.462816135
exp(1+V/F)	15	.99772268	.46286124

I Sistema: 2	I Calculo: V/F	I Ecuacion: Soave-API
I Inic: Ec. de Michelsen	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I	I F.Error:sumYt3-sumXt2	I

I Temp= 214,968 °K	I Presion= 2469,90036 kPa	I V/F Ideal= .478961661
--------------------	---------------------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.8645811966	.462814621
(1-V/F)t2	6	.8441231194	.462815927
(10-V/F)t1/2	15	.872267882	1e-94
(1+V/F)	6	.8729318142	.462814623
(1+V/F)t2	6	.8776983039	.462814149
ln(1+V/F)	6	.8820990246	.462815892
exp(1+V/F)	15	.997664874	.462859971

I Sistema: 2	I Calculo: V/F	I Ecuacion: Soave-API
I Inic: Ec. de Michelsen	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I	I F.Error:ln(sumYt3/sumXt2)	I

I Temp= 214,968 °K	I Presion= 2469,90036 kPa	I V/F Ideal= .478961661
--------------------	---------------------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.8653009373	.462815277
(1-V/F)t2	6	.844721122	.46281657
(10-V/F)t1/2	15	.872267882	1e-94
(1+V/F)	6	.8736927766	.462815277
(1+V/F)t2	6	.87847891	.462814886
ln(1+V/F)	6	.8828906895	.462815741
exp(1+V/F)	15	.997729229	.462860788

Sistema: 2	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-AP1
Inic: Presion de Vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:ln(sumV/sumX)	

-----  
| Temp= 214.969 °K | Presion= 2469.90036 kPa | V/F ideal= .417436451 |  
-----

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.8177785944	.462684182
(1-V/F) 92	6	.132919539	.462697297
(10-V/F) 91/2	15	.852128656	1e-04
(1+V/F)	6	.0385688993	.462684182
(1+V/F) 92	6	.8297239533	.462679368
ln(1+V/F)	6	.820609542	.462689199
exp(1+V/F)	15	.9997739	.462534661

Sistema: 2	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-AP1
Inic: Presion de Vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:sumV-sumX	

-----  
| Temp= 214.968 °K | Presion= 2469.90036 kPa | V/F ideal= .417436451 |  
-----

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.8183357786	.462681858
(1-V/F) 92	6	.134188587	.462694769
(10-V/F) 91/2	15	.852128656	1e-04
(1+V/F)	6	.0399478655	.462681857
(1+V/F) 92	6	.8304691769	.462677111
ln(1+V/F)	6	.8212179794	.462686794
exp(1+V/F)	15	.999779377	.462533078

Sistema: 2	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-API
Inic: Presion de Vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:sumVf3-sumXf2	

Temp= 214.968 °K	Presion= 2469.99036 kPa   V/F ideal= .417436451
------------------	---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.9214717512	.46266873
(1-V/F)1/2	6	.141182897	.462660571
(10-V/F)11/2	15	.892128656	1e-84
(1+V/F)	6	.9436746373	.462668729
(1+V/F)1/2	7	.89202611641	.462725949
ln(1+V/F)	6	.8246798973	.46267328
exp(1+V/F)	15	.999822031	.462321483

Sistema: 2	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-API
Inic: Presion de Vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:ln(sumVf3/sumXf2)	

Temp= 214.968 °K	Presion= 2469.99036 kPa   V/F ideal= .417436451
------------------	---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.8187884985	.462679784
(1-V/F)1/2	6	.135213195	.462692319
(10-V/F)11/2	15	.852128656	1e-84
(1+V/F)	6	.8399781759	.462679782
(1+V/F)1/2	6	.8399525043	.462675094
ln(1+V/F)	6	.8217181759	.462684659
exp(1+V/F)	15	.999799015	.462538772

---

Sistema: 2	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-APR
Inic: Ec. de Michelsen	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error: ln(sumY/sumX)	

