

UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN ANTONIO ABAD DEL CUSCO

FACULTAD DE INGENIERÍA DE PROCESOS

ESCUELA PROFESIONAL DE INGENIERÍA QUÍMICA



TESIS

**DISEÑO DE COLUMNAS DE ABSORCIÓN DE MEZCLAS DILUIDAS
MEDIANTE EL METODO McCabe DESARROLLANDO UN
SOFTWARE EN BASE A K NEAREST NEIGHTBOR Y RANDOM
FOREST**

PRESENTADO POR:

Br. VICTOR HUGO PAREJA PEZO

**PARA OPTAR AL TÍTULO PROFESIONAL
DE INGENIERO QUÍMICO**

ASESOR:

Dr. ANTONIO RAMIRO JESÚS BUENO LAZO

CUSCO – PERÚ

2024

INFORME DE ORIGINALIDAD

(Aprobado por Resolución Nro.CU-303-2020-UNSAAC)

El que suscribe, **Asesor** del trabajo de investigación/tesis titulada:.....
DISEÑO DE COLUMNAS DE ABSORCION DE MEZCLAS DILUIDAS MEDIANTE EL METODO
McCabe DESARROLLANDO UN SOFTWARE EN BASE A K NEAREST NEIGHTBOR
Y RANDOM FOREST

presentado por: **VICTOR HUGO PAREJA PEZO** con DNI Nro.: **44511969** presentado
por: con DNI Nro.: para optar el
título profesional/grado académico de **INGENIERO QUÍMICO**

Informo que el trabajo de investigación ha sido sometido a revisión por **02** veces, mediante el
Software Antiplagio, conforme al Art. 6° del **Reglamento para Uso de Sistema Antiplagio de la
UNSAAC** y de la evaluación de originalidad se tiene un porcentaje de **2**%.

Evaluación y acciones del reporte de coincidencia para trabajos de investigación conducentes a grado académico o
título profesional, tesis

Porcentaje	Evaluación y Acciones	Marque con una (X)
Del 1 al 10%	No se considera plagio.	X
Del 11 al 30 %	Devolver al usuario para las correcciones.	
Mayor a 31%	El responsable de la revisión del documento emite un informe al inmediato jerárquico, quien a su vez eleva el informe a la autoridad académica para que tome las acciones correspondientes. Sin perjuicio de las sanciones administrativas que correspondan de acuerdo a Ley.	

Por tanto, en mi condición de asesor, firmo el presente informe en señal de conformidad y **adjunto** la primera página del reporte del Sistema Antiplagio.

Cusco, **23** de **DICIEMBRE** de 20**24**



Firma

Post firma **ANTONIO RAMIRO JESÚS BUENO LAZO**

Nro. de DNI **23878046**

ORCID del Asesor **0000-0002-6415-3028**

Se adjunta:

1. Reporte generado por el Sistema Antiplagio.
2. Enlace del Reporte Generado por el Sistema Antiplagio: **oid: oid::27259:418030392**

VICTOR HUGO PAREJA PEZO

DISEÑO DE COLUMNAS DE ABSORCION DE MEZCLAS DILUIDAS MEDIANTE EL METODO McCabe DESARROLLANDO...

 Universidad Nacional San Antonio Abad del Cusco

Detalles del documento

Identificador de la entrega

trn:oid:::27259:418030392

Fecha de entrega

20 dic 2024, 11:36 p.m. GMT-5

Fecha de descarga

20 dic 2024, 11:50 p.m. GMT-5

Nombre de archivo

Tesis 2024 - Victor Hugo Pareja Pezo (1).pdf

Tamaño de archivo

6.2 MB

205 Páginas

47,113 Palabras

239,595 Caracteres

2% Similitud general

El total combinado de todas las coincidencias, incluidas las fuentes superpuestas, para ca...

Filtrado desde el informe

- Bibliografía
- Texto citado
- Coincidencias menores (menos de 20 palabras)

Exclusiones

- N.º de coincidencias excluidas

Fuentes principales

- 2%  Fuentes de Internet
- 0%  Publicaciones
- 1%  Trabajos entregados (trabajos del estudiante)

Marcas de integridad

N.º de alertas de integridad para revisión

-  **Caracteres reemplazados**
597 caracteres sospechosos en N.º de páginas
Las letras son intercambiadas por caracteres similares de otro alfabeto.
-  **Texto oculto**
10 caracteres sospechosos en N.º de página
El texto es alterado para mezclarse con el fondo blanco del documento.

Los algoritmos de nuestro sistema analizan un documento en profundidad para buscar inconsistencias que permitirían distinguirlo de una entrega normal. Si advertimos algo extraño, lo marcamos como una alerta para que pueda revisarlo.

Una marca de alerta no es necesariamente un indicador de problemas. Sin embargo, recomendamos que preste atención y la revise.

ÍNDICE

DEDICATORIA	VII
AGRADECIMIENTO	VIII
RESUMEN	IX
ABSTRACT	X
INTRODUCCIÓN	XI
TERMINOLOGÍA	XII
CAPITULO I	1
1. GENERALIDADES	1
1.1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	1
1.1.1. Área de investigación	1
1.1.2. Descripción del problema	1
1.2. PROBLEMAS GENERAL	2
1.3. PROBLEMAS ESPECÍFICOS	2
1.4. OBJETIVOS	2
1.4.1. Objetivo General.	2
1.4.2. Objetivos Específicos.	2
1.5. JUSTIFICACIÓN.	3
1.5.1. Tecnológico	3
1.5.2. Desarrollo	3
CAPITULO II	4
2. MARCO TEÓRICO.	4
2.1. ANTECEDENTES.	4
2.2. CONCEPTOS BÁSICOS Y TEORÍA FUNDAMENTAL.	8
2.2.1. TRANSFERENCIA DE MASA	8
2.2.1.1. Operaciones unitarias de transferencia de masa.	8
2.2.1.2. Transferencia de masa en interfase.	8
2.2.1.3. Curva de equilibrio.	9
2.2.2. LEY DE RAOULT Y HENRY	10
2.2.2.1. Ley de Raoult	10
2.2.2.2. Ley de Henry	11
2.2.2.3. Ley de Raoult vs Ley de Henry	12
2.2.3. EQUILIBRIO ENTRE FASES	12

2.2.3.1.	Relación de equilibrio (K).	12
2.2.3.2.	Mezclas binarias.	13
2.2.4.	EQUIPOS DE TRANSFERENCIA DE MASA	14
2.2.4.1.	Equipo de absorción.	14
2.2.4.1.1.	Columnas de placas, bandejas, platos o etapas.	14
2.2.4.2.	Equipo de desorción.	15
2.2.5.	DATOS OPERATIVOS Y BALANCES DE MASA EN EQUIPOS	16
2.2.5.1.	Proceso y balance de materia en un equipo de absorción.	16
2.2.5.2.	Proceso y balance de materia en un equipo de desorción.	21
2.2.5.3.	Etapas para equipos de absorción y desorción.	23
2.2.5.3.1.	Cascada a contracorriente.	23
2.2.5.4.	Cálculo del número de etapas para columnas.	23
2.2.6.	DIMENSIONAMIENTO DE COLUMNA Y DE ETAPAS.	25
2.2.6.1.	Desbordamiento, diámetro de columna.	25
2.2.6.1.1.	Desbordamiento y diámetro de la bandeja.	25
2.2.7.	MÉTODOS MATEMÁTICOS	29
2.2.7.1.	Polinomios de Lagrange.	29
2.2.7.2.	Polinomios de Newton.	29
2.2.8.	INTELIGENCIA ARTIFICIAL (IA)	30
2.2.8.1.	Algoritmo de aprendizaje supervisado.	31
2.2.8.2.	Algoritmo de aprendizaje no supervisado.	31
2.2.8.3.	Algoritmo de aprendizaje por refuerzo.	31
2.2.8.3.1.	Modelo Random Forest.	32
2.2.8.3.2.	Modelo KNN.	35
2.2.9.	Aplicación de INTELIGENCIA ARTIFICIAL (IA)	41
2.3.	PLATAFORMA DE PROGRAMACIÓN	43
2.3.1.	Android	43
2.3.2.	Android Studio.	44
CAPITULO III		45
3.	METODOLOGÍA	45
3.1.	Métodos de calculo	46
3.1.1.	Cálculos y dimensionamiento para columnas.	46
3.1.1.1.	Método bibliográfico.	46

3.1.1.1.1.	Absorción y Desorción.	47
3.1.1.2.	Método esquematizado.	50
3.1.1.2.1.	Absorción y Desorción.	50
3.2.	Métodos de desarrollo del software - fase de inicio	51
3.2.1.	Casos de uso del Software.	52
3.2.1.1.	Diagrama de casos de uso.	52
3.2.2.	Lista de requerimientos.	53
3.2.2.1.	Casos de uso de alto nivel.	54
3.2.2.2.	Casos de uso expandido.	65
3.2.3.	Estudio de factibilidad.	95
3.2.3.1.	Factibilidad técnica.	95
3.2.3.2.	Factibilidad operativa.	96
3.2.1.	Algoritmos fundamentales	96
3.2.1.1.	Algoritmo – Determinación de Relación XY y grafico de Curva de equilibrio (Datos experimentales – Absorción).	96
3.2.1.2.	Algoritmo – Determinación de Relación XY y grafico de Curva de equilibrio (Ley de Raoult o Ley de Henry – Absorción).	98
3.2.1.3.	Algoritmo – Determinación de Relación XY y grafico de Curva de equilibrio (Datos experimentales – Desorción).	100
3.2.1.4.	Algoritmo – Determinación de Relación XY y grafico de Curva de equilibrio (Ley de Raoult o Ley de Henry – Desorción).	102
3.2.1.5.	Algoritmo – IA para curva de equilibrio, tendencia y ecuación de curva de tendencia. (Datos experimentales para Absorción y Desorción).	104
3.2.1.6.	Algoritmo – IA para gráfico y determinación de valores mínimos – Random Forest. (Para Absorción y Desorción).	110
3.2.1.7.	Algoritmo – IA para determinación de número de etapas. (Absorción y Desorción).	112
3.2.1.8.	Algoritmo – Para el dimensionamiento del equipo (Absorción y Desorción).	115
CAPITULO IV		118
4.	RESULTADOS:	118
4.1.	Cálculo de dimensionamiento de una columna de absorción mediante una relación.	118
4.1.1.	Cálculo bibliográfico manual.	118
4.1.2.	Cálculo del dimensionamiento mediante el uso de la aplicación.	132

4.2.	Cálculo de valores mínimos de equilibrio de una columna de absorción mediante datos experimentales.	137
4.2.1.	Cálculo bibliográfico manual.	137
4.2.2.	Cálculo de los valores mínimos de una columna de absorción mediante el uso de la aplicación.	145
4.3.	CÁLCULO DE ERROR.	150
4.3.1.	Análisis de error.	154
	MANUAL DE USUARIO	155
	CONCLUSIONES	157
	BIBLIOGRAFIA	158
	ANEXOS Y APÉNDICES	160
	ANEXO I – Diagrama de determinación de número de etapas.	160
	APENDICE IA - Subrutina para el cálculo de la determinación de Relación XY y grafico de Curva de equilibrio (Datos experimentales – Absorción).	161
	APENDICE IIA - Subrutina para el cálculo de la determinación de Relación XY y grafico de Curva de equilibrio (Ley de Raoult o Ley de Henry – Absorción).	163
	APENDICE IIIA - Subrutina para el cálculo de la determinación de Relación XY y grafico de Curva de equilibrio (Datos experimentales – Desorción).	165
	APENDICE IVA - Subrutina para el cálculo de la determinación de Relación XY y grafico de Curva de equilibrio (Ley de Raoult o Ley de Henry – Desorción).	167
	APENDICE VA - Subrutina para el cálculo de algoritmos de inteligencia artificial para curva tendencia y ecuación de curva de tendencia. (Datos experimentales para Absorción y Desorción).	169
	APENDICE VIA - Subrutina para el cálculo de algoritmos de inteligencia artificial para gráfico y determinación de valores mínimos – Random Forest. (Para Absorción y Desorción).	178
	APENDICE VIIA - Subrutina para el cálculo de algoritmos de inteligencia artificial para determinación de número de etapas. (Absorción y Desorción).	182
	APENDICE VIIIA - Subrutina para el cálculo de dimensionamiento de equipo (Absorción y Desorción).	184
	APENDICE IXA - Subrutina para uso de k-NN.	186
	APENDICE IXA - Subrutina para uso de k-means.	187
	APENDICE XA - Resultados ChemSep - P1.	189
	APENDICE XIA - Resultados ChemSep – P2.	190
	APENDICE XIIA - Resultados ChemSep – P3.	191
	APENDICE XIII A - Resultados ChemSep – P4.	192
	APENDICE XIVA - Resultados ChemSep – P5.	193

APENDICE XVA - Resultados ChemSep – P7.	194
APENDICE XVIA - Resultados ChemSep – P8.	195

DEDICATORIA

El presente trabajo de tesis está dedicado especialmente a mis padres, Alberto Pareja Salas y María Magdalena Pezo Arce, a quienes les debo todo en la vida, por ser quienes me guían, acompañan y alientan a seguir adelante en todo momento, por encontrar en ellos un ejemplo de perseverancia, dedicación y por inculcarme siempre los principales valores de responsabilidad, respeto y ética en lo personal y en lo profesional.

A mis hermanos que con cariño y paciencia me brindan su apoyo incondicional, me aconsejan, me impulsan a cumplir mis metas y son mi compañía en la alegría de haberlas alcanzado.

A mis hijitos que me inspiran a ser mejor cada día, en búsqueda de que ellos se sientan orgullosos de mí.

A mis mejores amigos que formaron parte del proceso de subir un peldaño más con sus exigencias y buenos consejos.

Victor Hugo Pareja Pezo

AGRADECIMIENTO

Deseo agradecer en primera instancia a Dios, que en un momento de mi vida me regalo una segunda oportunidad de estar aquí presente.

A mis padres que con su infinito cariño y amor, son quienes me regalaron una buena educación académica y personal, me brindan siempre el soporte anímico, creen en mí y me formaron con valores para desenvolverme en la vida.

A toda mi familia que es mi fortaleza.

Al Dr. Antonio R. J. Bueno Lazo por el desprendimiento en compartir sus conocimientos con mi persona en búsqueda de la mejora continua, por brindarme un espacio de su valioso tiempo y por la paciencia que me brindo en el proceso.

Victor Hugo Pareja Pezo

RESUMEN

En el presente trabajo, se realizó un análisis de los datos necesarios para el diseño de columnas de absorción y desorción. Se verificó la necesidad de contar con datos teóricos que puedan facilitar el diseño de las mismas, así como se verificó la necesidad de analizar los datos experimentales que pueden servir para el mismo fin. En la actualidad existen varios cálculos que se desarrollan de forma manual, dado que, en el marco de un análisis exhaustivo de datos, estos se convierten en resultados para los diseños y toma de decisiones.

Basados en la experiencia, se determinó la factibilidad del uso de técnicas de inteligencia artificial como KNN (K Nearest Neighbor), k-means, decision tree y random forest; elaborando algoritmos que simulan aquel análisis que se hace de forma manual, pasándolos a un entorno digital y plasmándolos en una aplicación en el sistema operativo Android (APP). Por tanto, el software desarrollado es de fácil acceso para los usuarios.

Utilizando como herramienta el programa Android Studio v.22.1.1 y aplicando las técnicas y algoritmos de inteligencia artificial; se desarrolló un software para el diseño de columnas de absorción y desorción de mezclas diluidas, utilizando el método McCabe.

Las técnicas de inteligencia artificial que se utilizaron para el desarrollo del software usan métodos matemáticos en su proceso como iteraciones de Lagrange e iteraciones de Newton que potencializan estas herramientas y de esa manera, fue posible generar algoritmos que toman las cuasi decisiones el momento de mostrar los resultados del procesamiento de datos experimentales y otros que servirán para el diseño de estas columnas.

Se concluyó el presente trabajo, logrando desarrollar y validar una herramienta académica de fácil acceso para todo estudiante, profesional y público en general interesado en el diseño de columnas de absorción y desorción en condiciones ideales.

Palabras clave: absorción, desorción, inteligencia artificial, condiciones ideales.

ABSTRACT

In the present thesis work, an analysis of the data necessary for the design of absorption and desorption columns was carried out. The need to have theoretical data that can facilitate the design of the same was verified, as well as the need to analyze the experimental data that can serve the same purpose. Currently, there are several calculations that are developed manually, since, within the framework of an exhaustive analysis of data, these are converted into results for the designs and decision making.

Based on experience, the feasibility of using artificial intelligence techniques such as KNN (K Nearest Neighbor), k-means, decision tree and random forest was determined; developing algorithms that simulate the analysis that is done manually, passing them to a digital environment and capturing them in an application in the Android operating system (APP). Therefore, the developed software is easily accessible to users.

Using the Android Studio v.22.1.1 program as a tool and applying artificial intelligence techniques and algorithms; A software was developed for the design of absorption and desorption columns of dilute mixtures, using the McCabe method.

The artificial intelligence techniques that were used for the development of the software use mathematical methods in their process such as Lagrange iterations and Newton iterations that enhance these tools and in this way, it was possible to generate algorithms that make the quasi-decisions at the time of showing the results of the processing of experimental data and others that will be used for the design of these columns.

The present work was concluded, managing to develop and validate an academic tool that is easily accessible to all students, professionals and the general public interested in the design of absorption and desorption columns under ideal conditions.

Keywords: absorption, desorption, artificial intelligence, ideal conditions.

INTRODUCCIÓN

Durante el desarrollo de las tareas estudiantiles y profesionales de un Ingeniero Químico lo más probable es toparse con cierto tipo de problemas de operaciones unitarias, como es el cálculo de un flujo mínimo para un proceso de absorción o la relación máxima en un proceso de desorción, o la determinación del número de etapas o platos teóricos para dimensionamiento y posterior diseño de estos equipos, o quizás problemas muy similares; es por eso que se tiene la necesidad de encontrar una manera rápida de realizar dichos cálculos, usando herramientas informáticas como una computadora, tanteando datos según diagramas para llegar al objetivo; o en el peor de los casos, los cálculos se realizarían manualmente observando diagramas de distintas bibliografías.

En el mercado informático, es posible encontrar diversos tipos de software, que facilitan los cálculos dentro del campo de la Ingeniería; así hoy en la actualidad existen programas como Excel, Hysys, Aspen, Labview, COCO, Chemsep, Matlab entre otros, que son de aplicación en el área de la Ingeniería Química.

Hoy en día, dado el avance de la tecnología, los sistemas informáticos tienen cada vez más capacidad de resolver algoritmos complejos, que a pasos agigantados tratan de reemplazar a tediosos trabajos humanos, y es en ese sentido que se habla de la inteligencia artificial. Esta puede estar al alcance de todos ya que existe una facilidad de poder contar con equipos catalogados como equipos Smart con sistemas operáticos ANDROID, IOS, Windows Mobile, etc.; que tienen como principal ventaja la portabilidad y la versatilidad.

Por dichos motivos, en el presente trabajo, se desarrollará un software en base a inteligencia artificial, utilizando algoritmos K Nearest Neighbor (KNN) y Random Forest con la finalidad de facilitar el trabajo en el campo de la Ingeniería Química; ya que dicho proceso será de fácil uso y al alcance de la mano de cualquier estudiante y/o profesional.

TERMINOLOGÍA

Glosario de términos generales.

- **Dilución infinita.** - Se considera así cuando en una solución, la concentración del soluto tiende a cero; A medida que la solución se vuelve más diluida.
- **Adiabático.** - En termodinámica se designa como proceso adiabático a aquel en el cual el sistema termodinámico no intercambia calor con su entorno.
- **Bajante.** - Los bajantes son aquellos que se utilizan para guiar el flujo de líquido desde una bandeja superior a una bandeja inferior. El tipo más común segmentario, que puede ser recto o inclinado.
- **Zeotrópicas.** - Son aquellas sustancias que tiene un comportamiento uniforme.
- **Potenciales químicos.** - Velocidad de fuga de moléculas.

Glosario de términos de diseño de software.

- **Diagrama de casos de uso:** es un diagrama que se usa para el análisis del planeamiento de un sistema, para observar los procedimientos entre el usuario y el software; por tanto, muestra la idea general del funcionamiento del sistema.
- **Casos de uso de alto nivel:** describe el procedimiento general requerido por el usuario al sistema directamente; estos son los procesos principales que ejecuta la aplicación.
- **Casos de uso expandidos:** son los procedimientos de forma explícita que realiza el sistema y el usuario, considerando todos los pasos y requerimientos que solicita el software para ejecutar tareas internas y mostrar resultados.

Glosario de términos informáticos.

- **Sistema:** es un conjunto de elementos que trabajan de forma ordenada y dinámica, formando una relación estable en el trabajo de encontrar un objetivo.
- **Sistema de información:** Un sistema de información (SI) está constituido por personas, datos, actividades o técnicas de trabajo y recursos de información; que interactúan entre sí para procesar los datos y que en conjunto están orientados al tratamiento y administración de datos e información, para llegar a un objetivo o cubrir una necesidad.
- **Software:** Elemento tangible de un sistema de información, capaz de interactuar con el usuario para cumplir los objetivos que se implantaron.
- ***.apk:** Este formato comprime la información de la aplicación desarrollada, convirtiendo en un archivo ejecutable, haciendo posible que pueda ejecutarse la aplicación en el sistema operativo Android de cualquier dispositivo.
- **Hiperparametros:** estas son variables de configuración externa que son utilizados para administrar el entrenamiento de los modelos de aprendizaje automático en la inteligencia

artificial; estos datos se configuran de forma manual antes de entrenar un modelo de aprendizaje automático. Entre los ejemplos de hiperparámetros se incluyen el número de nodos y capas de una red neuronal o el número de ramificaciones de un árbol de decisiones.

Los diagramas de Voronoi: Son estructuras dentro de la geometría computacional; almacena información referente a la cercanía entre puntos.

CAPITULO I

1. GENERALIDADES

1.1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

1.1.1. Área de investigación

Este estudio de investigación se enmarca en un proyecto de desarrollo tecnológico, con un enfoque cuantitativo y en un nivel de investigación aplicativo, dado que se deben procesar los datos; y en un tipo de investigación correlacional causal, dado que son procesos secuenciales; lo cual se orienta a la obtención de un producto tangible, en este caso un software en base a inteligencia artificial.

1.1.2. Descripción del problema

En el diseño de equipos de contacto y en específico en los cálculos de flujos de entrada salida, numero de etapas y dimensionamiento de los equipos de absorción y desorción, resultan extensos los cálculos manuales; Sin embargo, se cuenta actualmente con ayuda de las computadoras y softwares que ayudan a conocer estos parámetros; aunque no resultan suficientes ante un cálculo analítico; por ello, el interés para realizar el presente estudio, nace de la inquietud de la siguiente interrogante:

¿De qué manera el uso de algoritmos de inteligencia artificial como KNN y Random Forest son utilizados para automatizar el diseño teórico de columnas de absorción de mezclas diluidas utilizando el método McCabe-Thiele, mediante el desarrollo de un software adaptable para plataformas móviles?

Desafortunadamente, el proceso de diseño de columnas de absorción y desorción; se tratan muchos datos; y para hallar estos datos demanda el uso de tablas, así como cierto orden y cuidado para obtener los resultados correctos. Así mismo cabe resaltar que en la actualidad no existe aún algún software que pueda determinar “intuitivamente” y/o gráficamente estos valores de proceso para el diseño de columnas de absorción y desorción.

Por lo que, el interés de esta investigación se basa en el desarrollo de una aplicación sobre análisis de datos experimentales y/o datos puntuales que describe la distribución de un soluto entre la fase líquida y una fase vapor; que en adelante se describe como valores de equilibrio. Esta aplicación puede aplicarse o servir de apoyo en el desarrollo de los diferentes cursos de operaciones de transferencia de masa que se requiera de la Facultad de Ingeniería de Procesos de la Universidad Nacional de San

Antonio Abad del Cusco y en el área industrial.

1.2. PROBLEMAS GENERAL

¿De qué manera el uso de algoritmos de inteligencia artificial como KNN y Random Forest son utilizados para automatizar el diseño teórico de columnas de absorción de mezclas diluidas utilizando el método McCabe-Thiele, mediante el desarrollo de un software adaptable para plataformas móviles?

1.3. PROBLEMAS ESPECÍFICOS

- **PE1.-** ¿Cómo se pueden aplicar los algoritmos de inteligencia artificial KNN y Random Forest para automatizar el cálculo de las ecuaciones de balance de masa en el diseño de columnas de absorción utilizando el método McCabe-Thiele?
- **PE2.-** ¿Cuál es el procedimiento adecuado para desarrollar un software basado en Java y la plataforma Android Studio que aplique los algoritmos KNN y Random Forest en el diseño de columnas de absorción utilizando el método McCabe-Thiele?
- **PE3.-** ¿Cuál es la precisión y efectividad del software desarrollado, mediante la comparación de sus resultados con datos de referencia y otros programas especializados en el diseño de columnas de absorción?

1.4. OBJETIVOS

1.4.1. Objetivo General.

- Desarrollar algoritmos de inteligencia artificial como KNN y Random Forest para automatizar el diseño teórico de columnas de absorción de mezclas diluidas utilizando el método McCabe-Thiele, mediante el desarrollo de un software adaptable para plataformas móviles.

1.4.2. Objetivos Específicos.

- **OE1.-** Desarrollar algoritmos de inteligencia artificial KNN y Random Forest para automatizar el cálculo de las ecuaciones de balance de masa en el diseño de columnas de absorción utilizando el método McCabe-Thiele.
- **OE2.-** Implementar un procedimiento adecuado para desarrollar un software basado en Java y la plataforma Android Studio que aplique los algoritmos KNN y Random Forest en el diseño de columnas de absorción utilizando el

método McCabe-Thiele.

- **OE3.-** Evaluar la precisión y efectividad del software desarrollado, mediante la comparación de sus resultados con datos de referencia y otros programas especializados en el diseño de columnas de absorción.

1.5. JUSTIFICACIÓN.

1.5.1. Tecnológico

El presente trabajo brinda un alto aporte tecnológico, ya que, en la actualidad se cuenta con una potente herramienta llamada inteligencia artificial, que no es otra cosa que algoritmos que simulan una toma de decisiones para un objetivo buscado; y en función a la posibilidad de utilizar herramientas informáticas se hace uso de estos algoritmos para aplicarlos en la Ingeniería Química. Tal como es el desarrollo de un proceso sistematizado para la determinación de masas, flujos, etapas y dimensionamiento de columnas de absorción y desorción.

1.5.2. Desarrollo

El presente trabajo busca minimizar los tiempos en el cálculo para el diseño de una columna de absorción y desorción de soluciones diluidas mediante el método McCabe-Thiele; por lo cual el proceso sistematizado se desarrolla mediante técnicas y/o algoritmos de inteligencia artificial como es KNN (K Nearest Neighbor) y Random Forest; que son traducidos a un lenguaje de programación. Así mismo cabe resaltar que es de suma importancia, los conocimientos específicos en las materias de Ingeniería Química como son: Operaciones Unitarias I, Operaciones Unitarias III, Métodos Matemáticos, Termodinámica I, Termodinámica II, etc... En las últimas décadas, los sistemas de educación por medio de la computadora o equipos tecnológicos presentaron mayor flexibilidad, accesibilidad y adaptabilidad que los sistemas de educación convencionales; en esta situación esta aplicación facilitaría la solución para las el diseño de estos equipos de contacto y en la simulación de los mismos en las áreas educacionales, e inclusive profesionales. Por lo tanto, se justifica la necesidad e importancia de la presente investigación en el desarrollo de la aplicación para el estudio realizado.

CAPITULO II

2. MARCO TEÓRICO.

2.1. ANTECEDENTES.

En la búsqueda de algunos softwares similares se puede encontrar a Apen Hysys que es un software de simulación de procesos químicos que permite realizar modelos matemáticos de cualquier proceso químico, que pueden ir desde una simple operación unitaria hasta el modelado de plantas industriales completas; así mismo existe "PARACROM" que es un software para cálculo y control de parámetros en columnas cromatográficas y cálculo de etapas en la misma; pero se limita solo a ello, mas no brinda el dimensionamiento de la columna. Otro software que puede simular diseño de equipos es COCO (CAPE-OPEN a CAPE-OPEN) & ChemSep, aunque su limitación es de proporcionar todos los datos necesarios para mostrar tan solo resultados matemáticos de ingeniería.

Softwares que procesan datos también son de nuestro interés, y es así que se puede encontrar "CLARITY" que es un software de código abierto que analiza un cierto comportamiento según los datos ingresados para adaptarse a una posible respuesta, aunque su procesamiento es textual mas no numérico; Otro software de procesamiento de datos para equipos de dos a más componentes en laboratorio es "EZChrom", que es un software que recibe y procesa analíticamente los datos.

Con respecto al temas similares o relacionados con avances tecnológicos de cada época, se cuenta con trabajos que muestran una estrecha relación entre las tecnologías informáticas y la Ingeniería Química; es así que se tienen antecedentes, locales, nacionales e internacionales.

Mora Gómez, Y. (2003) *Simulador de Columnas de Destilación para Sistemas Multicomponentes por el Método del Punto de Burbuja* [Tesis de pregrado, Universidad Nacional de San Antonio Abad del Cusco – Perú].

Trabajo en el cual desarrolla un software con la finalidad de simular el efecto de los diferentes parámetros que interactúan en la destilación de sistemas multicomponentes, en columnas simples o complejas, para una serie de componentes introducidos por el usuario.

Lechuga Canal, W. J. y Cáceres Huambo N. (2006) *Cálculo de Calores Específicos y Latentes de Formación* [Trabajo sin publicar Versión 1.3, Universidad Nacional de San Antonio Abad del Cusco – Perú].

Trabajo en el cual se puede realizar cálculos de valores de entalpía, entropía y entalpía de formación mediante hojas de cálculo mediante el programa utilizado – Microsoft - Excel.

Salas Cernades, H. H. (1984) *Calculo por Computación de equilibrio vapor-liquido Multicomponente* [Tesis de pregrado, Universidad Nacional de San Antonio Abad del Cusco – Perú].

En este trabajo, se desarrolló un método simple y confiable de estimación del equilibrio vapor-liquido binario y multicomponente para el rango completo de información, usando información fácilmente accesible para el sistema en cuestión.

Cruz Araujo, G. y Mora López C. M. (2010) *Simulación del proceso de obtención de bioetanol carburante a partir del etanol azeotrópico obtenido en la planta piloto de alcohol de la FIQ-UNAP* [Tesis de pregrado, Universidad Nacional de la Amazonia Peruana – Iquitos, Perú].

El objetivo del proyecto desarrollado por los autores es utilizar el software Chemcap en la simulación del proceso de obtención de bioetanol carburante a partir del etanol azeotrópico, trabajado en la planta piloto de alcohol de la Facultad de Ingeniería Química de la Universidad Nacional de la Amazonia Peruana.

Arzate Echeverría C. I. (2004) *Software educativo para simular la dispersión de contaminantes atmosféricos* [Tesis de pregrado, Universidad de las Américas Puebla - Cholula, Puebla, México].

Desarrollaron un software educativo para simular la dispersión de contaminantes atmosféricos, programa realizado en el lenguaje de programación Visual Basic 6.0 con el que se calcula la dispersión de contaminantes del aire en algunas condiciones climatológicas.

Colman A., De Turrís S., A., Díaz Valecillos, G. y Márquez Montero N. (2009) Diseño y construcción de un equipo experimental para estudios de acondicionadores de aire por absorción. *Revista Técnica de la Facultad de Ingeniería Universidad del Zulia*, Vol. 32, Número 3, 181-189. <http://ve.scielo.org/pdf/rftiuz/v32n3/art01.pdf>

El aire acondicionado por absorción ha despertado un nuevo interés como alternativa para reducir el consumo de electricidad y es un tema de investigación importante. Este artículo describe una estrategia para evaluar equipos

comerciales sin desmontarlos, así como los componentes y herramientas necesarios para construir un banco de pruebas.

En cuanto a temas relacionados, se pueden tener en consideración los siguientes antecedentes:

Abellán García J., Guzmán, J. S., Sánchez Díaz, J. A. y Rojas Grillo J. (2021) Validación experimental de un modelo de Inteligencia Artificial para la capacidad de absorción de energía del UHPFRC. *Revista de la Facultad de Minas. Universidad Nacional de Colombia. Sede Medellín, Vol. 88, Número 217, 150-159.* <https://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=8300513>

Este artículo realiza la validación experimental de un modelo de Inteligencia Artificial para la capacidad de absorción de energía de tensión del hormigón reforzado con fibra de alto rendimiento.

De la Cruz Posadas, J. G. (2018) *Automatización de la torre de absorción del laboratorio de operaciones unitarias de la Universidad del Valle de Guatemala* [Tesis de pregrado, Universidad del Valle de Guatemala].

<https://repositorio.uvg.edu.gt/xmlui/handle/123456789/3928?show=full%2011017.pdf?sequence=1&isAllowed=y>

El objetivo de este trabajo es la automatización de la torre de absorción del laboratorio de operaciones unitarias de la Universidad del Valle de Guatemala.

Martínez Palacios, J. (2011) *Estrategia de diseño de la distribución en planta y automatización de las tareas de diseño en ingeniería aeronáutica* [Tesis Doctoral, Universidad de Sevilla]. <https://idus.us.es/handle/11441/70785>

Desarrollo de herramientas automatizadas con sistemas macro y expertos para tareas repetitivas de diseño espacial, así como mapeo, análisis y comparación de diferentes estrategias de diseño en un entorno de fabril.

Montenegro Guerrero, V. A. (2022) *Análisis comparativo de algoritmos de Machine Learning para detección de malware en aplicaciones Android* [Tesis de pregrado, Universidad Señor de Sipán – Chiclayo – Perú]. <https://repositorio.uss.edu.pe/bitstream/handle/20.500.12802/10059/Montenegro%20Guerrero%20Victor%20Agustin.pdf?sequence=1&isAllowed=y>

Este estudio propone el uso de modelos de aprendizaje automático para la identificación de malware por características de comportamiento del malware.

Muñoz Segura, C. D. (2016) *Diseño y desarrollo de un aplicativo móvil en la plataforma android studio para la empresa allied electronics & service - Perú* [Tesis de pregrado, Universidad Tecnológica de Pereira – Colombia]. <https://core.ac.uk/download/pdf/84108432.pdf>

Padrón Pérez, O. M. (2001). Validación y verificación de sistemas expertos. *Revista editorial Universitaria de la República de Cuba - Ciencias Matemáticas* (19-1), 72.

<https://link.gale.com/apps/doc/A146892980/AONE?u=anon~c0f2389c&sid=googleScholar&xid=53c97ca2>

El propósito de este artículo es explicar en qué consiste la validación y verificación en el contexto de sistemas expertos, cuándo se realizan estos procesos y qué herramientas se han desarrollado para automatizarlos.

Castillo, E., Gutiérrez, J. M. y Hadi, A. S. (2022) *Sistemas Expertos y Modelos de Redes Probabilísticas* [Tesis de postgrado, Universidad del País Vasco – España].

El objetivo del trabajo es desarrollar varios programas que implementan los algoritmos y metodologías de Inteligencia Artificial como aplicaciones prácticas. (Sidorov, 2011) & (Rodríguez, 2022)

2.2. CONCEPTOS BÁSICOS Y TEORÍA FUNDAMENTAL.

2.2.1. TRANSFERENCIA DE MASA

Según *Cengel y Ghajar (2015)*, la transferencia de masa requiere la presencia de dos regiones con diferentes composiciones químicas, y el proceso de la transferencia de masa de una región de altamente concentrada hacia una de menor concentración. La principal fuerza impulsora para el flujo de fluidos es la diferencia de presión, mientras que para la transferencia de masa es la diferencia de concentración (*Cengel, Y. A. (University of Nevada, Reno) y Ghajar, A. J. (Oklahoma State University, Stillwater), 2015*), pp.836.

Contacto directo de fases miscibles.

Las operaciones que implican el contacto directo de fases miscibles generalmente no se consideran prácticas industriales excepto en circunstancias inusuales debido a la dificultad de mantener gradientes de concentración sin mezclar el fluido; Si se permite que un vapor condensable, como el vapor, se difunda a través de una mezcla de gases, preferentemente llevará consigo uno de los componentes, haciendo así una separación por la operación conocida como difusión por barrido (*Theodore, L. y Ricci, F., 2010*), pp.98.

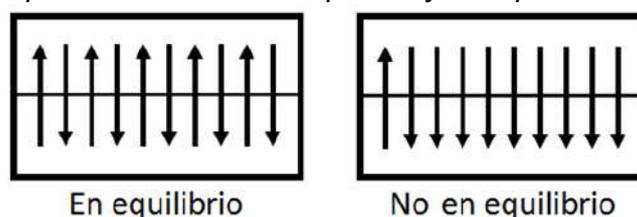
2.2.1.1. Operaciones unitarias de transferencia de masa.

Un grupo de operaciones para la separación de componentes de mezclas está basado en la transferencia de materia desde una fase homogénea a otra. Estos métodos, incluyen técnicas tales como destilación, absorción de gases, deshumidificación, extracción líquido-líquido, lixiviación, cristalización, etc. El tratamiento cuantitativo de la transferencia de materia se basa en balances de materia y energía, equilibrios y velocidades de transferencia de materia y calor (*McCabe, W. L., Smith, J. C. y Harriott, P., 1991*), pp. 521.

2.2.1.2. Transferencia de masa en interfase.

Figura 1.

Representación del proceso en fases de equilibrio y no equilibrio.



La difusión en la transferencia de masa ocurre entre 2 fases como se observa en la figura (*Figura 1*); es decir hay paso de moléculas de la fase 2 a la fase 1 y de la fase 1 a la fase 2, antes del equilibrio y durante el equilibrio.

Operaciones de separación por transferencia de materia de interfase.

Al tener la necesidad de separar una disolución que es homogénea en estado sólido líquido o gaseoso, es preciso tener que formar una segunda fase. Esta segunda fase se forma por medio de un agente energético de separación (**AES**) o por medio de un agente material de separación (**AMS**), tal como un disolvente o un absorbente (*Henley, E. J. y Seader, J. D., 2000*), pp. 7-11.

Cuando se habla de un contacto entre fases y transferencia de masa, se llega al punto de hacer un análisis de concentración.

Concentración

La concentración está en relación de masa (gramos, kilogramos, libras etc.) por unidad de volumen (litros, mililitros, cm³, m³, pies³, etc.). Es importante que el concepto de concentración se amplíe a valores de fracción molar como se muestra a continuación:

$$c_i = \rho x_i \quad (1)$$

Donde: x_i = fracción molar del componente i
 ρ = densidad molar de la mezcla
 c_i = concentración del componente i

La fracción molar es la relación (cociente) del número de moles de uno de los componentes requeridos sobre los moles totales de la mezcla. Por tanto, al sumar las fracciones molares o fracciones de masa siempre se obtendrá la unidad.

2.2.1.3. Curva de equilibrio.

Todos los cálculos de transferencia de materia requieren el conocimiento de las relaciones de equilibrio entre fases. Cuando solamente hay dos fases, como es el caso habitual; los datos de equilibrio se presentan en diagramas temperatura y composición aplicables a presión constante, o bien representando y_i , la concentración de la fase gaseosa, frente a x_i , la concentración de la fase líquida; estas representaciones gráficas reciben el nombre de **curvas de equilibrio**. Para el caso de absorción en el que solamente se transfiere un componente entre las fases, se desprecia la solubilidad del

gas inerte en la fase líquida, así como la presencia en el gas de vapor procedente del líquido. En este caso, hay tres variables: presión, temperatura y las concentraciones del componente que se necesita separar en el líquido y en el gas. La otra concentración está entonces determinada y se puede representar una curva de equilibrio “ y_i vs x_i ”. Todos los puntos situados sobre la curva corresponden a la misma temperatura y presión (McCabe, W. L., Smith, J. C. y Harriott, P., 1991) pp. 524-525.

2.2.2. LEY DE RAOULT Y HENRY

Ciertas leyes trabajan o son funcionales en base al comportamiento de algunas sustancias como por ejemplo $\text{HCl}_{(g)}$, $\text{NH}_{3(g)}$ que tiene solubilidad completa en el agua; o $\text{H}_{2(g)}$, $\text{N}_{2(g)}$, $\text{O}_{2(g)}$, $\text{CO}_{2(g)}$ que tiene baja solubilidad (concentraciones) o al observar que existen gases que se disuelven muy poco, que es cuando se usa la ley de Henry; o puede ser el caso de calcular la presión de vapor de una sustancia cuando está formando parte de una solución ideal, que es cuando se usa la ley de Raoult.

2.2.2.1. Ley de Raoult

Para el componente A de una mezcla, la ley de Raoult se puede expresar como:

$$P_A = p_A^S x_A \quad (2)$$

donde P_A es la presión parcial de A en el vapor, p_A^S es la presión de vapor de A puro a la misma temperatura, y x_A es la fracción molar de A en el líquido. Esta expresión se puede aplicar a todos los componentes de modo que la presión total P esté dada por la suma de todas las presiones parciales. Si la fase gaseosa es ideal, se aplica la ley de Dalton:

$$P_A = y_A P \quad (3)$$

Donde se puede decir:

$$P = \sum_A x_A p_A^S \quad (4)$$

Por lo tanto, la ecuación se puede escribir de la siguiente manera:

$$y_A = x_A \left(\frac{p_A^S}{P} \right) \quad (5)$$

Donde y_A es la fracción molar del componente A en el vapor y P es la presión total del sistema. Las mezclas que obedecen estrechamente la ley de Raoult son aquellas

cuyos componentes son estructuralmente similares. Las mezclas que obedecen la ley de Raoult para todo el rango de composición se denominan soluciones ideales (Theodore, L. y Ricci, F., 2010), pp. 45-48.

Limitaciones:

- Asume que el vapor es un gas ideal, lo cual no es necesariamente el caso.
- La ley de Raoult solo se aplica a soluciones ideales y, en realidad, no existen soluciones ideales.
- La ley de Raoult sólo funciona realmente para solutos que no cambian de naturaleza cuando se disuelven (es decir, no se ionizan ni se asocian).

Sin embargo, hay dos ecuaciones que se pueden usar en lugar de la información real de la presión de vapor: la ecuación de Clapeyron y la ecuación de Antoine ecuación.

La ecuación de Clapeyron está dada por:

$$\ln p^S = A - \left(\frac{B}{T}\right) \quad (6)$$

donde p^S y T son la presión de vapor y la temperatura, respectivamente. Y existen valores específicos para los valores de "A" y "B" en la ecuación de Clapeyron que dependen de la sustancia a tratar (Theodore, L. y Ricci, F., 2010).