---



---

Temp= 353.1007 °K	Presion= 2469.90036 kPa	V/F ideal=.9999
-------------------	-------------------------	-----------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.9741574008	.996109982
(1-V/F)12	7	.438993309	.996119136
(10-V/F)11/2	5	.97602785	1e-04
(1+V/F)	6	.9732493041	.996108981
(1+V/F)12	6	.9746633449	.996108962
ln(1+V/F)	6	.9737461573	.996109003
exp(1+V/F)	15	.99307718	.99616954

---

Sistema: 2	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-APR
Inic: Ec. de Michelsen	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error: sumY-sumX	

---



---

Temp= 353.1007 °K	Presion= 2469.90036 kPa	V/F ideal=.9999
-------------------	-------------------------	-----------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.9751839025	.996109207
(1-V/F)12	7	.438581332	.996119373
(10-V/F)11/2	5	.97602785	1e-04
(1+V/F)	6	.9742694485	.996109209
(1+V/F)12	6	.9750879029	.996109188
ln(1+V/F)	6	.9747685486	.99610923
exp(1+V/F)	15	.993410922	.996170285

Sistema: 2	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-FAPI
Inic: Ec. de Michelsen	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:sumYt3-sumXt2	

Temp= 353.1007 °K	Presion= 2469.90036 kPa	V/F ideal=.9999
-------------------	-------------------------	-----------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.9760190024	.996109391
(1-V/F)t2	7	.438239733	.996119557
(10-V/F)t1/2	5	.094862054	1e-04
(1+V/F)	6	.0751003428	.996109391
(1+V/F)t2	6	.0759238055	.996109372
ln(1+V/F)	6	.0756004862	.996109413
exp(1+V/F)	15	.993318678	.996170904

Sistema: 2	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-FAPI
Inic: Ec. de Michelsen	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:ln(sumYt3/sumXt2)	

Temp= 353.1007 °K	Presion= 2469.90036 kPa	V/F ideal=.9999
-------------------	-------------------------	-----------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.0739633489	.996108938
(1-V/F)t2	7	.439067918	.996119092
(10-V/F)t1/2	5	.07602785	.9999
(1+V/F)	6	.0738572314	.996108938
(1+V/F)t2	6	.0738681666	.996108919
ln(1+V/F)	6	.0735548582	.996108956
exp(1+V/F)	15	.99346372	.996169403

```
*****  
| Sistema: 2 | Calculo: V/F | Ecuacion: Soave-API |  
| Inic: Presion de Vapor | R.Mezclado: Clasica | Metodo Num:Newton U.P.O. |  
| F.Error:ln(sumY/sumX) |  
*****
```

```
*****  
| Temp= 353.1087 °K | Presion= 2469.90036 kPa | V/F ideal= .953606274 |  
*****
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	8	7.84853934e-03	.996103193
$(10-V/F)^{1/2}$	5	.0894023446	1e-04
$(1+V/F)$	8	.0120270279	.996103194
$(1+V/F)^{12}$	8	0.48211206e-03	.996102745
$\ln(1+V/F)$	8	9.39149029e-03	.996103659
$\exp(1+V/F)$	15	.999495619	.995542582

```
*****  
| Sistema: 2 | Calculo: V/F | Ecuacion: Soave-API |  
| Inic: Presion de Vapor | R.Mezclado: Clasica | Metodo Num:Newton U.P.O. |  
| F.Error:sumY-sumX |  
*****
```