La ecuación de Antoine está dada por:

$$\ln p^S = A - B / (T + C) \quad (7)$$

donde p^S y T son la presión de vapor y la temperatura, respectivamente. Existen valores específicos para los valores "A", "B" y "C" que se reemplazan en la ecuación de Antoine que dependen de la sustancia a tratar (Theodore, L. y Ricci, F., 2010).

2.2.2.2. Ley de Henry

Para el componente A de una solución, la ley de Henry puede ser escrita como:

$$P_A = H' x_A \quad (8)$$

Se encuentra que el valor de la constante de la ley de Henry, H' , depende de la temperatura. Las mezclas que obedecen la ley de Henry se conocen como soluciones diluidas ideales. La ecuación anterior también se escribe como:

$$y_A = m_A x_A \quad (9)$$

Donde m_A es una vez más una constante empírica; El uso de la ley de Henry se limita a soluciones gas - líquido diluidas, es decir, líquidos con una pequeña cantidad de gas

disuelto en ellos (*La relación lineal de la ley de Henry no se aplica en el caso de que el gas sea altamente soluble en el líquido*) (Theodore, L. y Ricci, F., 2010), pp. 53-55.

2.2.2.3. Ley de Raoult vs Ley de Henry

Una diferencia básica entre las leyes de Raoult y Henry es que la ley de Raoult se aplica al solvente, mientras que la ley de Henry se aplica al soluto. En soluciones ideales, tanto el soluto y el solvente obedece la ley de Raoult. Sin embargo, en soluciones diluidas ideales, el soluto obedece la ley de Henry mientras que el solvente obedece la ley de Raoult (Theodore, L. y Ricci, F., 2010), pp. 59-60.

2.2.3. EQUILIBRIO ENTRE FASES

Según Pedro J. Martínez (2004) Los datos de equilibrio entre fases son indispensables para el cálculo y diseño de aparatos donde se desarrolla las operaciones de transferencia de materia entre ellas. El número y complejidad de las mezclas que pueden presentarse es tan grande que difícilmente se encontrarán los datos experimentales en la bibliografía, debiéndose recurrir en numerosas ocasiones a su predicción teórica. Para tal motivo es importante tomar en consideración las condiciones termodinámicas para el equilibrio entre fases y los diagramas de equilibrio (Martínez de la Cuesta, P. J. y Rus Martínez, E., 2004), pp. 17-18.

2.2.3.1. Relación de equilibrio (K).

Equilibrio Líquido - Vapor

“ K ” que expresa la tendencia de una especie química a distribuirse entre las fases vapor y líquido de un sistema; este valor está en función de la presión, temperatura, fracción molar de la fase vapor y fracción molar de la fase líquida. (

$$K \rightarrow f(P, T, y_A, x_A))$$

$$K_A = \frac{y_A}{x_A} \quad (10)$$

Donde: K_A = Valor “ K ” del componente “ A ”.

y_A = Fracción mol de “ A ” en la fase vapor.

x_A = Fracción mol de “ A ” en la fase líquida.

Mide la volatilidad de la especie “ A ”, es decir, la preferencia de la especie a difundirse hacia la fase vapor. Cuando la especie “ A ” tendrá una mayor concentración en la fase vapor.

Según la ecuación de Raoult (Ec. 5) y la ecuación de la constante de equilibrio líquido – vapor (Ec. 10), reemplazando se tiene:

$$K_A = \frac{p_A^s}{P} \quad (11)$$

Entonces K_A ; es la presión de saturación del componente “A” (p_A^s) sobre la presión total del sistema.

2.2.3.2. Mezclas binarias.

SISTEMA GAS – LIQUIDO

En un sistema líquido – gas se tiene: (Figura 2)

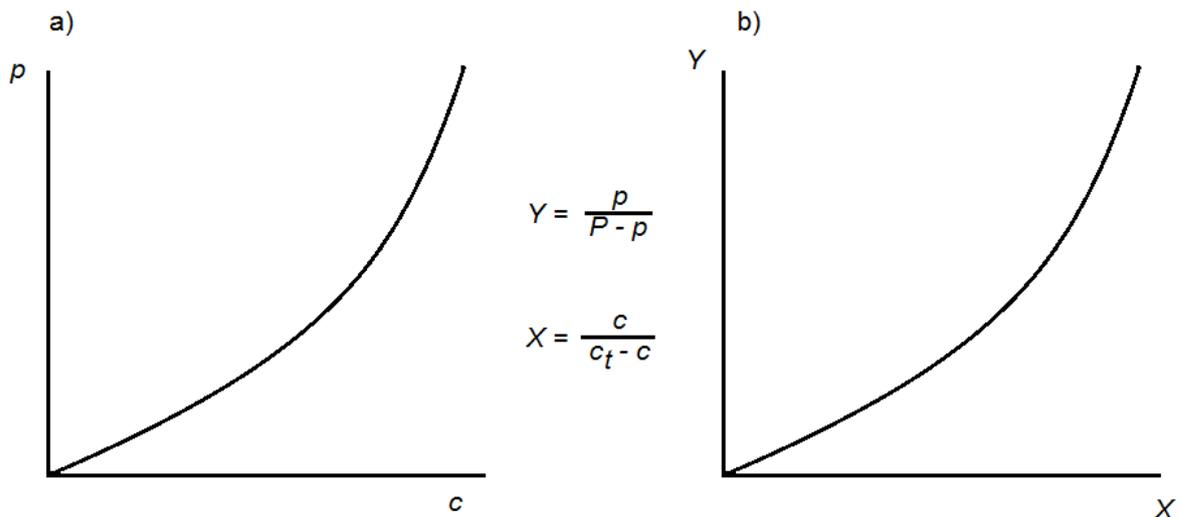
- En diagrama composición (Abscisa) versus presión (Ordenada).
- Diagrama de la razón molar Y (fase gaseosa) versus la razón molar X (fase líquida).

Si cumple la ley de Henry, se tendrá una variación sería lineal: $P = H \cdot c$ (2,14)

Donde: H = Constante de Henry

Figura 2.

Representación gráfica; a) Diagrama p-c; y b) En diagrama X-Y; de la línea de equilibrio para el componente transferible desde la fase gaseosa a la fase líquida.



Nota. Tomado de: (Martínez de la Cuesta, P. J. y Rus Martínez, E., 2004), pp. 23.

Donde: Y = Razón molar en la fase gaseosa.

P = Presión total.

X = Razón molar en la fase líquida.

c = Concentración molar.

p = Presión parcial.

c_t = Concentración total molar.

2.2.4. EQUIPOS DE TRANSFERENCIA DE MASA

También llamados equipos de contacto. Los dispositivos más comunes que se encuentran en los procesos de transferencia de masa son aquellos que permiten procesos de destilación, absorción, desorción, adsorción, extracción, humidificación, secado y cristalización como los más comunes (*Theodore, L. y Ricci, F., 2010*), pp. 187-189. Este trabajo se enfoca en equipos de absorción y desorción o stripping.

2.2.4.1. Equipo de absorción.

El proceso de absorción convencionalmente se refiere al contacto íntimo de una mezcla de gases con un líquido de modo que parte de uno o más de los constituyentes del gas se disuelva en el líquido. Dado que la absorción de gas se relaciona con la eliminación de una o más especies de una corriente de gas mediante el tratamiento con un líquido, es necesario conocer sobre la solubilidad de estos constituyentes en el líquido absorbente. En las operaciones de absorción de gas, el equilibrio de interés es el que existe entre un líquido absorbente no volátil (disolvente) y un gas soluto. La temperatura, la presión y la concentración de soluto en una fase son variables independientes; mientras que la relación de equilibrio es en función de la fracción molar de soluto en el líquido y la fracción molar en el vapor en equilibrio. Por lo tanto, siguen la ley de Henry: (Ec. 9) ($y_A = m_A x_A$).

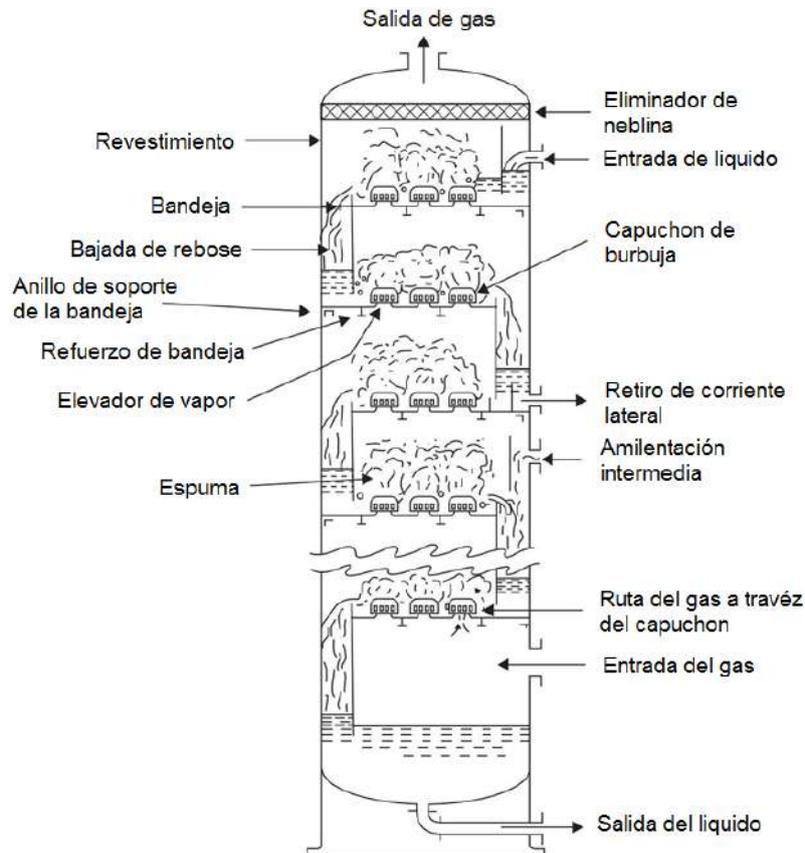
Para el diseño del equipo de absorción se considera los principios de difusión, equilibrio y transferencia de masa. Los principales tipos de equipos de absorción de gas se pueden clasificar en columnas empacadas, columnas de platos (operación por etapas), columnas de pared mojada y columnas con reacción química simultánea. (*Theodore, L. y Ricci, F., 2010*), pp. 187-189.

2.2.4.1.1. Columnas de placas, bandejas, platos o etapas.

Las columnas de placas (también conocidas comúnmente como "columnas de platos") son esencialmente cilindros verticales en los que el líquido y el gas se ponen en contacto de forma escalonada (operación por etapas) en placas o "trampas", como se muestra esquemáticamente en la siguiente figura: (*Figura 3*).

Figura 3.

Columna típica de plato con tapa de burbujeo.



Nota. Tomado de: (Theodore, L. y Ricci, F., 2010), pp. 197.

El efecto general es un contacto múltiple a contracorriente de gas y líquido. El número de placas teóricas (o etapas) depende de la dificultad de la separación a realizar y se determina únicamente a partir de balances de materia y consideraciones de equilibrio. El diámetro de la columna, depende de la cantidad de líquido y gas que fluye a través de la columna. Los principales tipos de placas o platos son en las tapas o placa de burbujas y en las placas tamizadas o perforadas, que son las que se tratan en el presente trabajo.

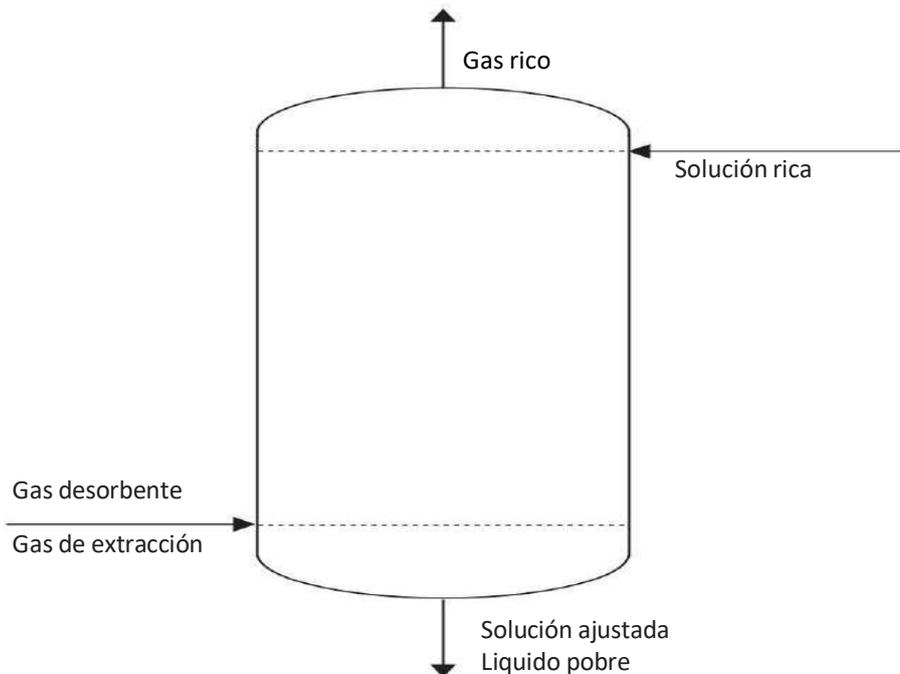
2.2.4.2. Equipo de desorción.

Muy a menudo, una columna de absorción va seguida de un proceso de absorción de líquido en el que el soluto gaseoso se elimina del medio absorbente por contacto con un gas insoluble; esta operación se llama desorción o "stripping" (*Figura 4*) y se utiliza para regenerar el solvente "rico" en soluto para que pueda reciclarse de regreso a la unidad de absorción. La solución rica ingresa a la unidad de extracción y el soluto volátil se elimina de la solución ya sea reduciendo la presión, aumentando la temperatura, usando un gas de extracción (Gas desorbente). Si bien el concepto de

decapado o desorción es opuesto al de absorción, se trabaja de la misma manera; Las diferencias a comparación de un proceso de absorción se observarán por la línea de operación y los datos operativos (Theodore, L. y Ricci, F., 2010), pp. 190-191.

Figura 4.

Equipo de desorción – “Stripping”.



Nota. La figura representa una columna de desorción o stripping, señalando el ingreso y salida de los flujos.

2.2.5. DATOS OPERATIVOS Y BALANCES DE MASA EN EQUIPOS

La evaluación de los datos operativos con lo que se debe trabajar en los procesos que cumplen los equipos de contacto; tienen dependencia del balance de materia para cada uno de ellos; este trabajo se ocupa de los procesos de absorción y desorción.

2.2.5.1. Proceso y balance de materia en un equipo de absorción.

El equilibrio en el que se enfoca un proceso de absorción es el que existe entre un líquido absorbente relativamente no volátil (solvente) y un gas soluble (soluto).

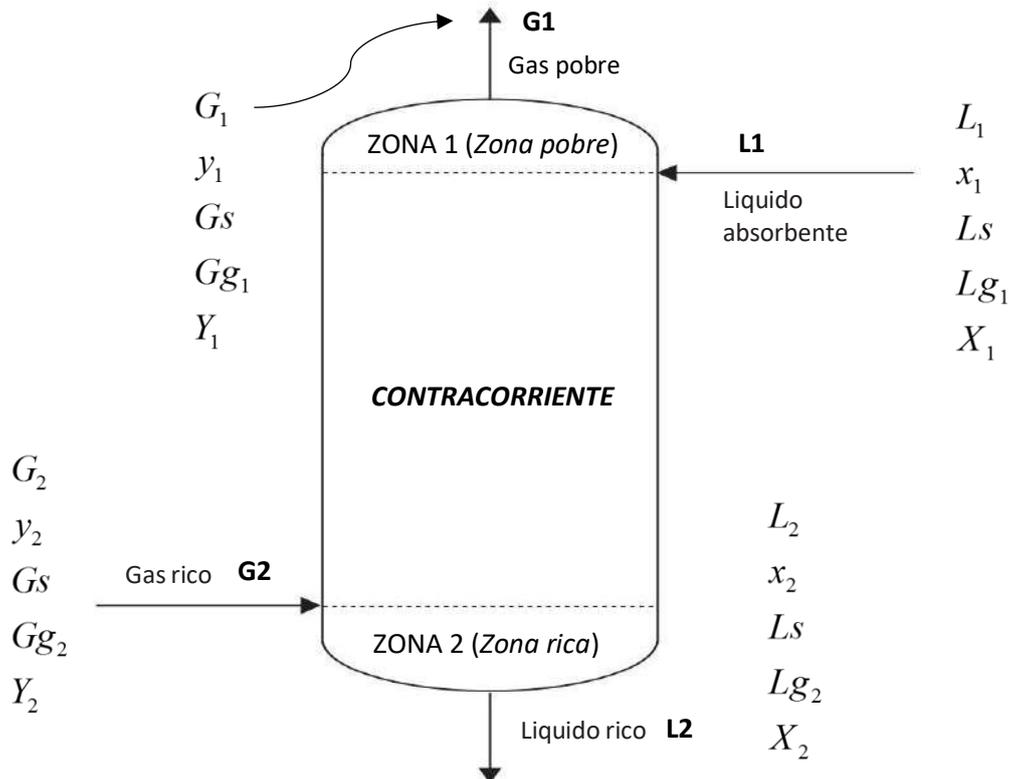
Equipo a contracorriente

Como se observa en la figura (Figura 5). Es importante recalcar que las

composiciones del soluto (x_1, x_2, y_1, y_2) están siempre en un rango de 0 a 1 por ser fracciones molares. En estos procesos la sustancia a tratar es el soluto; por tanto, no se habla del líquido absorbente ni del gas portador. “El líquido absorbente no es soluble en el gas portador” & “El gas portador no es soluble en el líquido absorbente”.

Figura 5.

Equipo de absorción a contracorriente.



Nota. La figura representa una columna de absorción a contracorriente; señalando los datos que se utilizarán en cada una de las corrientes de entrada y salida.

Para el equipo de absorción en contracorriente:

- L_1 = Líquido absorbente más soluto (*poco o nada de soluto*).
- L_2 = Líquido rico en soluto. (*Salida*)
- G_1 = Gas con menor concentración de soluto a la entrada o libre de él.
- G_2 = Gas rico en soluto. (*Entrada*)
- L_s = Líquido absorbente libre de soluto (*Constante a la entrada y salida*).
- G_s = Gas portador libre de soluto (*Constante a la entrada y salida*).
- x_1, x_2 = Composición del soluto en el líquido (Fracción molar).
- y_1, y_2 = Composición del soluto en el gas (Fracción molar).

- $Gg_1, Gg_2 =$ Sóluto en el gas.
- $Lg_1, Lg_2 =$ Sóluto en el líquido.
- $X_1, X_2 =$ Razón o relación molar en el líquido.
- $Y_1, Y_2 =$ Razón o relación molar en el gas. (*Relación: soluto / portador*)

BALANCE DE MATERIA EN EL EQUIPO

Tabla 3.

Balance para el gas.

Flujo gas	G	$G = Gs + Gg$	(12)
Gas portador	Gs	$Gs = G(1 - y)$	(13)
Sóluto en gas	Gg	$Gg = G(y)$	(14)
Fracción soluto en el gas	y	$y = \frac{Gg}{G}$	(15)
Razón o relación	Y	$Y = \frac{Gg}{Gs} = \frac{y}{(1 - y)}$	(16)

Tabla 4.

Balance para el líquido.

Flujo líquido	L	$L = Ls + Lg$	(17)
Líquido absorbente	Ls	$Ls = L(1 - x)$	(18)
Sóluto en líquido	Lg	$Lg = L(x)$	(19)
Fracción soluto en el líquido	x	$x = \frac{Lg}{L}$	(20)
Razón o relación	X	$X = \frac{Lg}{Ls} = \frac{x}{(1 - x)}$	(21)

BALANCE ESTACIONARIO

Para casos que siguen la ley de Henry, la constante de la ley de Henry “ m ”, se define por la ecuación (Ec. 9); Los datos operativos usuales a determinar o estimar para sistemas isotérmicos son las tasas y/o flujos del líquido absorbente y las concentraciones terminales o fracciones molares. Una línea operativa, que describe las condiciones de operación en una columna de flujo a contracorriente, se obtiene:

Tabla 5.*Balance estacionario.*

Balance global.	$Entrada = Salida$	(22)
Balance contracorriente.	$L_1 + G_2 = L_2 + G_1$	(23)
Balance por componente.	$L_1x_1 + G_2y_2 = L_2x_2 + G_1y_1$	(24)
De las Ec. (13) - (18).	$\frac{Ls}{(1-x_1)}x_1 + \frac{Gs}{(1-y_2)}y_2 = \frac{Ls}{(1-x_2)}x_2 + \frac{Gs}{(1-y_1)}y_1$	(25)
Razones Ec. (16) - (21).	$\frac{x_1}{(1-x_1)}Ls + \frac{y_2}{(1-y_2)}Gs = \frac{x_2}{(1-x_2)}Ls + \frac{y_1}{(1-y_1)}Gs$	(26)
Reemplazando.	$X_1Ls + Y_2Gs = X_2Ls + Y_1Gs$	(27)
	$Y_2Gs - Y_1Gs = X_2Ls - X_1Ls$	(28)
	$Gs(Y_2 - Y_1) = Ls(X_2 - X_1)$	(29)
Línea de operación (LO).	$\frac{(Y_2 - Y_1)}{(X_2 - X_1)} = \frac{Ls}{Gs}$	(30)
LO	$(Y_2 - Y_1) = \frac{Ls}{Gs}(X_2 - X_1)$	(31)

La ecuación (Ec. 31), es la ecuación de una línea recta conocida como la línea de operación. Tiene una pendiente de $\frac{Ls}{Gs}$ en las coordenadas "X", y "Y", que pasa por los puntos (X_1, Y_1) y (X_2, Y_2) .

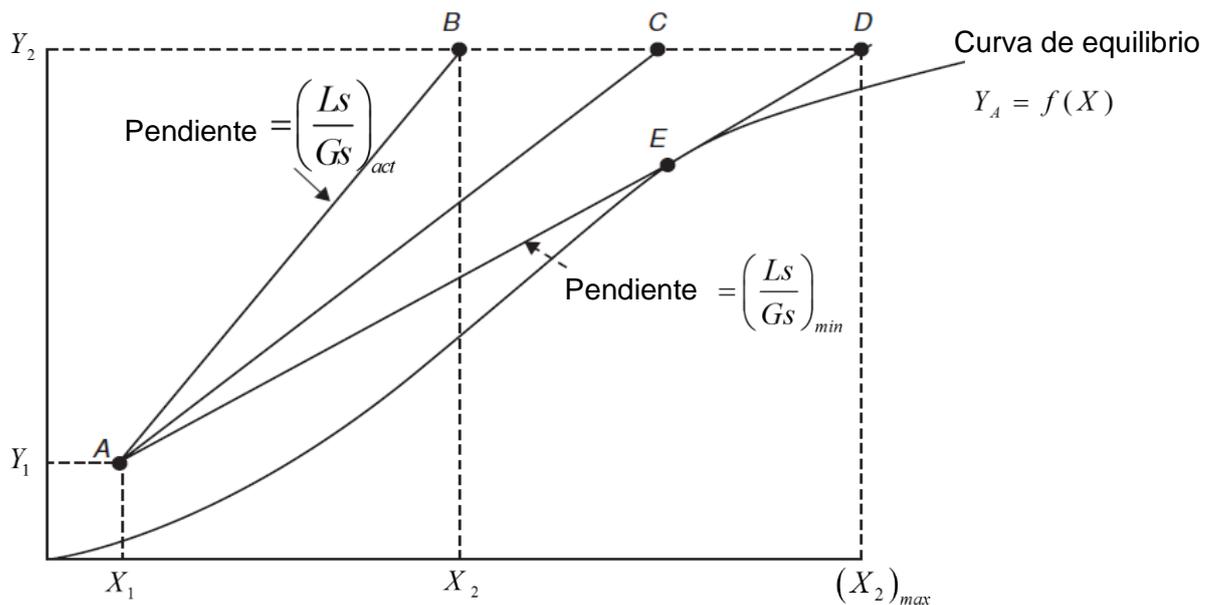
La fórmula de la pendiente (m) de dos puntos que forman una línea es:

$$m = \frac{Y_2 - Y_1}{X_2 - X_1} \quad (32)$$

En el diseño la cantidad de gas a tratar es G , las concentraciones, y_1, y_2 , y la composición del líquido que entra, x_1 , normalmente se fijan según los requisitos del proceso. Sin embargo, la cantidad de disolvente líquido a utilizar está sujeta a alguna elección. Esto se puede resolver estableciendo u obteniendo una relación mínima de líquido a gas (*Theodore, L. y Ricci, F., 2010*), pp. 201-202.

Figura 6.

Línea de operación y curva de equilibrio en equipo de absorción a contracorriente.



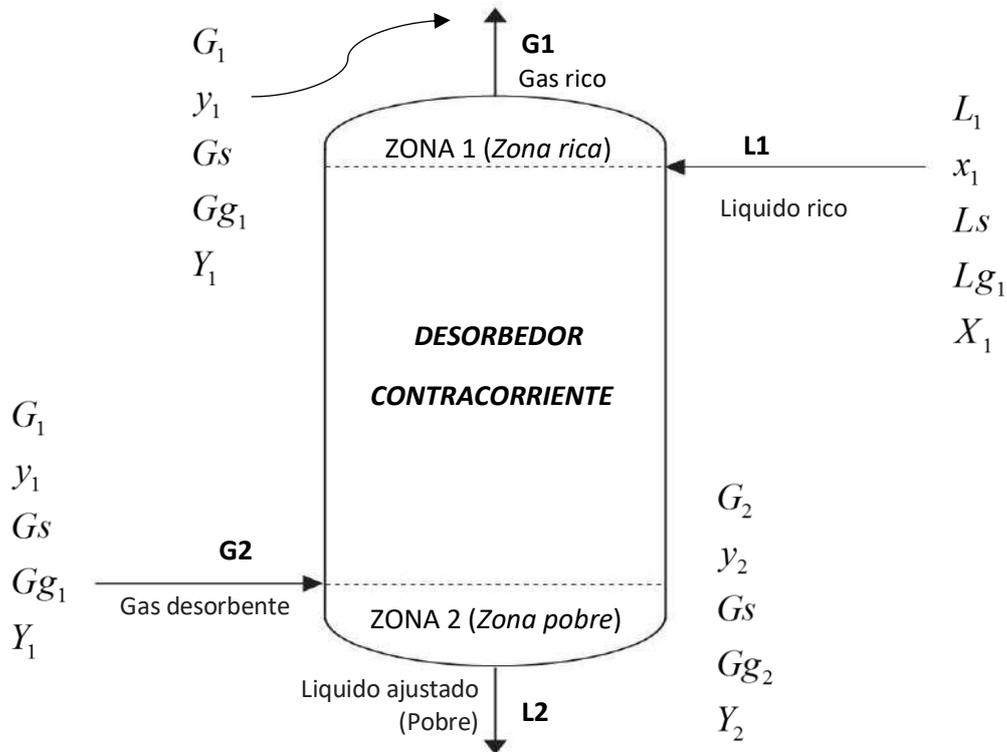
Nota. Tomado de: (Theodore, L. y Ricci, F., 2010), pp. 202.

El líquido mínimo que se puede utilizar, se ubica en la línea de operación \overline{AD} buscando un punto tangente a la curva de equilibrio. La importancia de la relación mínima de líquido a gas radica en el hecho de que la operación en columna se busca como un factor de la relación mínima de líquido a gas. Una situación típica que se encuentra con frecuencia es que la línea operativa real $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{act}$ es $1,5\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min}$ (Theodore, L. y Ricci, F., 2010), pp. 201-202.

2.2.5.2. Proceso y balance de materia en un equipo de desorción.

Figura 7.

Equipo de desorción a contracorriente.



Nota. La figura representa una columna de desorción a contracorriente; señalando los datos que se utilizarán en cada una de las corrientes de entrada y salida.

Para el equipo de desorción en contracorriente:

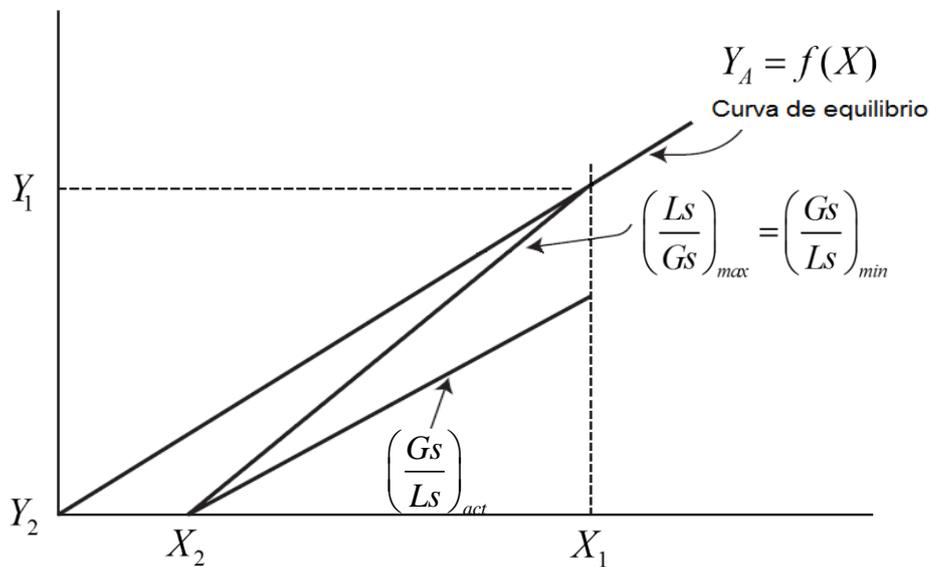
- L_1 = Líquido rico en soluto. (*Entrada*)
- L_2 = Líquido con menor concentración de soluto a la entrada o libre de él.
- G_1 = Gas rico en soluto. (*Salida*)
- G_2 = Gas desorbente (*poco o nada de soluto*).
- L_s = Líquido portador libre de soluto (*Constante a la entrada y salida*).
- G_s = Gas desorbente libre de soluto (*Constante a la entrada y salida*).
- x_1, x_2 = Composición del soluto en el líquido (Fracción molar).
- y_1, y_2 = Composición del soluto en el gas (Fracción molar).
- Gg_1, Gg_2 = Soluteo en el gas.
- Lg_1, Lg_2 = Soluteo en el líquido.

- X_1, X_2 = Razón o relación molar en el líquido.
- Y_1, Y_2 = Razón o relación molar en el gas. (*Relación: soluto / portador*)

Como se desarrolló en la ecuación (Ec. 31), la línea de operación para una unidad de desorción también viene dada por la misma que de absorción; sin embargo, dado que este proceso es lo opuesto a la absorción, el soluto se transfiere del líquido al gas y, por lo tanto, la línea de operación se encuentra por debajo de la curva de equilibrio como se observa en la figura (Figura 8).

Figura 8.

Relación mínima de gas a Líquido o relación máxima de líquido a gas.



Nota. Línea de operación activa y mínima de una columna de desorción. *Tomado de: (Theodore, L. y Ricci, F., 2010), pp. 237.*

Para las operaciones de desorción, ahora se usa una relación mínima de gas a líquido, $\left(\frac{Gs}{Ls}\right)_{min}$, o la relación máxima de líquido a gas, $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{max}$, y corresponde a la tasa de gas mínima requerida para lograr la separación deseada.

La relación mínima de gas a líquido se puede encontrar buscando el punto tangencia o de corte de la curva de equilibrio con la línea de operación. Por lo general, se emplea un valor real de $1,3\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{max}$ para asegurar una separación o desorción eficiente (Theodore, L. y Ricci, F., 2010), pp. 235-237).

2.2.5.3. Etapas para equipos de absorción y desorción.

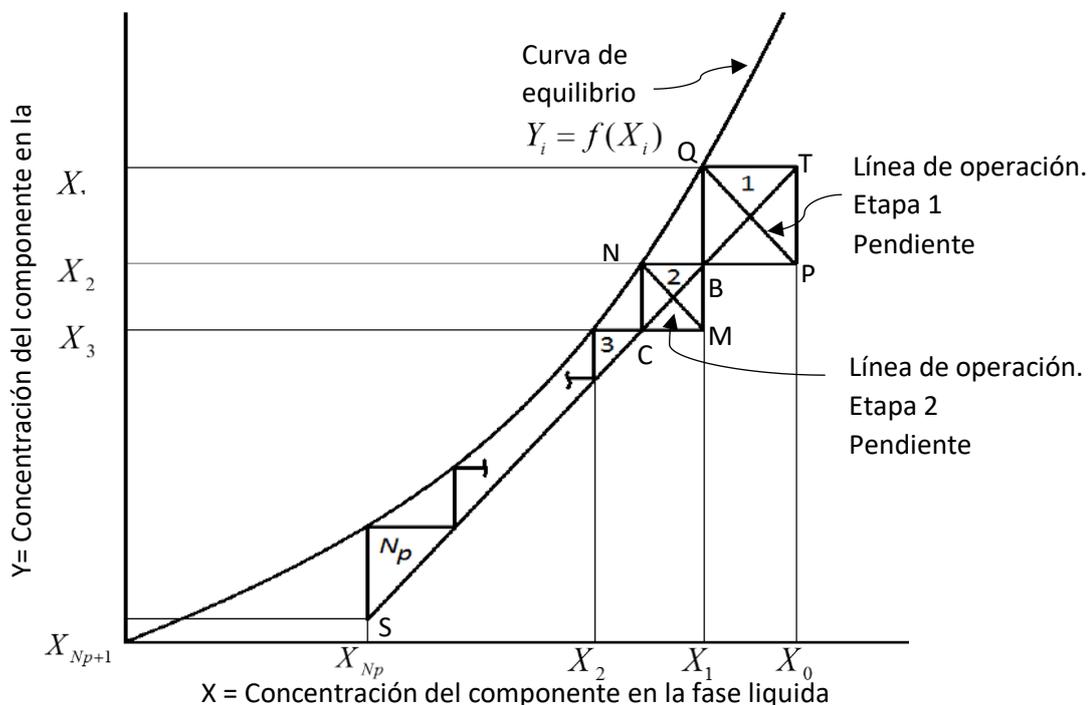
Etapa. – Se define así a una parte del equipo en donde existe un contacto íntimo entre los flujos, con el fin de lograr un gradiente de concentraciones por transferencia de masa. Al grupo de etapas se le denomina cascada.

2.2.5.3.1. Cascada a contracorriente.

En la figura (Figura 9), se muestra un arreglo en cascada de n etapas. El flujo de masa y las composiciones están numeradas según el flujo recibido de cada etapa.

Figura 9.

Cascada a contracorriente en varias etapas.



Nota. Forma gráfica para la determinación de etapas de un equipo de desorción. Tomado de: (Treybal, R. E., 1981), pp. 127.

Para la mayoría de los casos, debido a una línea de operación curva o a la curva de equilibrio, la relación entre el número de etapas, composición y relación de flujos puede determinarse **gráficamente**, como se mostró en la figura (Figura 9).

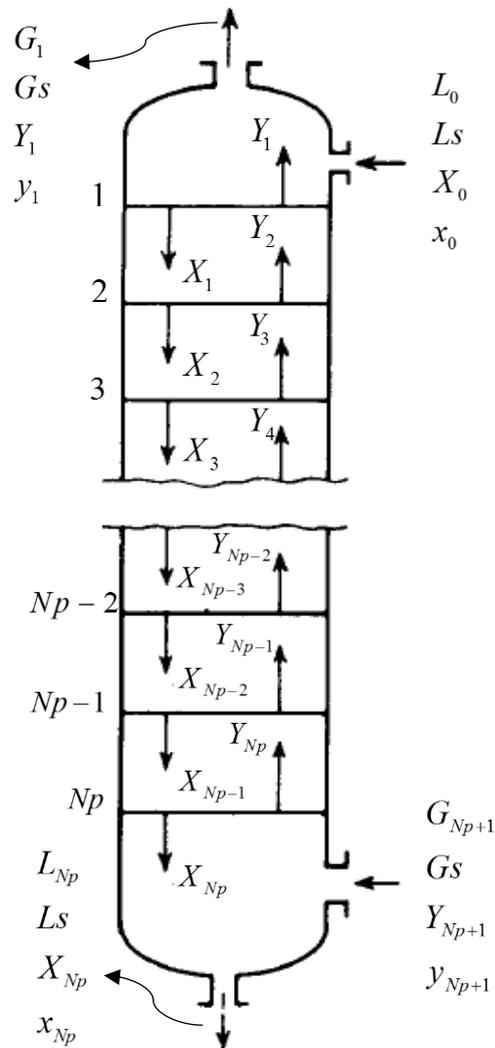
2.2.5.4. Cálculo del número de etapas para columnas.

En la figura (Figura 10) se ilustra el número de etapas ideales que se necesitan para un absorbedor, observando que en cada etapa se puede indicar las composiciones del líquido y del gas. Usualmente, para las columnas de platos o etapas, es conveniente

definir flujos del líquido (L) y del gas o vapor (G) simplemente como moles/h o moles/s, en lugar de basarlas en la sección transversal unitaria de la columna (Treybal, R. E., 1981), pp. 289-291).

Figura 10.

Absorbedor de platos.



Nota. Gráfico esquematizado de una columna de absorción de platos o etapas con la notación de cada corriente. Tomado de: (Treybal, R. E., 1981), pp. 290.

El presente trabajo se enfoca en realizar el cálculo del número de etapas para columnas de absorción y desorción por un análisis de datos respecto a la curva de equilibrio y la línea de operación por el método gráfico mostrado en la figura (Figura 9).

Sin embargo, según Treybal (1981), para mezclas diluidas de gases, que son aquellos casos en que tanto la línea de operación como la curva en el equilibrio pueden considerarse rectas.

2.2.6. DIMENSIONAMIENTO DE COLUMNA Y DE ETAPAS.

En base a las estimaciones del número de etapas y el espaciamiento entre ellas, la altura de la columna se calcula entre la bandeja superior y la bandeja inferior; agregando 4 pies (191.92 cm) sobre la bandeja superior para retirar el líquido arrastrado y 10 pies (304.8 cm) por debajo de la bandeja inferior para los fondos, y de esa manera se estima la altura de la columna (Seader, J. D., Henley, E. J. y Keith Roper, D., 2010), pp. 226).

Con respecto a la altura de la columna; es importante considerar que en casos de alto caudal másico el valor de la altura debería ser como máximo de 35 metros de altura, y con respecto al ancho de la columna, como máximo de 12 metros; y en casos de caudales masicos bajos de destilaciones absorciones o desorciones, se considera una altura máxima de 55 metros, que estaría limitada por la ubicación y el viento (Woods, 2007), pp. 91-96.

2.2.6.1. Desbordamiento, diámetro de columna.

El diseño de la bandeja, determina la bandeja diámetro y división del área transversal total de la bandeja (A_T), en el área de burbujeo (A_b), y en el área del bajante de líquido (A_d), ambos desde la bandeja de arriba a la bandeja de abajo.

2.2.6.1.1. Desbordamiento y diámetro de la bandeja.

Según J. D. Seader (2016), a medida que la tasa de vapor disminuye, el goteo se vuelve excesivo hasta que todo el líquido de la bandeja se vierta sobre la bandeja de abajo. El desbordamiento o la inundación por arrastre da como resultado una pulverización a tasas líquidas bajas, pero progresa hasta convertirse en espuma, a medida que aumenta la tasa de liquidez.

La tasa de arrastre, "e", debe mantenerse por debajo del 10% de "L". Souders y Brown (2010) correlacionaron los datos de inundación por arrastre asumiendo que el transporte de gotas, controla el arrastre.

Souders y Brown (2010) simplificaron la velocidad de inundación a siguiente manera:

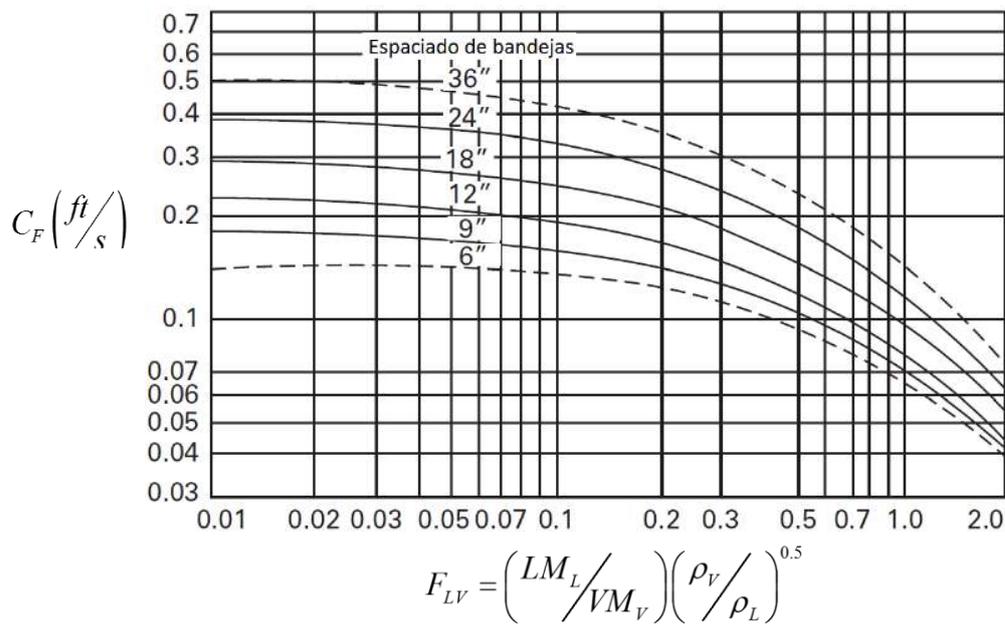
$$u_f = C \left(\frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_V} \right)^{1/2} \quad (33)$$

Donde, el parámetro, C en ft/s se determina a partir de datos de inundación para columnas de tamaño comercial.

Fair (2016) mejoró la correlación de Souders & Brown para producir la correlación general de la figura (Figura 11), que es aplicable a columnas comerciales con tapa de burbuja y platos de tamiz (Seader, J. D., Henley, E. J. y Keith Roper, D., 2016), pp. 161-163).

Figura 11.

Factor de inundación por arrastre de Fair en torre con bandejas.



Nota. Tomado de: (Seader, J. D., Henley, E. J. y Keith Roper, D., 2016), pp. 162.

El parámetro del factor de inundación, C_F , en unidades de ft/s , en la gráfico (Figura 11), depende del espaciamiento de las bandejas y de la relación de abscisas

$$F_{LV} = \left(\frac{LM_L}{VM_V} \right) \left(\frac{\rho_V}{\rho_L} \right)^{0.5} \quad (34)$$

que es una relación de energía cinética utilizada por primera vez por los autores Sherwood, Shipley y Holloway (2016). Tenga en cuenta que LM_L y VM_V son los caudales másicos de líquido y vapor, respectivamente. El valor de C en la ecuación (Ec. 33) se obtiene de la figura (Figura 11) corrigiendo C_F por la tensión superficial, la tendencia a la formación de espuma y la relación entre el área del orificio de vapor A_h y el área en uso de la bandeja A_a , de acuerdo con la relación (Seader, J. D., Henley, E.