```
*****  
| Temp= 353.1087 °K | Presion= 2469.90036 kPa | V/F ideal= .953606274 |  
*****
```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	8	5.72216038e-03	.996105185
$(10-V/F)^{1/2}$	5	.0894023446	1e-04
$(1+V/F)$	8	9.40460578e-03	.996105185
$(1+V/F)^{12}$	8	5.00986335e-03	.996105165
$\ln(1+V/F)$	8	7.59880584e-03	.996105205
$\exp(1+V/F)$	15	.999522847	.995593481

Sistema: 2	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-AP1
Inic: Presion de Vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:sumVf3-sumXf2	

Temp= 353.1087 °K	Presion= 2469.90036 kPa	V/F ideal= .953686274
-------------------	-------------------------	-----------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	8	3.64483458e-03	.996105334
(1-V/F)†1/2	5	.112481466	1e-04
(1+V/F)	8	9.3868632e-03	.996105335
(1+V/F)†2	8	5.73160562e-03	.996105317
ln(1+V/F)	8	7.56281623e-03	.996105352
exp(1+V/F)	15	.999554347	.995625809

Sistema: 2	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-AP1
Inic: Presion de Vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:ln(sumVf3/sumXf2)	

Temp= 353.1087 °K	Presion= 2469.90036 kPa	V/F ideal= .953686274
-------------------	-------------------------	-----------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	8	8.72569796e-03	.996102461
(1-V/F)†1/2	5	.0094023446	.9999
(1+V/F)	8	.0130871067	.996102461
(1+V/F)†2	8	9.36152557e-03	.996102034
ln(1+V/F)	8	.0103727521	.996102905
exp(1+V/F)	15	.999500152	.995530694

I Sistema: 3	I Calculo: V/F	I Ecuacion: Soave-API
Iinic: Ec. de Michelsen	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error:ln(sumV/sumX)	I	I

I Temp= 177,85 °K      I Presion= 3039,75003 kPa I V/F ideal= .235389777      I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.942834998	2.74378759e-03
(1-V/F)12	8	.8284877131	3.4828564e-04
(10-V/F)+1/2	3	.8568362889	1e-04
(1+V/F)	6	.213647516	2.74373544e-03
(1+V/F)+12	2	.999999999	.0606921688
ln(1+V/F)	8	.943573333	2.91599892e-04
exp(1+V/F)	15	.999342948	1.90691059e-03

I Sistema: 3	I Calculo: V/F	I Ecuacion: Soave-API
Iinic: Ec. de Michelsen	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error:sumV-sumX	I	I

I Temp= 177,85 °K      I Presion= 3039,75003 kPa I V/F ideal= .235389777      I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.941828954	2.71349585e-03
(1-V/F)+12	8	.8285613156	3.34727862e-04
(10-V/F)+1/2	3	.8568362889	1e-04
(1+V/F)	6	.213252847	2.71349866e-03
(1+V/F)+12	2	.999999999	.0604151338
ln(1+V/F)	8	.943487116	2.85941642e-04
exp(1+V/F)	15	.999338411	1.97583996e-03

---

Sistemas: 3	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-APL
Inic: Ec. de Michelsen   R.Mezclado: Clasica		Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:sumV13-sumX12	

---



---

Temp= 177.85 °K	Presion= 3039.75003 kPa	V/F ideal= .235389777
-----------------	-------------------------	-----------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	4	.927533813	.0114450527
(1-V/F)12	6	4.05533446e-03	3.0488037e-03
(10-V/F)71/2	3	.0568362888	1e-04
(1+V/F)	4	.332081813	.011445106
(1+V/F)12	8	.297595985	1e-04
ln(1+V/F)	6	.933468211	2.70127752e-03
exp(1+V/F)	15	.997995836	1.78426504e-03

---

Sistemas: 3	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-APL
Inic: Ec. de Michelsen   R.Mezclado: Clasica		Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:ln(sumV13/sumX12)	

---



---

Temp= 177.85 °K	Presion= 3039.75003 kPa	V/F ideal= .235389777
-----------------	-------------------------	-----------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	4	.926595813	.0119975921
(1-V/F)12	6	3.78790016e-03	3.14688371e-03
(10-V/F)71/2	3	.0568362888	1e-04
(1+V/F)	4	.335511578	.0119975922
(1+V/F)12	8	.299496093	1e-04
ln(1+V/F)	6	.934347674	2.89461482e-03
exp(1+V/F)	15	.997993303	1.81933065e-03

Sistema: 3	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-APr
Inic: Presion de Vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:ln(sumY/sumX)	

-----  
| Temp= 177.85 °K | Presion= 3039.75003 kPa | V/F ideal= 1e-04 |  
-----

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	9	.420525696	1e-04
(1-V/F)12	7	.108581225	1.37483576e-03
(1-V/F)11/2	2	.999999999	1e-04
(1+V/F)	9	9.67359171e-03	1e-04
(1+V/F)12	9	.0372122042	1e-04
ln(1+V/F)	9	.467314522	1e-04
exp(1+V/F)	13	9.92976383e-03	6.94689978e-04

Sistema: 3	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-APr
Inic: Presion de Vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:sumY-sumX	

-----  
| Temp= 177.85 °K | Presion= 3039.75003 kPa | V/F ideal= 1e-04 |  
-----

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	9	.412579176	1e-04
(1-V/F)12	7	.105263966	1.21921735e-03
(1-V/F)11/2	2	.999999999	1e-04
(1+V/F)	9	8.6723972e-03	1e-04
(1+V/F)12	9	.0345573368	1e-04
ln(1+V/F)	9	.458333060	1e-04
exp(1+V/F)	13	9.85721683e-03	6.67315442e-04

I Sistema: 3	I Calculo: V/F	I Ecuacion: Soave-APPI
I Inic: Presion de Vapor	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I	I F.Error:sumVt3-sumXt2	I

I Temp= 177.85 °K	I Presion= 3039.75003 kPa	I V/F ideal= 1e-04
-------------------	---------------------------	--------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	9	.37171455	1e-04
(1-V/F)t2	9	.0773423298	1e-04
(10-V/F)t1/2	2	.99999999	1e-04
(1+V/F)	9	4.56251857e-03	1e-04
(1+V/F)t2	7	.0219459452	1e-04
ln(1+V/F)	9	.413482063	1e-04
exp(1+V/F)	14	1.26565884e-05	9.00329386e-04

I Sistema: 3	I Calculo: V/F	I Ecuacion: Soave-APPI
I Inic: Presion de Vapor	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I	I F.Error:ln(sumVt3/sumXt2)	I

I Temp= 177.85 °K	I Presion= 3039.75003 kPa	I V/F ideal= 1e-04
-------------------	---------------------------	--------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	9	.392952211	1e-04
(1-V/F)t2	9	.0647942773	1e-04
(10-V/F)t1/2	2	.99999999	1e-04
(1+V/F)	9	6.37760324e-03	1e-04
(1+V/F)t2	9	.0282612783	1e-04
ln(1+V/F)	9	.436662053	1e-04
exp(1+V/F)	14	6.76239674e-07	9.93151683e-04

I Sistemas: 4	I Calculo: V/F	I Ecuacion: Soave-Redlich-Kwong
I Inic: Ec. de Michelsen	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error:ln(sumY/sumX) I		

I Temp= 400 °K	I Presion= 1046.50061 kPa	I V/F ideal=.9999
----------------	---------------------------	-------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	5	.32604407	.500268494
(1-V/F)12	8	.0170302433	.500210011
(10-V/F)91/2	15	.98525169	1e-04
(1+V/F)	5	.003391083	.5002685
(1+V/F)12	5	.127915286	.500056564
ln(1+V/F)	5	.945428992	.50027793
exp(1+V/F)	15	.8398329002	.501549145

I Sistemas: 4	I Calculo: V/F	I Ecuacion: Soave-Redlich-Kwong
I Inic: Ec. de Michelsen	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error:sumY-sumX I		

I Temp= 400 °K	I Presion= 1046.50061 kPa	I V/F ideal=.9999
----------------	---------------------------	-------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	5	.984351729	.500265309
(1-V/F)12	8	.0177661338	.500244998
(10-V/F)91/2	15	.998253463	1e-04
(1+V/F)	5	.069082465	.500265309
(1+V/F)12	5	.0848416798	.500269412