J. y Keith Roper, D., 2016), pp. 161, 163.:

$$C = F_{ST} F_F F_{HA} C_F \quad (35)$$

Donde:

$$F_{ST} = \text{Factor de tensión superficial} = \left(\frac{\sigma}{20}\right)^{0.2} \quad (36)$$

$$F_F = \text{Factor de espuma.}$$

$$F_{HA} = 1.0 \text{ para } \frac{A_h}{A_a} \geq 0.10 \text{ y } 5\left(\frac{A_h}{A_a}\right) + 0.5 \text{ para } 0.06 \leq \frac{A_h}{A_a} \leq 0.1. \quad (37)$$

$$\sigma = \text{Tensión superficial del líquido en } \frac{\text{dinas}}{\text{cm}} = 0.001 \frac{\text{N}}{\text{m}}.$$

Para sistemas sin espuma, $F_F = 1.0$, pero para muchos absorbentes, es 0.75 o menos. A_h es el área abierta al vapor cuando éste penetra el líquido en una bandeja. Esta área es el área total de la ranura de la tapa para bandejas con tapa de burbuja, o el área perforada para bandejas de tamiz.

Para etapas de tipo capuchas de burbujeo, el valor de F_{HA} es 1.

El diámetro de la columna (torre), D_T , se basa en una fracción, f , de la velocidad de inundación, u_f , calculada a partir de la ecuación (Ec. 33), utilizando C de la ecuación (Ec. 35), con base en C_F , de la figura (Figura 11). Según la ecuación de continuidad, caudal molar de vapor (V) = velocidad de diseño (fu_f) por área de flujo ($A - A_d$) por densidad molar (ρ_v / M_v):

$$V = (fu_f)(A - A_d) \frac{\rho_v}{M_v} \quad (38)$$

donde A = área transversal total de la columna = $\pi D_T^2 / 4$. Finalmente teniendo la ecuación para el cálculo del diámetro total:

$$D_T = \left[\frac{4VM_v}{fu_f \pi \left(1 - \frac{A_d}{A}\right) \rho_v} \right]^{0.5} \quad (39)$$

Normalmente, la fracción de inundación, f , se considera 0,80. Aun así, se sugiere que

$\frac{A_d}{A}$ se puede estimar a partir del F_{LV} en la figura (Figura 11) mediante:

$$\frac{A_d}{A} = \begin{cases} 0.1 & F_{LV} \leq 0.1 \\ 0.1 + \frac{F_{LV} - 1}{9} & 0.1 \leq F_{LV} \leq 1 \\ 0.2 & F_{LV} \geq 1 \end{cases} \quad (40)$$

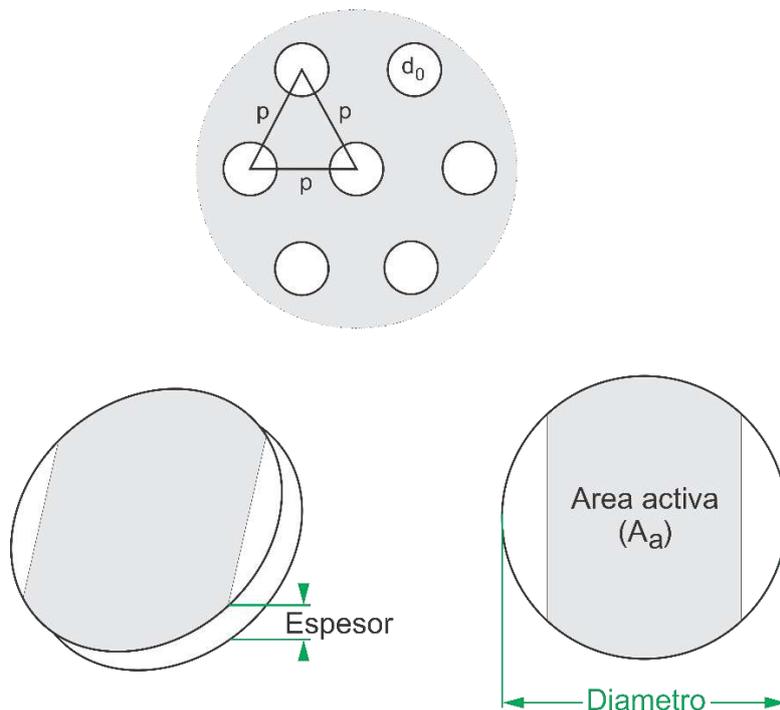
El diámetro de la columna se calcula para los platos superior e inferior, utilizándose el mayor de los dos para toda la columna (Seader, J. D., Henley, E. J. y Keith Roper, D., 2016), pp. 161-163).

Para etapas de tipo plato perforado (Figura 12); Los datos del dimensionamiento de la bandeja son:

- Diámetro de perforación de bandeja (d_0).
- Distancia entre centros de perforación (p').
- Espesor de la bandeja (e).

Figura 12.

Datos específicos de bandeja tamizada.



Nota. Partes fundamentales de una etapa perforada o tamizada.

Por tanto, utilizando los datos específicos de la bandeja se tiene el cálculo de $\frac{A_h}{A_a}$:

$$\frac{A_h}{A_a} = 0.907 \cdot \left(\frac{d_0}{p'} \right)^2 \quad (41)$$

Si no se cuenta con los datos del dimensionamiento de la bandeja, se puede tomar valor estándar que son: $d_0 = 0.5 \text{ cm}$; $p' = 1.5 \text{ cm}$; $e = 0.3 \text{ cm}$ (Seader, J. D., Henley, E. J. y Keith Roper, D., 2016)).

2.2.7. MÉTODOS MATEMÁTICOS

En el presente trabajo se tomó como otro punto fundamental, las bases teóricas de métodos matemáticos para poder aplicarlos en la programación sectorizada en el procesamiento de datos, con el fin de encontrar el proceso de solución para el diseño de los equipos en cuestión.

2.2.7.1. Polinomios de Lagrange.

Según la fórmula de la iteración de Lagrange de grado n , $l_k(x)$ para $k = 1, 2, \dots, n$ definidos por, se tiene:

$$l_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^n \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)} \quad (42)$$

entonces, es fácil ver que $l_k(x_i) = 0$ para todo $i \neq k$ y $l_k(x_k) = 1$. Por tanto; polinomio de interpolación buscado, $p(x)$, se obtiene de la forma siguiente.

$$p(x) = \sum_{k=0}^n f_k l_k(x) \quad (43)$$

$$p(x) = f(x_0)l_0(x) + f(x_1)l_1(x) + \dots + f(x_n)l_n(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k)l_k(x) \quad (44)$$

Y se conocen como **fórmula de Lagrange** para dicho polinomio (Vigueras Campuzano, A., 2016), pp. 103-105).

2.2.7.2. Polinomios de Newton.

Polinomio de interpolación de Newton. - Esta fórmula recursiva que se observa en la tabla (Tabla 6); justifica el nombre de diferencias divididas. A continuación, para obtener el polinomio de interpolación, pues cada diferencia dividida puede ser calculada explícitamente en función de: $f(x_0); f(x_1); \dots; f(x_n)$.

En la primera columna de la tabla (Tabla 6) se tienen los valores de la función f , la segunda por las diferencias divididas de primer orden, y así sucesivamente se pasa de columna en columna aplicando la fórmula. El polinomio de interpolación se puede escribir así:

$$P_n(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + \dots + f[x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0) \dots (x - x_{n-1}) \quad (45)$$

Por tanto, **la fórmula de interpolación de Newton**, es la expresión de $P_n(x)$; resulta muy sencilla de obtenerla a partir de la tabla (Tabla 6) (García Hermida, E., 2018), pp. 5-8).

Tabla 6.

Diagrama progresivo de polinomios de Newton.

x	$f[x_0] = y$	$f[x_0, x_1]$	$f[x_0, x_1, x_2]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$...
x_0	f_0				
		$\frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} \equiv f_{01}$			
x_1	f_1		$\frac{f_{12} - f_{01}}{x_2 - x_0} \equiv f_{012}$		
		$\frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1} \equiv f_{12}$		$\frac{f_{123} - f_{012}}{x_3 - x_0} \equiv f_{0123}$	
x_2	f_2		$\frac{f_{23} - f_{12}}{x_3 - x_1} \equiv f_{123}$		
		$\frac{f_3 - f_2}{x_3 - x_2} \equiv f_{23}$		$\frac{f_{234} - f_{123}}{x_4 - x_1} \equiv f_{1234}$...
x_3	f_3		$\frac{f_{34} - f_{23}}{x_4 - x_2} \equiv f_{234}$		
		$\frac{f_4 - f_3}{x_4 - x_3} \equiv f_{34}$		\vdots	
x_4	f_4		\vdots		
\vdots	\vdots	\vdots			

Nota. Correlación de ecuaciones para utilización de iteraciones de Newton.

2.2.8. INTELIGENCIA ARTIFICIAL (IA)

La inteligencia artificial (IA), se basa en el concepto de reemplazar a la inteligencia humana, profundizando en este concepto se puede decir que es la capacidad de los algoritmos o artilugios artificiales de realizar tareas de una inteligencia humana (Sidorov, 2011).

En este ámbito ya se empezó a hacer programación de aprendizaje que se le conoce como el **Machine Learning o Aprendizaje Automático** que es un proceso en el que la máquina o bot realiza tareas como la hacen los seres humanos, basado en la

información que almacena a cada interacción con el ente que utiliza dicho algoritmo; en esta área se puede nombrar el reconocimiento del habla, identificación de imágenes o hacer algunas predicciones. En estos algoritmos la información sigue otro proceso distinto al normal, ya que en vez de organizar los datos para ser reemplazado en una determinada ecuación definida; el Machine Learning entrena al Bot para que reconozca patrones mediante el uso de muchas capas de procesamiento y tenga un comportamiento de aprendizaje, para así dotar de una predicción que se asemeje a un proceso humano; aun así, se sabe que tan solo esto, es programación cada vez más compleja; Es importante resaltar que el poder que tiene la inteligencia artificial está muy centrado en la matemática, modelos matemáticos y métodos matemáticos (*Rodriguez, 2022*).

2.2.8.1. Algoritmo de aprendizaje supervisado.

En este modelo de algoritmo, se le nutre de muchos datos a los que se llaman etiquetados. Que son datos a los que se sabe la solución que se les plantea y a medida que van procesando esos datos, se almacenan para los próximos usos, a este proceso se le denomina “entrenamiento”. Los problemas que resuelven estos algoritmos son muy variados como por ejemplo el reconocimiento de voz, reconocimiento facial, reconocimiento de huellas digitales, carros automatizados, etc (*Rodriguez, 2022*).

2.2.8.2. Algoritmo de aprendizaje no supervisado.

Este modelo de algoritmo no se entrena con datos etiquetados. Estos se usan para agrupar datos que son parecidos entre sí; el momento de recibir datos, busca similitud y te brinda un resultado. En sí, este algoritmo lo que hace es definir una distancia entre los datos, de tal manera que se automatiza brindando resultados muy a fines (*Ponce Gallegos, J. C., Torres Soto, A., Quezada Aguilera, F. S. y Silva Sprock, A., 2014*).

2.2.8.3. Algoritmo de aprendizaje por refuerzo.

Este modelo de algoritmo actúa por prueba y error, almacena los datos del momento en el que el usuario cumplió el objetivo para de esa manera el algoritmo quedarse con los datos recibidos en el proceso del cumplimiento del objetivo, para utilizarlos en los futuros procesamientos; está de más decir que si los datos no cumplieron el objetivo, el algoritmo utilizara con menor probabilidad estos procesos. Para esta época estos algoritmos son muy utilizados también en aplicaciones científicas.

Las técnicas más utilizadas son:

- Estadística y probabilidad (Regresión lineal, regresión logística, métodos bayesianos, etc.)
- Árboles de decisión (Decision Tree, **Random Forest**, **KNN (K Nearest Neighbor)**, Support Vector Machine, Gradient Boosting, Redes Neuronales, Deep Learning, etc. – estos modelos son modelos supervisados).

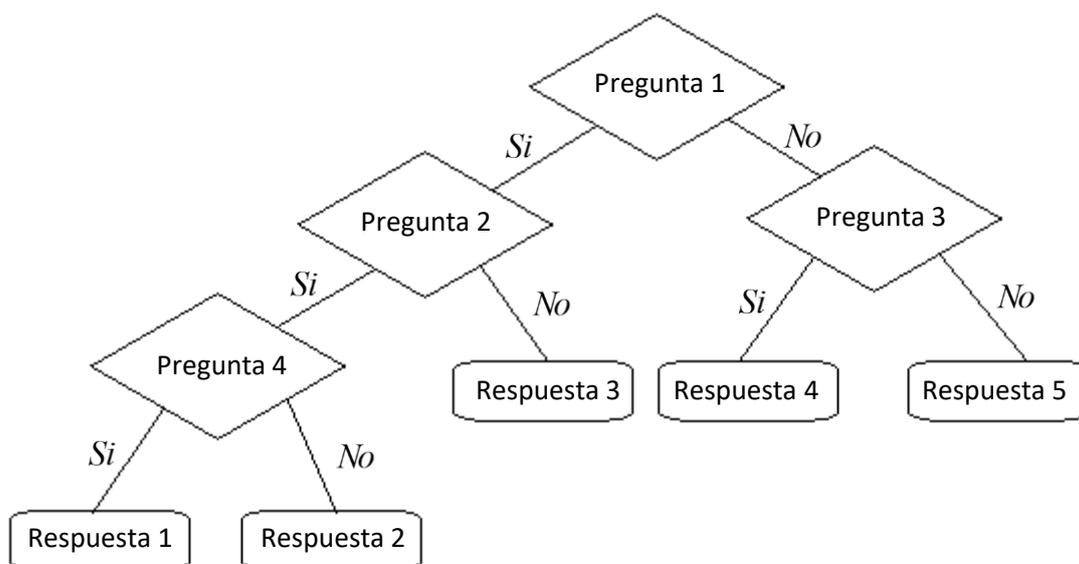
Basados en la experiencia, se determinó la factibilidad del uso de técnicas de inteligencia artificial como KNN (K Nearest Neighbor) y Random Forest para poder reemplazar estos análisis que se hacen de forma manual en un entorno digital plasmados en una aplicación en el sistema operativo que hoy en día es de los más comunes, Android (Rodríguez, 2022).

2.2.8.3.1. Modelo Random Forest.

El modelo Random Forest, es un modelo de aprendizaje automático supervisado. Este tiene la tendencia de quedar overfit (Es la tendencia de entrenar con muchos datos que almacena en memoria) que en sí es un buen proceso ya que trabaja con muchos datos o etiquetas, pero su generalización es imprecisa. Por este motivo que necesita trabajar de la mano con el modelo de “Decision Tree” (Figura 13). Decision Tree es un modelo de orientación, que toma todas las restricciones necesarias para un proceso determinado (IBM, s.f.).

Figura 13.

Representación del modelo Decision Tree.



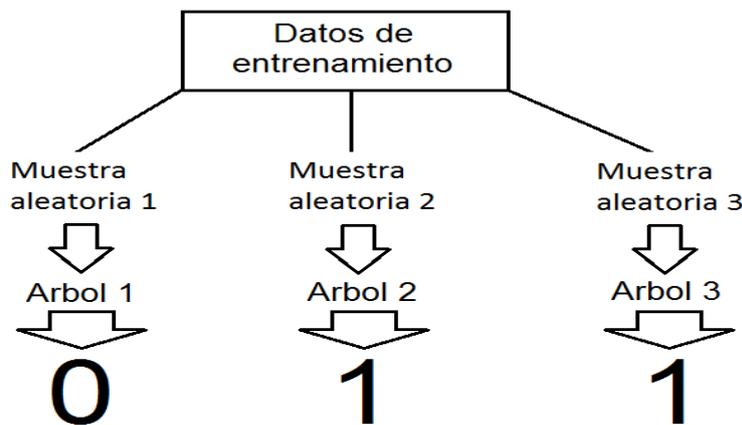
Nota. Representación gráfica de la lógica del modelo decision tree.

Una vez cumplido este proceso se procede a pasar al modelo Random Forest que trata de un conjunto de *Decision Tree* o arboles de decisión concatenados. Eso quiere decir que distintos arboles procesan los datos de distinta manera y de forma aleatoria. Y para la proyección correcta al problema se tiene una mayor cantidad de datos que aproxima a una trayectoria de solución correcta (IBM, s.f.).

Como se puede ver en la figura (Figura 14), el Random Forest no verifica los datos de los otros caminos, cada uno es único y propio de sus resultados; por tanto, muestra distintos resultados para cada árbol, lo que permite que se pueda hacer una comparación de los mismos y poder tomar la decisión que es elegida por mayoría (IBM, s.f.).

Figura 14.

Representación del modelo Random Forest.



Nota. Representación gráfica de la lógica del modelo random forest.

Diferencia entre un árbol de decisión (Decision Tree) y un random forest.-

Para encontrar la diferencia entre estos dos modelos, es importante entender el concepto de clasificación y regresión.

Clasificación

Al utilizar este método el resultado del algoritmo debe ser una clase entre un número finito de clases o resultados. Por ejemplo, al responder preguntas como:

- ✓ ¿Cuáles son los tipos de aprendizaje automático? Supervisado / No supervisado / Semi-Supervisado / Por refuerzo.
- ✓ ¿La curva muestra valor mínimo? – Si / No.
- ✓ ¿La línea de operación coincide con el valor mínimo de la curva de la curva de equilibrio? – Si / No.

- ✓ ¿Es un proceso de absorción? – Si / No.
- ✓ ¿Es un proceso de desorción? – Si / No.
- ✓ ¿Es un comportamiento anómalo? – Si / No.

Se observa que el resultado puedes estar compuesto por n respuestas.

Regresión.

Al utilizar el método de regresión se considera que el resultado debe ser un número; por tanto, se considera que los resultados del algoritmo de aprendizaje automático puede ser un conjunto infinito de posibilidades. Por ejemplo:

- ✓ La concentración de un soluto en medio de un determinado flujo.
- ✓ La fracción molar de un soluto en una solución.
- ✓Cuál es el tiempo en segundos de poder llegar a un destino.
- ✓ El valor del flujo de vapor necesario para la desorción.

Como se observa las respuestas a estos problemas tienen infinitas respuestas.

Técnicas de aprendizaje automático que se pueden utilizar para este método:

- Árboles de decisión (decision trees)
- Bosques aleatorios (random forests)
- Redes neuronales y aprendizaje profundo (deep learning)
- Máquinas de vectores de soporte (support vector machines)
- Regresión lineal y regresión no lineal.

Con el análisis de estas dos técnicas; se concluye que a pesar que algunas técnicas son específicamente para clasificación y otras para regresión, la mayoría de técnicas funcionan para ambos casos.

Diferencia entre un Decision Tree y un Random Forest. - en estos modelos se puede tener en cuenta que los procesos son muy similares pero los resultados generales son diferentes.

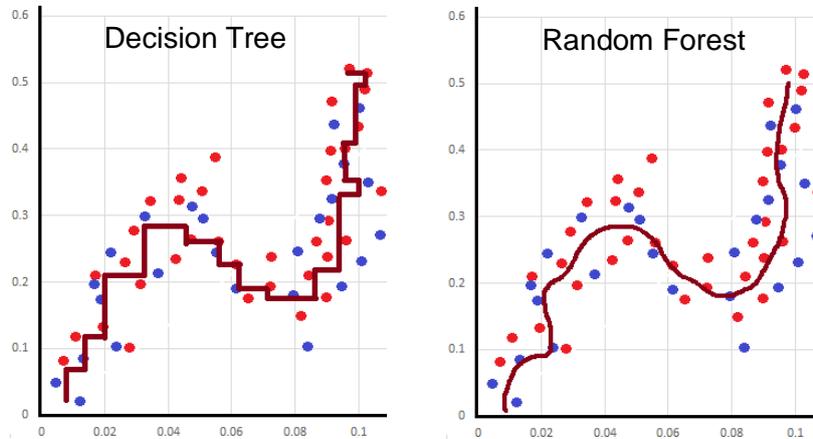
Ejemplo. Se tiene una regresión de 60 datos y se busca una solución por los modelos Decisión Tree y Random Forest.

Como se puede observar en la figura (*Figura 15*) los dos modelos tienen un error entrenamiento similar; pero observando de forma general la suavidad de los datos resultados del Random Forest muestran un resultado mucho mejor en cuanto a

proximidad.

Figura 15.

Diferencia del modelo Decision Tree & Modelo Random Forest.



Nota. El grafico muestra que Decision Tree es una figura rigida en comparación a Random Forest.

Como conclusión ante estos modelos, se puede decir que como ventaja pueden aprender en su algoritmo cualquier correspondencia o relación entre datos de entrada al algoritmo y resultado a predecir. Como desventaja, no son buenos para extrapolar porque no siguen un modelo conocido.

En conclusión, este modelo de Random Forest tiene la capacidad de procesar y combinar los resultados de sus árboles para obtener un resultado final más confiable.

2.2.8.3.2. Modelo KNN.

El (K-Nearest Neighbors) que es llamado también algoritmo k-NN o K-NN o “k vecinos más cercanos”, es un método clasificador de aprendizaje supervisado, que utiliza la cercanía de los datos para hacer predicciones en base a los datos vecinos. Este tipo de algoritmos se utiliza en problemas de regresión y también de clasificación; se enfoca en la suposición de ciertos valores encontrados en base al análisis de la proximidad de los datos vecinos con el fin de mimetizar este nuevo dato en el trayecto de existencia mediante K-means. El modelo K-NN, sigue siendo uno de los primeros algoritmos que uno aprende en ciencia de datos debido a su precisión. Se utiliza comúnmente para sistemas de reconocimiento de patrones, extracción de datos, detección de intrusiones y más.

Con los conceptos detallados, para el presente trabajo se hará un análisis de los

datos en función al modelo de regresión, dado que los datos a tratar son netamente numéricos. El objetivo principal como lo que ya fue explicado es identificar los vecinos más cercanos de un punto determinado.

Para determinar los parámetros necesarios en este modelo, es necesario enfocarse en las **métricas de distancia** que indica que lo esencial es determinar cuáles son los puntos conocidos más cercanos al punto en consulta. Estas métricas de distancia brindan ayuda al formar límites de decisión, que hacen que los valores en consulta se encuentren en ciertas regiones (Rajaguru, H. y Kumar Prabhakar, S., 2017).

Distancia métrica Euclidiana (EU)

Ésta es la forma más habitual de calcular la distancia entre dos objetos. Examina la raíz de las diferencias cuadradas entre las coordenadas de un par de objetos y se define mediante la siguiente ecuación (Rajaguru, H. y Kumar Prabhakar, S., 2017), pp. 34.

$$d_{st} = \sqrt{\sum_{j=1}^n (x_{sj} - y_{tj})^2} \quad (46)$$

Este método es de fácil entendimiento además que es de uso de lógica en el proceso de encontrar los valores necesarios en la interpolación de los valores experimentales.

Distancia de Manhattan

Este método mide el valor absoluto entre dos puntos.

$$d(x, y) = \left(\sum_{i=1}^n |x_i - y_i| \right) \quad (47)$$

Distancia de Minkowski

Se muestra una forma generalizada de las métricas de distancia euclidiana y de Manhattan. Donde $(p = 1)$, para Manhattan y $(p = 2)$ para Euclidiana.

$$d = \left(\sum_{i=1}^n |x_i - y_i| \right)^{1/p} \quad (48)$$

Distancia de Hamming

Se utiliza con vectores booleanos (Solo tiene 2 valores), identificando los puntos

donde los valores no coinciden.

$$D_H = \left(\sum_{i=1}^n |x_i - y_i| \right)$$

$$x = y \quad D = 0$$

$$x \neq y \quad D \neq 1$$
(49)

Por ejemplo:

Vector 1	1	0	1	1	0	0	1	1	1
Vector 2	1	0	0	1	0	0	0	1	1

De las siguientes cadenas (Vector 1 & Vector 2), la distancia de Hamming sería 2, ya que solo dos de los valores son diferentes. En informática esta distancia de Hamming es utilizada en el procesamiento de errores, y es otro motivo más para poder entender que este tipo de métodos son utilizados en el entrenamiento de la inteligencia artificial (*J. Íñigo G., J.M. Barceló O., Ll. Cerdá A., E. Peig O., L. Abella i Fuentes, G.Corral i Torruella, 2008*), pp. 133).

Definir k.

El valor k en el algoritmo K-NN define cuántos vecinos se verificarán para determinar la clasificación de un punto de consulta del valor específico. Definir k puede ser un acto de equilibrio, ya que diferentes valores pueden conducir a un sobreajuste o un desajuste. Los valores más bajos de k pueden tener una varianza alta, pero un sesgo bajo, y valores más grandes de k pueden generar un sesgo alto y una varianza más baja. Recordar que la varianza es una medida de dispersión que representa la variabilidad de una serie de datos respecto a su media; es por eso que el objetivo final se determina mediante datos de entrenamiento captados de un algoritmo de aprendizaje automático (Machine Learning), por este motivo es fácil suponer que existe algún valor de cambio o varianza. Lo ideal sería que no cambien demasiado de un dato a otro, a esto se le llama entrenamiento. Por ello que podemos decir que el algoritmo es excelente para hacer un mapeo entre los datos de ingreso y los de salida.

Los algoritmos de aprendizaje automático que tiene una varianza grande, están relacionados directamente con los valores de entrenamiento ingresados, por tal motivo que se debe colocar un cortafuegos para determinar que el valor es erróneo. Por ello es que se dice que el método sirve para hacer un mapeo general de los datos.

Si los datos que se deben ingresar al algoritmo de aprendizaje automático, son muy flexibles es lógico suponer que tiene una gran variación.

- A **varianza baja**; sugieren pequeños cambios en la estimación de la función de buscar el objetivo. (Métodos de regresión lineal, análisis discriminante lineal y regresión logística).
- A **varianza alta**; sugieren grandes cambios en la estimación de la función de buscar el objetivo. (Random Forest, KNN (K Nearest Neighbor), Support Vector Machine)

(J. Íñigo G., J.M. Barceló O., Ll. Cerdá A., E. Peig O., L. Abella i Fuentes, G.Corrál i Torruella, 2008)).

El sesgo en aprendizaje automático es cuando se produce resultados de forma sistemática; por tanto, la existencia de estos es dado que los datos para el entrenamiento, son aportados sin ninguna restricción, por ser datos experimentales y sujetos a la existencia de un error humano.

Después de hacer el análisis de la varianza y el sesgo, continuamos con la elección de k , que dependerá en gran medida de los datos de entrada, ya que los datos con más valores atípicos probablemente funcionarán mejor con valores más altos en función de k . (En general, se recomienda tener un número impar para k , para así evitar empates en la clasificación, y las tácticas de validación cruzada pueden ayudarlo a elegir el k óptimo para su conjunto de datos.)

Como un ejemplo sencillo; se puede usar Python que es un lenguaje de programación que permite trabajar más rápidamente e integrar los sistemas de forma eficaz.

k-vecinos más cercanos y Python

Para profundizar más sobre el algoritmo k-NN usando Python y scikit-learn (también conocido como sklearn). El siguiente código es un ejemplo de cómo crear y predecir con un modelo KNN:

```
sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier

model_name = 'K-Clasificador de vecino más cercano'

knnClassifier = KNeighborsClassifier(n_neighbors = 5, metric = 'minkowski', p=2)

knn_model = Pipeline(steps=[('preprocessor', preprocessorForFeatures), ('clasificador', knnClassifier)])
```

```
knn_model.fit(X_train, y_train)
```

```
y_pred = knn_model.predict(X_test).
```

En el lenguaje de programación Java, no se tiene una librería de algoritmos K-NN, por tanto, el proceso es de algoritmo manual.

Ventajas y desventajas del modelo K-NN

Entre las ventajas se tiene:

- Fácil implementación.
- Se adapta fácilmente (Dado que los datos a utilizar en el algoritmo se guardan en memoria durante el proceso).
- Pocos hiperparámetros (K-NN solo necesita el valor de k y la métrica de la distancia entre datos).

Entre las desventajas se tiene:

- No escala como debe ser (El proceso es instantáneo, pero ocupa mucha memoria, en comparación a procesos de aprendizaje no supervisados)
- Sobredimensionalidad (No trabaja fácilmente con entrada de datos de grandes dimensiones).
- Sobreajuste (Los valores de k, afectan directamente al comportamiento del modelo).

(J. Íñigo G., J.M. Barceló O., Ll. Cerdá A., E. Peig O., L. Abella i Fuentes, G.Corrall i Torruella, 2008)).

K-means

La agrupación en clústeres K-means es un algoritmo de aprendizaje no supervisado que se utiliza para la agrupación de datos y que agrupa puntos de datos no etiquetados en grupos o clústeres.

Es uno de los métodos de agrupamiento más populares utilizados en el aprendizaje automático. A diferencia del aprendizaje supervisado, los datos de entrenamiento que utiliza este algoritmo no están etiquetados, lo que significa que los puntos de datos no tienen una estructura de clasificación definida.

Si bien existen varios tipos de algoritmos de agrupamiento, incluidos los

exclusivos, superpuestos, jerárquicos y probabilísticos, el algoritmo de agrupamiento k-means es un ejemplo de un método de agrupamiento exclusivo o "duro". Esta forma de agrupamiento estipula que un punto de datos puede existir en un solo grupo. Este tipo de análisis de conglomerados se utiliza comúnmente en la ciencia de datos para la segmentación del mercado, la agrupación de documentos, la segmentación de imágenes y la compresión de imágenes. El algoritmo K-means es un método ampliamente utilizado en el análisis de conglomerados porque es eficiente, efectivo y simple.

K-means es un algoritmo de agrupamiento iterativo basado en centroides que divide un conjunto de datos en grupos similares según la distancia entre sus centroides. El centroide, o centro del grupo, es la media o la mediana de todos los puntos dentro del grupo, según las características de los datos.

El algoritmo consta de tres pasos:

- Inicialización: una vez escogido el número de grupos, k , se establecen k centroides en el espacio de los datos, por ejemplo, escogiéndolos aleatoriamente.
- Asignación objetos a los centroides (Clusters): cada objeto de los datos es asignado a su centroide más cercano.
- Actualización centroides: se actualiza la posición del centroide de cada grupo tomando como nuevo centroide la posición del promedio de los objetos pertenecientes a dicho grupo.

Se repiten los pasos 2 y 3 hasta que los centroides no se mueven, o se mueven por debajo de una distancia umbral en cada paso; es así que el algoritmo K-means resuelve un problema de optimización, siendo la función a optimizar (minimizar) la suma de las distancias cuadráticas de cada objeto al centroide.

Las principales ventajas del método K-means son, que es un método sencillo y rápido. Pero es necesario decidir el valor de k y el resultado final depende de la inicialización de los centroides. En principio no converge al mínimo global sino a un mínimo local.

k-means: Inercia

La inercia mide qué tan bien se agrupó un conjunto de datos mediante K-means. Se calcula midiendo la distancia entre cada punto de datos y su centroide, elevando al

cuadrado esta distancia y sumando estos cuadrados en un grupo.

Un buen modelo es aquel que tiene una inercia baja y un número bajo de clústeres. Sin embargo, esto es una disyuntiva porque, a medida que k aumenta, la inercia disminuye (J. Íñigo G., J.M. Barceló O., Ll. Cerdá A., E. Peig O., L. Abella i Fuentes, G. Corral i Torruella, 2008)).

2.2.9. Aplicación de INTELIGENCIA ARTIFICIAL (IA)

Para el presente trabajo, la aplicación de la inteligencia artificial se basa en el análisis de los datos experimentales.

En el camino de este objetivo los algoritmos a utilizar se encuentran alimentados de los datos experimentales de la curva de equilibrio, que en si es el corazón del cálculo del dimensionamiento de una columna de absorción o desorción; es así que el proceso de análisis de estos datos, facilitaran la detección de errores en cálculo de tendencia de una curva de equilibrio.

Los pasos del análisis por IA son los siguientes.

- a) **Recepción de datos de X & Y.** En este paso el software debe recibir los datos experimentales para el análisis de la curva de equilibrio.
- b) **Análisis por K-NN.**
 - *Estimación de k* : al encontrarnos con una variación entendida desde el punto de vista de datos experimentales, se tomará en cuenta el valor de $k = 3$.
 - *En relación a la orientación de los puntos consecutivos:* el análisis de los datos se hace por comparación de pendientes entre los datos 1,2,3; prosiguiendo con 2,3,4, después 3,4,5, hasta llegar al valor máximo (n) de datos alimentados al algoritmo. Si la pendiente entre el primero y el ultimo es opuesta o de signo cambiado con la primera y segunda, el dato intermedio queda observado.
 - *En relación a los datos experimentales:* Sin los datos observados, se plantea iteraciones de Lagrange e iteraciones de Newton para plantear las curvas tendencia que se ajusten a los datos experimentales.
 - *En relación a las distancias:* Considerando un valor de X conocido, y aplicando la fórmula de la curva tendencia; se aplica el análisis de los datos vecinos mediante las métricas de distancia Euclidiana (Ec. 46) y distancia Manhattan (Ec. 47); esto aplicadas desde las distancias

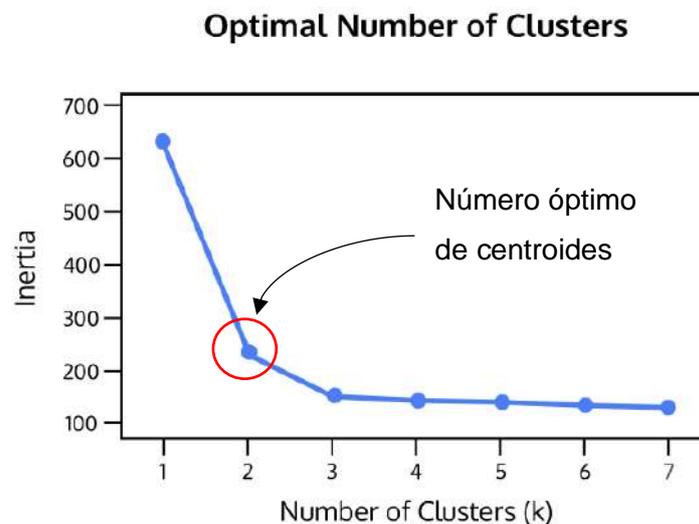
Minkowski (Ec. 48) entre los datos experimentales correlativos. $(X_1;Y_1), (X_2;Y_2), (X_3;Y_3), (X_4;Y_4), \dots$. Con el fin de determinar el mayor valor de distancia y ubicar el dato z y nuevamente analizar entre $(X_{z-2};Y_{z-2}) \& (X_{z+2};Y_{z+2})$; esto con el fin de cerciorase que no es también un dato observado.

c) **Análisis por K-means.**

Con el fin de usar un número exacto de datos que se ajustarán en una sola fórmula por medio de las iteraciones de Newton; es importante saber cuántos datos son los que se ajustan a una posible curva, y para ello aplicamos algoritmos de k-means.

- *En relación a la determinación de centroides o clusters:* para el análisis de los datos experimentales, es necesario precisar que la cantidad de valores de k puede coincidir con el número de datos (n) alimentados.
- *En relación a la inercia de K-means:* dado que la inercia es la aproximación que debe tener el centroide a los datos experimentales alimentados.
- *Relación de centroides e inercia:* para determinar el número de datos que serán necesarios para el ajuste, se busca el óptimo k para un conjunto de datos, utilizando un nuevo algoritmo que en lo grafico se le conoce como el **método del codo** (Figura 16); este método encuentra un punto donde la la inercia comienza a disminuir proporcionalmente al valor de k ; y este punto encontrado es el “codo” de este gráfico.

Figura 16. Número óptimo de clusters o centroides.



Nota. La figura muestra la búsqueda de la mejor distancia euclidiana al origen.

Para la determinación de este punto se utiliza la distancia euclidiana entre el punto de origen y el punto de relación entre centroide e inercia.

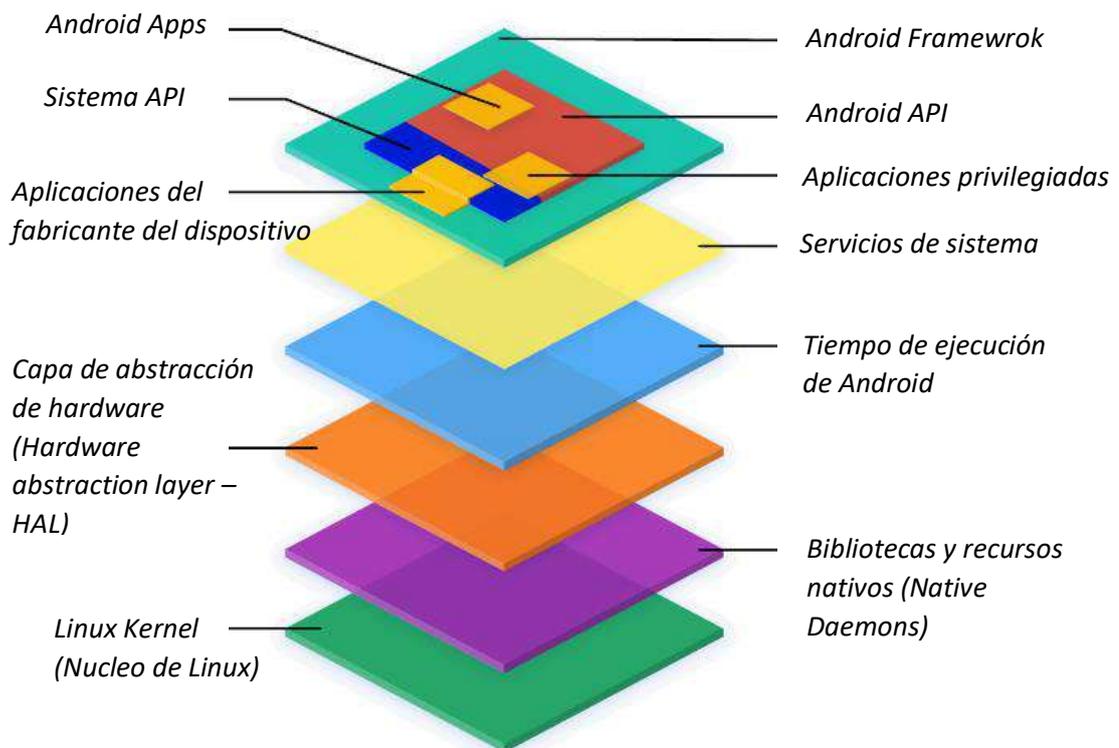
Una vez determinado el valor de centroides, se determina cual es el valor de datos a considerar para el ajuste de la línea tendencia.

2.3. PLATAFORMA DE PROGRAMACIÓN

2.3.1. Android

Android es un SO (Sistema operativo) (Figura 16) que fue enfocado inicialmente en teléfonos móviles; pero hoy en día se usa en tabletas e incluso en televisores. Lo que lo hace diferente es que está basado en Linux, un núcleo de sistema operativo libre, gratuito y multiplataforma. Este sistema operativo permite al desarrollador programar en Dalvik que es una variación de JAVA; así como ofrecer todas las interfaces necesarias para desarrollar aplicaciones compatibles a los teléfonos, tabletas o cualquier equipo funcional.

Figura 16.1 Estructura Android.



Nota. La figura muestra la estructura general del sistema operativo Android.

A la fecha, existe hasta el Android 14 que es el más reciente y está dotado de varios beneficios muy interesantes que hace que nuestros equipos en los que se utiliza este Android cuenten con un interfaz que es más intuitivo para cada usuario, y da la

sensación que el equipo se adapta al usuario ya que se nutre la información que se le brinda. Es importante mencionar que Android es una plataforma de código abierto; que quiere decir que está libre a la disposición del público, por tanto, la programación en esta plataforma y para este lenguaje de programación es lícito y gratuito. Una aplicación y equipo de Android, maneja la estructura de la figura (Figura 16) (Tomado de: <https://source.android.com/?hl=es-419> – Fecha de visita, 4 de agosto del 2023)).

Glosario de términos:

HAL. - En Android 8.0 y versiones posteriores, las capas de nivel inferior se reescriben para adoptar una nueva arquitectura más modular. Los dispositivos que ejecutan Android 8.0 y superior deben admitir HAL escritos en una interfaz heredada HIDL, con algunas excepciones. En Android 11, también se admiten las HAL.

Daemons. - Se conoce así a un proceso que se encuentra en segundo plano y maneja solicitudes de servicios y permanece inactivo cuando no es necesario.

API. - Es la plataforma en la que trabaja el programador su código fuente de la aplicación. Es todo un conjunto de protocolos y definiciones que se usa para poder diseñar el software de la aplicación y poder llegar a una integración de la misma. En el presente trabajo se utilizará como base API 33 y varios repositorios de imagen y gráficos.

2.3.2. Android Studio.

Android Studio en su versión 2022.1.1 es una interfaz de desarrollo. Allí se encuentra el proyecto, las carpetas del mismo, los archivos que existen en él y todo lo necesario para acabar creando la aplicación y posterior exportación del archivo de instalación (*.apk). Lo mejor de Android Studio es que ha sido creado por Google y fue presentado por la misma empresa como una plataforma estable y de código abierto para la creación de aplicaciones (apps), y fue desarrollado por los mismos creadores del sistema operativo. Entre otras cosas, cuenta con algunas herramientas que facilitarán mucho el desarrollo de las aplicaciones, como por ejemplo pre-visualizar las aplicaciones en diferentes Smartphone y tabletas para saber cómo está quedando el código que se desarrolla, y cómo se ve en los diferentes tipos de pantalla que existen; así como también contar con un emulador que opera de la misma manera.

CAPITULO III

3. METODOLOGÍA

Metodología del objetivo general (OG):

En función al plano general que se desarrolló en el presente trabajo se tiene:

- **Enfoque de Investigación:** Enfoque cuantitativo.
- **Nivel de Investigación:** Aplicativo.
- **Tipo de Investigación:** Correlacional causal.
- **Diseño de Investigación:** Experimental, bibliográfico.
- **Método:** Descriptivo, Analítico.
- **Técnicas:** Datos experimentales.
- **Instrumentos:** Algoritmos de IA (KNN & Random Forest).