ln(1+V/F)	5	.968336579	.5003033008
exp(1+V/F)	15	.8263583876	.501777651

I Sistema: 4	I Calculo: V/F	I Ecuacion: Soave-AP1
I Inic: Ec. de Michelsen	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I	I F.Error:sunVf3-sumXf2	I

I Temp= 400 °K	I Presion= 1046.50061 kPa	I V/F ideal= .9999
----------------	---------------------------	--------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	5	.261745747	.500269393
(1-V/F)12	6	.8158576948	.500294186
(10-V/F)11/2	15	.965251673	1e-04
(1+V/F)	5	.85689717	.500269995
(1+V/F)12	5	.8750747674	.50019273
ln(1+V/F)	5	.897948715	.500245087
exp(1+V/F)	15	.8285741989	.501483977

I Sistema: 4	I Calculo: V/F	I Ecuacion: Soave-AP1
I Inic: Ec. de Michelsen	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I	I F.Error:ln(sunVf3/sumXf2)	I

I Temp= 400 °K	I Presion= 1046.50061 kPa	I V/F ideal= .9999
----------------	---------------------------	--------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.66468274	.499984208
(1-V/F)12	7	.9324571417	.500413142
(10-V/F)11/2	15	.983261259	1e-04
(1+V/F)	6	.528427541	.499984208
(1+V/F)12	7	.323945241	.499902532
ln(1+V/F)	5	.776733926	.500162464
exp(1+V/F)	15	.121639706	.501076472

I Sistema: 4	I Calculo: V/F	I Ecuacion: Soave-API
Iinic: Presion de Vapor	IR.Mezclado: Clasica	IMetodo Num:Newton U.P.O.
I	I F.Error:ln(sumV/sumX)	I

I Temp= 400 °K	I Presion= 1046.50061 kPa	I V/F ideal= .470841517
----------------	---------------------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	4	.394698718	.500067499
(1-V/F)12	4	.636878978	.500083939
(1-V/F)11/2	15	.994150557	1e-04
(1+V/F)	4	.999427576	.500067499
(1+V/F)12	4	2.39870983e-03	.500062907
ln(1+V/F)	4	.974651278	.500073127
exp(1+V/F)	13	.127200513	.499836192

I Sistema: 4	I Calculo: V/F	I Ecuacion: Soave-API
Iinic: Presion de Vapor	IR.Mezclado: Clasica	IMetodo Num:Newton U.P.O.
I	I F.Error:sumV-sumX	I

I Temp= 400 °K	I Presion= 1046.50061 kPa	I V/F ideal= .478541517
----------------	---------------------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	4	.993368654	.50006717
(1-V/F)12	4	.639161787	.500083592
(1-V/F)11/2	15	.994150547	1e-04
(1+V/F)	4	.99955686	.500067171
(1+V/F)12	4	2.42291434e-03	.500061681
ln(1+V/F)	4	.974717965	.500072594
exp(1+V/F)	13	.127119597	.499838855

---

I Sistema: 4	I Calculo: V/F	I Ecuacion: Soave-API
I Inic: Presion de Vapor	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num: Newton U.P.O.
I	I F.Error:sumYt3-sumXt2	I

---



---

I Temp= 400 °K	I Presion= 1046.50061 kPa	I V/F ideal= .470241517
----------------	---------------------------	-------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	4	.299969347	.500055907
(1-V/F)t2	4	.646043217	.500075026
(10-V/F)t1/2	15	.994150537	1e-04
(1+V/F)	4	.912610643	.5000559064
(1+V/F)t2	4	3.86315889e-03	.500053736
ln(1+V/F)	4	.976196941	.500064545
exp(1+V/F)	13	.124757527	.499932705

---

I Sistema: 4	I Calculo: V/F	I Ecuacion: Soave-API
I Inic: Presion de Vapor	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num: Newton U.P.O.
I	I F.Error:ln(sumYt3/sumXt2))	I

---



---

I Temp= 400 °K	I Presion= 1046.50061 kPa	I V/F ideal= .470241517
----------------	---------------------------	-------------------------

---

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	4	.993625983	.500061333
(1-V/F)t2	4	.644116908	.50007742
(10-V/F)t1/2	15	.994150537	1e-04
(1+V/F)	4	.911776432	.500051341
(1+V/F)t2	4	2.87434677e-03	.5000559063
ln(1+V/F)	4	.973011932	.500066856
exp(1+V/F)	13	.125309700	.499934020

```

I Sistema: 5      I Calculo: V/F      I Ecuacion: Soave-API
I Inic: Ec. de Michelsen  I R.Mezclado: Clasica   I Metodo Num:Newton U.P.O.
I                                         I F.Error:ln(sumY/sumX)  I

```

```

I Temp= 340 °K      I Presion= 3242.40004 kPa  I V/F Ideal= .894170629.  I

```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.0693991941	.861891072
(1-V/F)12	6	9.16785789e-04	.861895014
(10-V/F)11/2	6	.04340299506	1e-04
(1+V/F)	6	.0630162769	.861891072
(1+V/F)12	6	.0680083283	.861890736
ln(1+V/F)	6	.0668195162	.861891346
exp(1+V/F)	15	.9999121119	.862104314
V/F	6	.073121752	.861892992

```

I Sistema: 5      I Calculo: V/F      I Ecuacion: Soave-API
I Inic: Ec. de Michelsen  I R.Mezclado: Clasica   I Metodo Num:Newton U.P.O.
I                                         I F.Error:sumY-sumX  I

```

```

I Temp= 340 °K      I Presion= 3242.40004 kPa  I V/F Ideal= .884170629.  I

```

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.073121752	.861692992
(1-V/F)12	6	5.64040000e-04	.861695721
(10-V/F)11/2	6	.04340299806	1e-04
(1+V/F)	6	.0666130183	.861892993
(1+V/F)12	6	.071745307	.861692627
ln(1+V/F)	6	.0704659181	.861693155
exp(1+V/F)	15	.99999019	.862114621

I Sistemas: 5	I Calculo: V/F	I Ecuacion: Soave-Redlich-Kwong
I Inic: Ec. de Michelsen	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error:sumYt3-sumXt2 I		

I Temp= 340 °K	I Presion= 3242.40004 kPa	I V/F ideal= .884170629
----------------	---------------------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.0756687533	.861894122
(1-V/F)t2	6	3.77683529e-04	.86189789
(10-V/F)t1/2	6	.0434059806	1e-04
(1+V/F)	6	.0690681933	.861894122
(1+V/F)t2	6	.0742943806	.861893364
ln(1+V/F)	6	.0729571649	.861894379
exp(1+V/F)	15	.9999895843	.862121558

I Sistemas: 5	I Calculo: V/F	I Ecuacion: Soave-Redlich-Kwong
I Inic: Ec. de Michelsen	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I F.Error:ln(sumYt3/sumXt2) I		

I Temp= 340 °K	I Presion= 3242.40004 kPa	I V/F ideal= .884170629
----------------	---------------------------	-------------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.0686059469	.861890666
(1-V/F)t2	6	1.00342423e-03	.861894656
(10-V/F)t1/2	6	.0434059806	1e-04
(1+V/F)	6	.0622646305	.861890687
(1+V/F)t2	6	.0672269714	.861890409
ln(1+V/F)	6	.0660573578	.861890364
exp(1+V/F)	15	.999929197	.862102059

I Sistemas: 5	I Calculo: V/F	I Ecuacion: Soave-API
I Inic: Presion de Vapor	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I	I F.Error:ln(sumY/sumX)	I

I Temp= 340 °K I Presion= 3230.49102 kPa I V/F ideal= .843206855 I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.0385183739	.862158602
(1-V/F)12	4	.29827384	.862116141
(10-V/F)11/2	6	.0493633538	1e-84
(1+V/F)	6	.042384625	.862150603
(1+V/F)12	6	.0396707388	.86215037
ln(1+V/F)	6	.0400607896	.862150339
exp(1+V/F)	15	.999713379	.86199239

I Sistemas: 5	I Calculo: V/F	I Ecuacion: Soave-API
I Inic: Presion de Vapor	I R.Mezclado: Clasica	I Metodo Num:Newton U.P.O.