Metodología del objetivo específico 1 (OE1):

- I. Se determina los cálculos necesarios para el diseño de las columnas de absorción y desorción de mezclas diluidas por el método McCabe-Thiele.
 - a. Cálculo de flujos mínimos.
 - b. Numero de etapas.
 - c. Dimensionamiento de etapas.
 - d. Dimensionamiento de columna.
- II. Análisis de métodos matemáticos para el procesamiento de datos.
- III. Elaboración del diagrama de casos de uso para el flujo del proceso de datos.
- IV. Elaboración del algoritmo KNN.
- V. Elaboración del algoritmo Random Forest.
- VI. Elaboración de algoritmos para casos de uso de alto nivel.
 - a. Determinación de variables.
 - b. Análisis de datos experimentales.
 - c. Utilización de bucles.
 - d. Escribir resultados.
- VII. Interpretación al proceso de diseño de columnas de absorción y desorción de mezclas diluidas por el método McCabe-Thiele.

Metodología del objetivo específico 2 (OE2):

- I. Verificación de cumplimiento de requisitos técnicos de la plataforma Android Studio 20.2.

- II. Desarrollo de Interface en la plataforma.
 - a. Pantalla de inicio.
 - b. Menú principal.
 - c. Pestañas.
 - d. Inserción GitHub de Android.
 - e. Complementos de plataforma.
- III. Traducción de algoritmos de proceso para el diseño de columnas de absorción y desorción de mezclas diluidas por el método McCabe-Thiele, al lenguaje de programación Java (DALVIK) en Android Studio.
- IV. Procesamiento de datos experimentales con algoritmos de IA.
- V. Generación de gráficos.
- VI. Muestra de resultados.

Metodología del objetivo específico 3 (OE3):

- I. Obtención de resultados por interpretación de la forma bibliográfica para el diseño de columna de absorción y desorción de mezclas diluidas por el método McCabe-Thiele.
- II. Obtención de resultados del software desarrollado para diseño de columna de absorción y desorción de mezclas diluidas por el método McCabe-Thiele.
- III. Comparación de resultados con Chemsep , bibliográficos y determinación de márgenes de error.
- IV. Validación de resultados con error no significativo.

Para tal búsqueda de resultados, se debe analizar los métodos de cálculo.

3.1. Métodos de calculo

Este trabajo se enfoca en el cálculo de valores mínimos de masa y flujo; así como también hacer un cálculo del número de etapas o platos teóricos para procesos y el dimensionamiento que ocurren en dos tipos de equipos de contacto; Absorción y Desorción en condiciones ideales y presión y temperatura constantes.

3.1.1. Cálculos y dimensionamiento para columnas.

3.1.1.1. Método bibliográfico.

Este método se llama bibliográfico dado que tiene como guía las bases bibliográficas. (*Wankat, P. C., 2012*) (*Treybal, R. E., 1981*) (*McCabe, W. L., Smith, J. C. y Harriott, P., 1991*).

La forma de determinación según distintas bibliografías; son procesos similares.

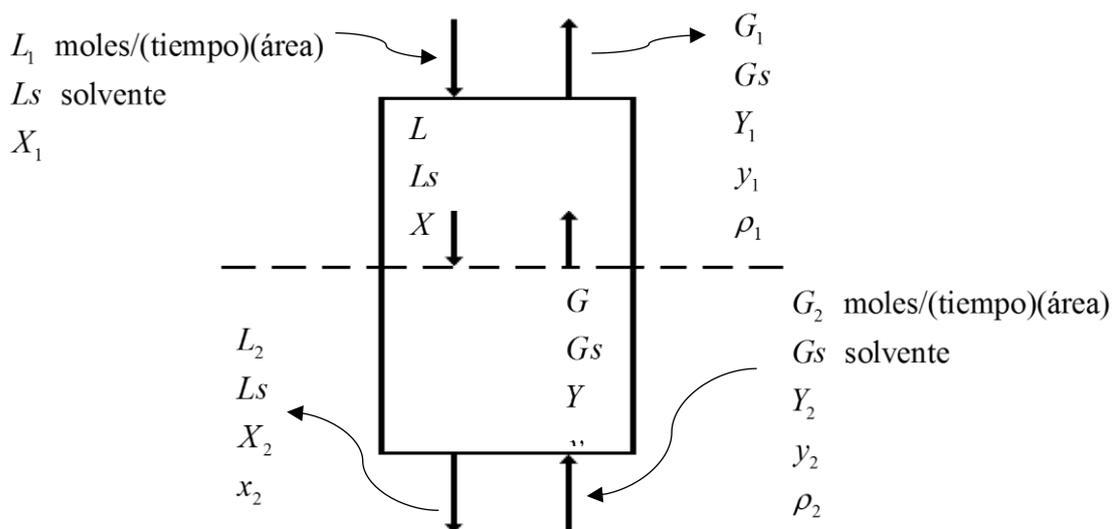
Este método bibliográfico implica la determinación del número de platos o etapas teóricas de los equipos de absorción y de los equipos de desorción; es un método que puede ser netamente gráfico basado en determinar los valores que se encuentran de forma **GRAFICA MANUAL**; y también puede determinarse por las ecuaciones de Kremser en el caso de curvas de equilibrio quasi lineales o lineales como se verá a continuación.

3.1.1.1.1. Absorción y Desorción.

Como se puede observar en la figura (Figura 17), se encuentran señalados los flujos de entrada y salida de la columna, en función de las fracciones molares y flujos molares.

Figura 17.

Cantidades de flujo para un absorbedor o desorbedor.



Nota. Tomado de: (Treybal, R. E., 1981), pp. 283.

Dependiendo del problema se determina a los valores de las fracciones molares (x_A y y_A) para poder graficar la curva de equilibrio con los datos encontrados según las ecuaciones (Ec. 16) y (Ec. 21).

Con los datos que se conocen del proceso, ya sea de absorción o desorción, se procede a graficar la línea de operación; buscando que esta línea de operación pueda cruzar en un límite de operación o en un punto tangencial a la curva de equilibrio. Como en el caso del equipo de absorción (Figura 5) o desorción (Figura 7); y de esa manera se puede conocer los flujos mínimos de proceso para los equipos.

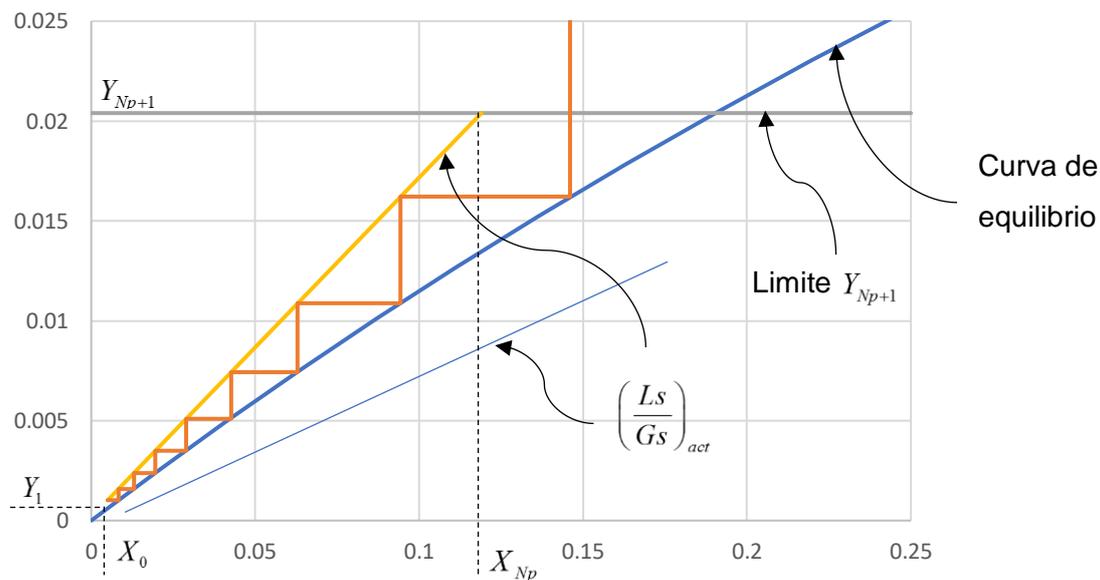
Tabla 7.

L_2 es cambiado a L_{Np}	G_2 es cambiado a G_{Np+1}	x_2 es cambiado a x_{Np}
L_1 es cambiado a L_0	G_1 es cambiado a G_1	x_1 es cambiado a x_0
X_2 es cambiado a X_{Np}	Y_2 es cambiado a Y_{Np+1}	y_2 es cambiado a y_{Np+1}
X_1 es cambiado a X_0	Y_1 es cambiado a Y_1	y_1 es cambiado a y_1

Dado que la columna será un arreglo de etapas o platos, se van a hacer los siguientes cambios (*Tabla 7*) en la notación (compárense los gráficos (*Figura 17*) y (*Figura 10*)).

Considerando conocer los valores mínimos para el equipo, se puede determinar una segunda línea de operación experimental $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{act}$ (*Figura 18*); que en muchos casos está en función de los valores mínimos.

Figura 18. Diagrama de relación de razones de fracción molar (X,Y) para absorción y desorción para determinación grafica de etapas.



Se trabajará con la $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{act}$, que es el valor experimental solicitado.

El diagrama de operación se establece en la figura (*Figura 18*) y se puede también agregar en la misma figura los platos teóricos de forma analítica o grafica; mostrando que cada peldaño dibujado corresponda a la existencia de un plato o etapa.

Alternativamente, el número de platos teóricos se puede calcular analíticamente.

Considerando las ecuaciones ($y_A = x_A \left(\frac{P_A^s}{P} \right)$ (Ec. 5) & $y_A = m_A x_A$ (Ec. 9)) de donde se obtiene el valor: m_A

Se calcula los datos necesarios para lectura en el anexo (**Anexo I**) [Por Hachmuth y Vance, *chem. Eng. Progr.*, 48, 523, 570, 617 (1952)].

Con los valores, se determina según el cuadro del anexo (**Anexo I**); la lectura es determinando el valor de la ordenada $\left(\frac{y_1 - mx_0}{y_{Np+1} - mx_0} \right)$, y el valor de A que se encuentra entre las curvas respectivas. Posterior a ello se grafica una extensión perpendicular con dirección a la abscisa y así se determina el número de etapas (N_p).

Utilizando la correlación de Fair para estimar el diámetro de la columna de absorción, se necesitan los datos mínimos como: espacio entre bandejas, factor de formación de espuma, fracción de inundación de (f) y la tensión superficial.

Se determina la relación de energía cinética (Ec. 34):

$$F_{LV} = \left(\frac{LM_L}{VM_V} \right) \left(\frac{\rho_V}{\rho_L} \right)^{0.5}$$

Para un espacio entre bandejas según el problema; se verifica en la figura (Figura 17):

Una vez determinado el valor de C_F . Ahora se determina el factor de tensión superficial (F_{ST}) (2,41): $F_{ST} = \left(\frac{\sigma}{20} \right)^{0.2}$

Verificando en (Ec. 40); entonces se tendrán los valores de: A_d/A y F_{HA} .

Con estos datos se calcula el valor de C en la ecuación (Ec. 35):
 $C = F_{ST} F_F F_{HA} C_F$

Y se reemplazar el valor de C en la ecuación (Ec. 33): $u_f = C \left(\frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_V} \right)^{1/2}$

Finalmente utilizando la ecuación (Ec. 39) se halla el diámetro de la columna, D_T que será el diámetro de cada bandeja.

$$D_T = \left[\frac{4VM_v}{f u_f \pi \left(1 - \frac{A_d}{A}\right) \rho_v} \right]^{0.5}$$

3.1.1.2. Método esquematizado.

La forma de determinación según este método, es un proceso ordenado en diagramas netamente visuales y calculo numéricos. Este método esquematizado implica la determinación del número de etapas teóricas o platos teóricos en los equipos de absorción y desorción para el posterior dimensionamiento; es un método grafico computacional, basado en determinar los valores experimentales solicitados (muchas veces en comparación de los valores mínimos) de la línea de operación y reemplazarlos en la ecuación (Ec. 31) para así obtener los resultados de los flujos necesarios para un proceso que será dividido en el equipo en varias etapas teóricas.

3.1.1.2.1. Absorción y Desorción.

Este método utiliza la ayuda de Microsoft Excel; Se inicia tomando los datos del problema: (Condiciones de presión y temperatura; composición centesimal de la sustancia problema, pesos moleculares y demás datos).

Dependiendo del problema se determina a los valores de las fracciones molares (x_A y y_A) para poder graficar la curva de equilibrio con los datos encontrados según las ecuaciones (Ec. 16) y (Ec. 21).

Con los datos que se conocen del proceso, en un cuadro de Excel se colocan los datos conocidos y se va tanteando el valor faltante ya sea de absorción o desorción, el momento de graficar la línea de operación; buscando que esta línea de operación pueda cruzar en un límite de operación o en un punto tangencial a la curva de equilibrio. Como en el caso del equipo de absorción (Figura 5) o desorción (Figura 7); y de esa manera se puede conocer los flujos mínimos de proceso para los equipos.

Se le dice método esquematizado dado que se desarrolla con la ayuda de un diagrama o cuadro para poder reconocer las entradas y salidas de nuestro equipo (Tabla 3 & Tabla 4).

Al igual que en el método bibliográfico se cambia la notación para proceder al análisis de la columna de platos y considerando conocer los valores mínimos para el

equipo, se puede determinar una segunda línea de operación experimental $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{act}$; que en muchos casos está en función de los valores mínimos.

Se trabajará con la $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{act}$, que es el valor experimental solicitado. Los datos obtenidos con la nueva línea de operación, brinda los datos $(x_1, x_2, y_1, y_2, X_1, X_2, Y_1, Y_2)$; que son los que ayuda a encontrar los valores que faltan en el cuadro para determinar los flujos y fracciones molares; (Se utilizan las ecuaciones despejadas necesarias de la tabla (Tabla 6)).

Para determinar el valor de los platos se puede empezar a graficar desde arriba o desde la parte inferior de la línea de operación. Es imprescindible saber cuál es la trayectoria de la curva de equilibrio y para ello se procede a buscar su línea tendencia de esta curva, con la herramienta que Microsoft Excel brinda. Con la fórmula de la línea tendencia de segundo grado $(Y = aX^2 + bX + c)$ o tercer grado $(Y = aX^3 + bX^2 + cX + d)$ o cuarto grado $(Y = aX^4 + bX^3 + cX^2 + dX + e)$ que se obtiene al ser lo más parecido a la curva de equilibrio y la ecuación de la recta $(Y = mX + b)$, que es la línea de operación, se empieza a dibujar cada etapa en el gráfico.

Para absorción y para desorción se debe graficar las etapas, teniendo como límites a la línea tendencia y la línea de operación. Como en la figura (Figura 18). Y para el dimensionamiento, se utiliza el mismo proceso de la correlación de Fair.

3.2. Métodos de desarrollo del software - fase de inicio

En los procesos químicos y en específico en los cálculos de flujos de entrada salida, numero de etapas y dimensionamiento en el diseño de columnas de absorción y desorción, resultan extensos los cálculos manuales; Sin embargo, se cuenta actualmente con ayuda de las computadoras y software que ayudan a conocer estos parámetros; aunque no resultan suficientes ante un cálculo analítico.

Desafortunadamente, el proceso para hallar estos datos de proceso en el diseño de columnas de absorción y desorción; demanda el uso de tablas, así como cierto orden y cuidado para obtener los valores correctos. Es importante resaltar que en la actualidad no existe aún algún software que pueda determinar intuitivamente estos valores.

Por todo lo expuesto se busca como solución en el presente trabajo el desarrollo

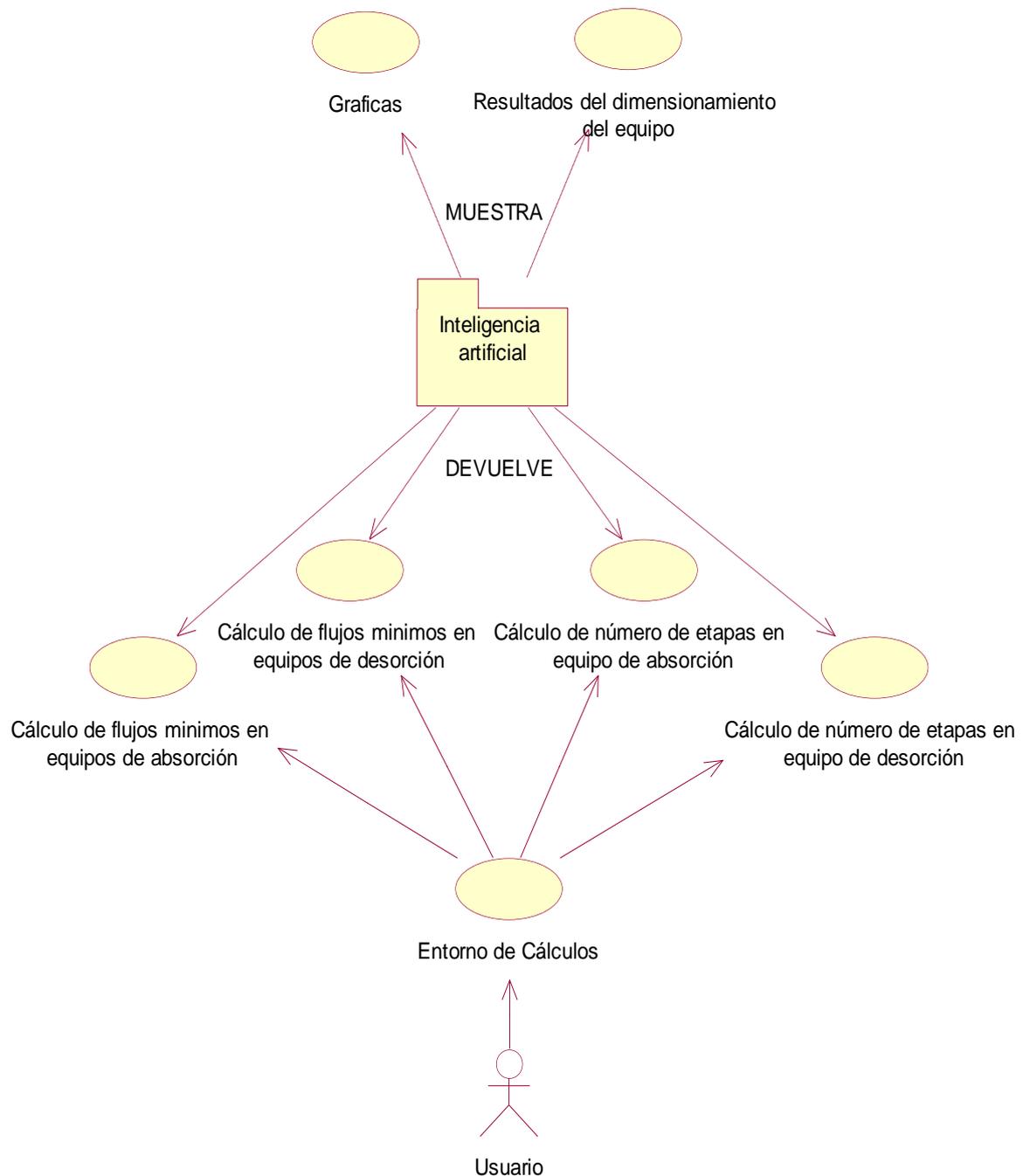
de un software, aplicando algoritmos de inteligencia artificial, para el diseño de una columna de absorción y desorción de soluciones diluidas mediante el método McCabe en el sistema Operativo Android, que se titulará “Equipos de contacto”.

3.2.1. Casos de uso del Software.

3.2.1.1. Diagrama de casos de uso.

Figura 19.

Diagrama de casos de uso del desarrollo de la aplicación.



Nota. El diagrama muestra el análisis de la interacción entre el usuario y el software.