I	I F.Error:sumY-sumX	I

I Temp= 340 °K I Presion= 3230.40102 kPa I V/F ideal= .843206855 I

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.0361553693	.862151714
(1-V/F)12	6	.194364253	.862155076
(10-V/F)11/2	6	.0493633538	1e-84
(1+V/F)	6	.0405133335	.862151714
(1+V/F)12	6	.0373050276	.86215147
ln(1+V/F)	4	.112245123	.862081666
exp(1+V/F)	15	.999725660	.861997345

Sistemas: 5	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-API
Inic: Presion de Vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:sumYt3-sumXt2	

Temp= 340 °K	Presion= 3242.40004 kPa	V/F ideal= .842916113
--------------	-------------------------	-----------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	4	.107634202	.861982458
(1-V/F)t2	6	.192275542	.861972429
(10-V/F) t1/2	6	.0493535826	1e-94
(1+V/F)	4	.114498235	.861982453
(1+V/F)t2	6	.118277978	.861737663
ln(1+V/F)	4	.109113347	.861887319
exp(1+V/F)	15	.999721640	.861716309

Sistemas: 5	Calculo: V/F	Ecuacion: Soave-API
Inic: Presion de Vapor	R.Mezclado: Clasica	Metodo Num:Newton U.P.O.
	F.Error:ln(sumYt3/sumXt2)	

Temp= 340 °K	Presion= 3242.40004 kPa	V/F ideal= .842916113
--------------	-------------------------	-----------------------

Parametro de Iteracion	Iteraciones	Coef. Correlacion	V/F
V/F	6	.8391893658	.861967049
(1-V/F)t2	4	.300493335	.861825729
(10-V/F) t1/2	6	.0493535826	1e-94
(1+V/F)	6	.0436894783	.861867049
(1+V/F)t2	6	.0483442777	.861866316
ln(1+V/F)	6	.0487598654	.861867283
exp(1+V/F)	15	.999769590	.861787673

## **BIBLIOGRAFIA**

- 1.- Stein B.R.  
"Modified R-K Equation of State for Phase Equilibrium Calculations".  
Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.  
Vol.21, No.4, Pags.564-569, 1982.
- 2.- A.P.I.  
"Alternate (Computer) Method for Hydrocarbon-Hydrocarbon and Hydrocarbon-Monohydrocarbon Vapour-Liquid Equilibrium K-values".  
Procedure 8D1.1, 1978.
- 3.- Graboski S.G. and Daubert T.E.  
"A Modified Soave Equation of State for Phase Equilibrium Calculations.  
1. Hydrocarbon Systems".  
Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.  
Vol.17, No.4, Pags.443-447, 1978.
- 4.- Graboski S.G. and Daubert T.E.  
"A Modified Soave Equation of State for Phase Equilibrium Calculations.  
2. Systems Containing CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>S, N<sub>2</sub>, and CO".  
Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.  
Vol.17, No.4, Pags.448-452, 1978.
- 5.- Mathias M.P.  
"A versatile Phase Equilibrium Equation of State".  
Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.  
Vol.22, No.3, Pags.385-391, 1983.
- 6.- Asselineau L., Bogdanic G. and Vidal J.  
"A Versatile Algorithm for Calculation Vapour-Liquid Equilibria".  
Fluid Phase Equilibria.  
Vol.3, Pags. 273-290, 1979.
- 7.- Hirose Y., Kawase Y. and Kudoh M.  
"General Flash Calculation by the Newton-Raphson Method".  
Journal of Chemical Engineering of Japan.  
Vol.3, No.2, Pags.150-152, 1978.
- 8.- Vidal J.  
"Mixing Rules and Excess Properties in Cubic Equations of State".  
Chemical Engineering Science.  
Vol.33, Pags.787-791, 1978.

- 9.- Radosz M., Lin HM. and Chao KC.  
"High-Pressure Vapor-Liquid Equilibria in Asymmetric Mixtures Using New Mixing Rules".  
Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol.21, No.4, Pags.653-657, 1982.
- 10.- Michelsen L.M.  
"The Isothermal Flash Problem.  
Part I. Stability".  
Fluid Phase Equilibria.  
9, Pags.1-19, 1982.
- 11.- Gundersen T.  
"Numerical Aspects of the Implementation of Cubic Equations of State in - Flash Calculation Routines".  
Computers and Chemical Engineering.  
Vol.6, No.3, Pags.245-255, 1982.
- 12.- Jovanović S. and Paunović R.  
"Generating Appropriate Density Values from a Cubic State Equation To Avoid False Unit K Values.  
Application to Distillation Problems".  
Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.  
Vol.23, No.4, Pages.801-805, 1984.
- 13.- Mathias P.M., Boston J.F. and Watanasiril S.  
"Effective Utilization of Equations of State for Thermodynamic Properties in Process Simulation".  
AIChE Journal.  
Vol.30, No.2, Pags.182-186, 1984.
- 14.- Fortune International.  
"The Fortune International 500".  
Vol.112, No.4, Pag.155, 19 Ago.1985.
- 15.- Seader D.J.  
"Curso sobre Simulación y Síntesis".  
Pág.11, 28 Nov.1977, México, D.F.
- 16.- G Jumbir M. and Olujide Z.  
"Effective Ways to Solve Single Nonlinear Equations".  
Chemical Engineering.  
Vol.19, No.15, Pags.51-56, 23 Jul.1984.

- 17.- Reid C.R., Prausnitz M.J. and Sherwood K.T.  
"The Properties of Gases and Liquids".  
Third Edition.  
Mc Graw-Hill, U.S.A., 1977.
- 18.- Holland D.C.  
"Fundamentals of Multicomponent Distillation".  
Mc Graw-Hill, U.S.A., 1981.
- 19.- Treybal E.R.  
"Operaciones de Transferencia de Masa".  
Segunda Edición.  
Mc Graw-Hill, México, 1980.
- 20.- Himmelblau M.D.  
"Principios y Cálculos Básicos en la Ingeniería Química".  
C.E.C.S.A., México, 1977.
- 21.- McCabe L.W. and Smith C.J.  
"Unit Operations in Chemical Engineering".  
Mc Graw-Hill, U.S.A., 1976.
- 22.- Henley J.E. and Seader D.J.  
"Equilibrium Stage Separation Operations in Chemical Engineering".  
John Wiley & Sons, Inc., U.S.A., 1981.
- 23.- Henley J.E. y Rosen W.E.  
"Cálculo de Balances de Materia y Energía".  
Reverté, S.A., España, 1973.
- 24.- Balzhizer E.R. Samuels R.M. y Ellassen O.J.  
"Termodinámica Química para Ingenieros".  
Prentice-Hall International, E.U.A., 1974.
- 25.- Carnahan B., Luther A.H. & Wilkes O.J.  
"Applied Numerical Methods".  
John Wiley & Sons, Inc., U.S.A., 1969.
- 26.- Lledo G.G. y Yunes V.E.  
"Desarrollo de un Algoritmo para Equilibrio Líquido-Vapor en Sistemas -  
Multicomponentes".  
Sesión Técnica 8A-1  
XXIV Convención Nacional del IMIQ  
Monterrey, México, Octubre 1984.

27.- Lledo G.G.

"Depuración Básica y Linealización en Métodos Numéricos Aplicados a la  
Ingeniería Química".  
Sesión Técnica 98-4.  
XXIV Convención Nacional del INIQ  
Monterrey, México. Octubre 1984.