3.2.2. Lista de requerimientos.

Tabla 8. *Lista de requerimientos para el diseño de columnas de absorción.*

Nº Req.	Descripción	Categoría
R.1	Cálculo de flujos molares mínimos y experimentales en un equipo de absorción en contracorriente.	Visible
R.2	Cálculo de flujos molares mínimos y experimentales en un equipo de desorción en contracorriente.	Visible
R.3	Cálculo del número de platos o etapas teóricas en un equipo de absorción en contracorriente.	Visible
R.4	Cálculo del número de platos o etapas teóricas en un equipo de desorción en contracorriente.	Visible
R.5	Cálculo de flujos de entrada y salida en equipos de absorción.	Visible
R.6	Cálculo de flujos de entrada y salida en equipos de desorción.	Visible
R.7	Gráfico de curva de equilibrio.	Visible
R.8	Gráfico de valores mínimos para equipos de contacto.	Visible
R.9	Gráfico de etapas en equipos de contacto.	Visible
R.10	Cálculo de los valores de constante de la ley de Henry para determinación de datos necesarios en la curva de equilibrio.	Oculto
R.11	Cálculo de los valores de constante de la ley de Raoult para determinación de datos necesarios en la curva de equilibrio.	Oculto
R.12	Proceso de datos experimentales para la Curva de equilibrio por IA (Inteligencia Artificial).	Oculto
R.13	Cálculo de límites en X & Y	Oculto
R.14	Cálculo de la Línea de Operación	Oculto
R.15	Cálculo de valor mínimo para equipos con IA (Inteligencia Artificial).	Oculto
R.16	Cálculo de límite de etapas con IA (Inteligencia Artificial).	Oculto
R.17	Conversión de flujos molares a flujos masicos.	Oculto
R.18	Cálculos para el dimensionamiento de la columna.	Visible
R.19	Cálculos de relación de energía cinética y Cf según el espaciado de las etapas o bandejas.	Oculto
R.20	Cálculo de dimensionamiento de cada etapa.	Oculto

3.2.2.1. Casos de uso de alto nivel.

Los casos de uso de alto nivel, son aquellos que procesos principales realizados por el software a desarrollar en interacción con el usuario final que considerando los procesos ideales a grandes rasgos que del software debe desarrollar; esto sin detallar el cálculo o determinación; Así se tiene:

Caso de Uso	Cálculo de flujos mínimos y experimentales en equipo de Absorción.
Actor	Usuario
Tipo	Primario
Descripción	<p>El usuario ingresa a la opción Equipo de Absorción a contracorriente del software, luego selecciona la opción según los datos que se conocen en problema (Datos experimentales o constantes para ley de Henry o ley de Raoult), luego selecciona el ícono de valores mínimos e ingresa los datos conocidos del problema:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Temperatura (y unidades). • Presión (y unidades). • Solute (y peso molecular del soluto). • Porcentaje del soluto en el gas rico. • Líquido absorbente (y peso molecular). • Porcentaje del soluto en el líquido absorbente (≥ 0). • Portador (y peso molecular del portador) (*opcional). • Si se conocen los datos experimentales: <ul style="list-style-type: none"> ✓ Ingresar la relación de concentración – Solute/Absorbente (Masa o volumen). ✓ Indicar la cantidad de datos disponibles. ✓ Ingresar los datos experimentales. • Si se determinara la curva por constantes de Henry o Raoult: <ul style="list-style-type: none"> ○ Relación de concentración para ley de Henry. ○ Presión parcial para ley Raoult ✓ Indicar la cantidad de datos disponibles. ✓ Ingresar los datos experimentales. <p>Selecciona “Calcular relaciones de equilibrio” y seguidamente muestra la curva de equilibrio en función de los datos administrados.</p> <p>Luego se selecciona la opción de valores mínimos y se ingresa la concentración conocida a la salida o recuperada, de ser el caso, para el</p>

	<p>gas pobre o para el líquido rico. Selecciona “Calcular equilibrio” y el programa brinda los siguientes resultados:</p> <p>Gráfico, valores de flujos molares de entrada y salida, valores masicos de entrada y salida de equipo, $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min}$ y flujos mínimos.</p> <p>De ser el caso que se necesite conocer la línea de operación y los datos operativos en base al valor mínimo, se debe seleccionar valores experimentales.</p> <p>El programa solicita los demás datos extras en problema.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Seleccionar la opción de datos extras. <ul style="list-style-type: none"> ✓ Si se conoce el número de moles en el gas rico, gas pobre o liquido pobre (Ingresar el valor). ✓ Si se conoce el caudal o flujo del gas, (Ingresar con las respectivas unidades). • Ingresar el exceso de flujo experimental. (En porcentaje, 100% es el valor mínimo). <p>Con estos datos se selecciona “Calcular equilibrio” y el programa brinda los resultados.</p> <p>Gráfico, valores de flujos molares de entrada y salida, valores masicos de entrada y salida de equipo.</p>
--	---

Caso de Uso	Cálculo de flujos mínimos y experimentales en equipo de Desorción.
Actor	Usuario
Tipo	Primario
Descripción	<p>El usuario ingresa a la opción Equipo de Desorción a contracorriente del software, luego selecciona la opción según los datos que se conocen en problema (Datos experimentales o constantes para ley de Henry o ley de Raoult), luego selecciona el ícono de valores mínimos e ingresa los datos conocidos del problema:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Temperatura (y unidades). • Presión (y unidades). • Solute (y peso molecular del soluto). • Porcentaje del soluto en el líquido rico. • Gas desorbente (y peso molecular). • Porcentaje del soluto en el gas desorbente (≥ 0).

- Portador (y peso molecular del portador) (*opcional).
- Si se conocen los datos experimentales:
 - ✓ Ingresar la relación de concentración – Soluto/desorbente (Masa o volumen).
 - ✓ Indicar la cantidad de datos disponibles.
 - ✓ Ingresar los datos experimentales.
- Si se determinara la curva por constantes de Henry o Raoult:
 - Relación de concentración para ley de Henry.
 - Presión parcial para ley Raoult
 - ✓ Indicar la cantidad de datos disponibles.
 - ✓ Ingresar los datos experimentales.

Selecciona “Calcular relaciones de equilibrio” y seguidamente muestra la curva de equilibrio en función de los datos administrados.

Luego se selecciona la opción de valores mínimos y se ingresa la concentración conocida a la salida o recuperada, de ser el caso, para el gas rico o para el líquido pobre. Selecciona “Calcular equilibrio” y el programa brinda los siguientes resultados:

Gráfico, valores de flujos molares de entrada y salida, valores masicos de entrada y salida de equipo, $\left(Gs/Ls\right)_{min}$ o $\left(Ls/Gs\right)_{max}$ y flujos mínimos.

De ser el caso que se necesite conocer la línea de operación y los datos operativos en base al valor mínimo, se debe seleccionar valores experimentales.

El programa solicita los demás datos extras en problema.

- Seleccionar la opción de datos extras.
 - ✓ Si se conoce el número de moles en el gas rico, gas pobre o liquido rico (Ingresar el valor).
 - ✓ Si se conoce el caudal o flujo del gas, (Ingresar con las respectivas unidades).
- Ingresar el exceso de flujo experimental. (En porcentaje, 100% es el valor mínimo).

Con estos datos se selecciona “Calcular equilibrio” y el programa brinda los resultados.

Gráfico, valores de flujos molares de entrada y salida, valores masicos de entrada y salida de equipo.

Caso de Uso	Cálculo de etapas teóricas en equipo de Absorción.
Actor	Usuario
Tipo	Primario
Descripción	<p>El usuario ingresa a la opción Equipo de Absorción a contracorriente del software, luego selecciona la opción según los datos que se conocen en problema (Datos experimentales o constantes para ley de Henry o ley de Raoult), luego selecciona el ícono de valores mínimos e ingresa los datos conocidos del problema:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Temperatura (y unidades). • Presión (y unidades). • Solute (y peso molecular del soluto). • Porcentaje del soluto en el gas rico. • Líquido absorbente (y peso molecular). • Porcentaje del soluto en el líquido absorbente (≥ 0). • Portador (y peso molecular del portador) (*opcional). • Si se conocen los datos experimentales: <ul style="list-style-type: none"> ✓ Ingresar la relación de concentración – Solute/Absorbente (Masa o volumen). ✓ Indicar la cantidad de datos disponibles. ✓ Ingresar los datos experimentales. • Si se determinara la curva por constantes de Henry o Raoult: <ul style="list-style-type: none"> ○ Relación de concentración para ley de Henry. ○ Presión parcial para ley Raoult ✓ Indicar la cantidad de datos disponibles. ✓ Ingresar los datos experimentales. <p>Selecciona “Calcular relaciones de equilibrio” y seguidamente muestra la curva de equilibrio en función de los datos administrados.</p> <p>De ser el caso de tratar con la relación de flujos mínimos se selecciona la opción de valores mínimos y se ingresa la concentración conocida a la salida o recuperada, de ser el caso, para el gas pobre o para el líquido rico. Selecciona “Calcular equilibrio” y el programa brinda los siguientes resultados:</p> <p>Gráfico, valores de flujos molares de entrada y salida, valores masicos de entrada y salida de equipo, $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min}$ y flujos mínimos.</p>

	<p>Si se tiene un flujo o porcentaje dado, se determina la línea de operación y los datos operativo, para esto, se debe seleccionar valores experimentales.</p> <p>El programa solicita los demás datos extras en problema.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Seleccionar la opción de datos extras. <ul style="list-style-type: none"> ✓ Si se conoce el número de moles en el gas rico, gas pobre, liquido rico o liquido pobre según la concentración o recuperación conocida (Ingresar el valor del número de moles directamente en el cuadro). ✓ Si se conoce el caudal o flujo del gas, (Ingresar con las respectivas unidades). • Ingresar el exceso de flujo experimental. (En porcentaje, 100% es el valor mínimo). <p>Con estos datos se selecciona “Calcular equilibrio” y el programa brinda los resultados.</p> <p>Número de etapas teóricas, gráfico de las etapas teóricas entre la línea de operación y curva de equilibrio, valores de flujos molares de entrada y salida, valores masicos de entrada y salida de equipo.</p>
--	--

Caso de Uso	Cálculo de etapas teóricas en equipo de Desorción.
Actor	Usuario
Tipo	Primario
Descripción	<p>El usuario ingresa a la opción Equipo de Desorción a contracorriente del software, luego selecciona la opción según los datos que se conocen en problema (Datos experimentales o constantes para ley de Henry o ley de Raoult), luego selecciona el ícono de valores mínimos e ingresa los datos conocidos del problema:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Temperatura (y unidades). • Presión (y unidades). • Solute (y peso molecular del soluto). • Porcentaje del soluto en el líquido rico. • Gas desorbente (y peso molecular). • Porcentaje del soluto en el gas desorbente (≥ 0). • Portador (y peso molecular del portador) (*opcional). • Si se conocen los datos experimentales:

- ✓ Ingresar la relación de concentración – Sóluto/desorbente (Masa o volumen).
- ✓ Indicar la cantidad de datos disponibles.
- ✓ Ingresar los datos experimentales.
- Si se determinara la curva por constantes de Henry o Raoult:
 - Relación de concentración para ley de Henry.
 - Presión parcial para ley Raoult
- ✓ Indicar la cantidad de datos disponibles.
- ✓ Ingresar los datos experimentales.

Selecciona “Calcular relaciones de equilibrio” y seguidamente muestra la curva de equilibrio en función de los datos administrados.

De ser el caso de tratar con la relación de flujos mínimos se selecciona la opción de valores mínimos y se ingresa la concentración conocida a la salida o recuperada, de ser el caso, para el gas rico o para el líquido pobre. Selecciona “Calcular equilibrio” y el programa brinda los siguientes resultados:

Gráfico, valores de flujos molares de entrada y salida, valores masicos de entrada y salida de equipo, $\left(\frac{Gs}{Ls}\right)_{min}$ o $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{max}$ y flujos mínimos.

Si se tiene un flujo o porcentaje dado, se determina la línea de operación y los datos operativo, para esto, se debe seleccionar valores experimentales.

El programa solicita los demás datos extras en problema.

- Seleccionar la opción de datos extras.
 - ✓ Si se conoce el número de moles en el gas rico, gas pobre, líquido rico o líquido pobre según la concentración o recuperación conocida (Ingresar el valor del número de moles directamente en el cuadro).
 - ✓ Si se conoce el caudal o flujo del gas, (Ingresar con las respectivas unidades).
- Ingresar el exceso de flujo experimental. (En porcentaje, 100% es el valor mínimo).

Con estos datos se selecciona “Calcular equilibrio” y el programa brinda los resultados.

Número de etapas teóricas, gráfico de las etapas teóricas entre la línea de operación y curva de equilibrio, valores de flujos molares de entrada y salida, valores masicos de entrada y salida de equipo.

Para los diagramas, el software usa subdivisiones del caso de uso **GRÁFICOS**

Caso de Uso	Gráfico de curva de equilibrio.
Actor	Usuario
Tipo	Primario
Descripción	<p>El usuario ingresa a la opción Equipo de Absorción o Desorción a contracorriente del software, luego selecciona la opción según los datos que se conocen en problema (Datos experimentales o constantes para ley de Henry o ley de Raoult), luego selecciona el ícono de valores mínimos e ingresa los datos conocidos del problema:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Temperatura (y unidades). • Presión (y unidades). • Solute (y peso molecular del soluto). • Porcentaje del soluto en el líquido rico. • Líquido absorbente o gas desorbente (y peso molecular). *según el caso. • Porcentaje del soluto en el líquido absorbente o gas desorbente (≥ 0). *según el caso. • Portador (y peso molecular del portador) (*opcional). • Si se conocen los datos experimentales: <ul style="list-style-type: none"> ✓ Ingresar la relación de concentración – Solute/desorbente (Masa o volumen). ✓ Indicar la cantidad de datos disponibles. ✓ Ingresar los datos experimentales. • Si se determinara la curva por constantes de Henry o Raoult: <ul style="list-style-type: none"> ○ Relación de concentración para ley de Henry. ○ Presión parcial para ley Raoult ✓ Indicar la cantidad de datos disponibles. ✓ Ingresar los datos experimentales. <p>Selecciona “Calcular relaciones de equilibrio” y el software devuelve el gráfico de la curva de equilibrio según los parámetros administrados. De ser el caso que los valores sean indeterminados o valores negativos, sigue las condicionales necesarias para graficar los datos existentes del problema.</p>

Caso de Uso	Gráfico de flujos mínimos en equipos de contacto.
Actor	Usuario
Tipo	Primario
Descripción	<p>El usuario ingresa a la opción Equipo de Absorción o Desorción a contracorriente del software, luego selecciona la opción según los datos que se conocen en problema (Datos experimentales o constantes para ley de Henry o ley de Raoult), luego selecciona el ícono de valores mínimos e ingresa los datos conocidos del problema:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Temperatura (y unidades). • Presión (y unidades). • Solute (y peso molecular del soluto). • Porcentaje del soluto en el líquido rico. • Líquido absorbente o gas desorbente (y peso molecular). *según el caso. • Porcentaje del soluto en el líquido absorbente o gas desorbente (≥ 0). *según el caso. • Portador (y peso molecular del portador) (*opcional). • Si se conocen los datos experimentales: <ul style="list-style-type: none"> ✓ Ingresar la relación de concentración – Solute/desorbente (Masa o volumen). ✓ Indicar la cantidad de datos disponibles. ✓ Ingresar los datos experimentales. • Si se determinara la curva por constantes de Henry o Raoult: <ul style="list-style-type: none"> ○ Relación de concentración para ley de Henry. ○ Presión parcial para ley Raoult ✓ Indicar la cantidad de datos disponibles. ✓ Ingresar los datos experimentales. <p>Selecciona “Calcular relaciones de equilibrio” y el software devuelve el gráfico de la curva de equilibrio según los parámetros administrados. De ser el caso que los valores sean indeterminados o valores negativos, sigue las condicionales necesarias para graficar los datos existentes del problema.</p> <p>Al tratar con la relación de flujos mínimos se selecciona la opción de valores mínimos y se ingresa la concentración conocida a la salida o recuperada, según el caso de equipo de absorción o de equipo de</p>

	<p>desorción. Selecciona “Calcular equilibrio” y el programa brinda los resultados con la opción de gráfico.</p> <p>Para el diagrama que se muestra se utiliza IA dado que se debe considerar en primer lugar una línea de tendencia acorde a los datos administrados. Si existen algún valor anómalo al curso natural experimental, el software hace una comparación y devuelve una curva que se ajuste lo más real posible a los datos experimentales.</p> <p>Por otro lado, la IA se encarga de hacer el análisis como lo haría el usuario el momento de hacer estos cálculos de forma manual, buscando las aproximaciones más exactas a los valores correctos de línea de operación versus curva de equilibrio, siguiendo los límites establecidos. Si detecta que existen un punto de corte entre la curva de equilibrio y la línea de operación anterior al límite, considerará el valor mínimo, al primer punto de corte a la curva de equilibrio.</p>
--	---

Caso de Uso	Gráfico de etapas en diagrama de equipos de contacto.
Actor	Usuario
Tipo	Primario
Descripción	<p>El usuario ingresa a la opción Equipo de Absorción o Desorción a contracorriente del software, luego selecciona la opción según los datos que se conocen en problema (Datos experimentales o constantes para ley de Henry o ley de Raoult), luego selecciona el ícono de valores mínimos e ingresa los datos conocidos del problema:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Temperatura (y unidades). • Presión (y unidades). • Solute (y peso molecular del soluto). • Porcentaje del soluto en el líquido rico. • Líquido absorbente o gas desorbente (y peso molecular). *según el caso. • Porcentaje del soluto en el líquido absorbente o gas desorbente (≥ 0). *según el caso. • Portador (y peso molecular del portador) (*opcional). • Si se conocen los datos experimentales: <ul style="list-style-type: none"> ✓ Ingresar la relación de concentración – Solute/desorbente (Masa o volumen).

	<ul style="list-style-type: none"> ✓ Indicar la cantidad de datos disponibles. ✓ Ingresar los datos experimentales. • Si se determinara la curva por constantes de Henry o Raoult: <ul style="list-style-type: none"> ○ Relación de concentración para ley de Henry. ○ Presión parcial para ley Raoult ✓ Indicar la cantidad de datos disponibles. ✓ Ingresar los datos experimentales. <p>Selecciona “Calcular relaciones de equilibrio” y el software devuelve el grafico de la curva de equilibrio según los parámetros administrados. De ser el caso que los valores sean indeterminados o valores negativos, sigue las condicionales necesarias para graficar los datos existentes del problema.</p> <p>Si se tiene una relación porcentual respecto a los valores mínimos, previamente se debe hacer el cálculo de los mismos; se selecciona la opción de valores mínimos y se ingresa la concentración conocida a la salida o recuperada, según el caso de equipo de absorción o de equipo de desorción. Selecciona “Calcular equilibrio” y el programa brinda los resultados.</p> <p>Por otro lado, si se tiene un flujo o porcentaje dado, se determina la línea de operación y los datos operativo, para esto, se debe seleccionar valores experimentales.</p> <p>El programa solicita los demás datos extras en problema.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Seleccionar la opción de datos extras. <ul style="list-style-type: none"> ✓ Si se conoce el número de moles en el gas rico, gas pobre o liquido rico (Ingresar el valor). ✓ Si se conoce el caudal o flujo del gas, (Ingresar con las respectivas unidades). • Ingresar el exceso de flujo experimental. (En porcentaje, 100% es el valor mínimo). <p>Con estos datos se selecciona “Calcular equilibrio” y el programa brinda los resultados.</p> <p>Número de etapas teóricas, gráfico de las etapas teóricas entre la línea de operación y curva de equilibrio, valores de flujos molares de entrada y salida, valores masicos de entrada y salida de equipo.</p>
--	---

Para los resultados del diseño del equipo, el software usa el mismo procedimiento del caso de uso RESULTADOS DEL DIMENSIONAMIENTO DEL EQUIPO.

Caso de Uso	Resultados del diseño del equipo.
Actor	Usuario
Tipo	Primario
Descripción	<p>El usuario ingresa a la opción Equipo de Absorción o Desorción a contracorriente del software, luego selecciona la opción según los datos que se conocen en problema (Datos experimentales o constantes para ley de Henry o ley de Raoult), luego selecciona el ícono de valores mínimos e ingresa los datos conocidos del problema:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Temperatura (y unidades). • Presión (y unidades). • Solute (y peso molecular del soluto). • Porcentaje del soluto en el líquido rico. • Líquido absorbente o gas desorbente (y peso molecular). *según el caso. • Porcentaje del soluto en el líquido absorbente o gas desorbente (≥ 0). *según el caso. • Portador (y peso molecular del portador) (*opcional). • Si se conocen los datos experimentales: <ul style="list-style-type: none"> ✓ Ingresar la relación de concentración – Solute/desorbente (Masa o volumen). ✓ Indicar la cantidad de datos disponibles. ✓ Ingresar los datos experimentales. • Si se determinara la curva por constantes de Henry o Raoult: <ul style="list-style-type: none"> ○ Relación de concentración para ley de Henry. ○ Presión parcial para ley Raoult ✓ Indicar la cantidad de datos disponibles. ✓ Ingresar los datos experimentales. <p>Selecciona “Calcular relaciones de equilibrio” y el software devuelve el gráfico de la curva de equilibrio según los parámetros administrados.</p> <p>El proceso de cálculo del diseño completo, hasta el dimensionamiento, necesita de datos experimentales para tal cálculo, así como, espacio entre bandejas, factor de formación de espuma, fracción de inundación de (f) y tensión superficial.</p>

	<p>El programa solicita los demás datos para cálculos de numero de etapas:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Seleccionar la opción de datos extras. <ul style="list-style-type: none"> ✓ Si se conoce el número de moles en el gas rico, gas pobre o liquido rico (Ingresar el valor). ✓ Si se conoce el caudal o flujo del gas, (Ingresar con las respectivas unidades). • Ingresar el exceso de flujo experimental. (En porcentaje, 100% es el valor mínimo). <p>Con estos datos se selecciona “Calcular equilibrio” y el programa brinda los resultados.</p> <p>El programa solicita ingresar los datos</p> <ul style="list-style-type: none"> • Espacio entre bandejas. • Factor de formación de espuma. • Fracción de inundación de (f). • Tensión superficial. • Densidad del absorbente (Para absorción). • Densidad del desorbente (Para desorción). • Si son platos de arreglo perforado: <ul style="list-style-type: none"> ○ Diámetro de perforación de la bandeja (De ser el caso). ○ Distancia entre centros de perforación (De ser el caso). ○ Espeso de bandeja (De ser el caso). <p>Con todos los datos administrados selecciona “dimensionamiento del equipo”, y el programa brinda los resultados del diámetro de columna y altura de columna.</p>

3.2.2.2. Casos de uso expandido.

Los casos de uso expandidos son aquellos procesos de interacción que existe entre la interface y el usuario el momento de interactuar con el software; considerando los procesos internos del software para su cálculo o determinación; como ejemplo se tiene:

Caso de Uso	Cálculo de flujos mínimos y experimentales en equipo de Absorción. (Datos experimentales)
Actor	Usuario

Tipo	Primario
Descripción	<p>El usuario ingresa a la primera opción del software, e ingresa los datos conocidos del problema que son:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Temperatura (y unidades). • Presión (y unidades). • Solute (y peso molecular del soluto). • Porcentaje del soluto en el gas rico. • Líquido absorbente (y peso molecular). • Porcentaje del soluto en el líquido absorbente (≥ 0). • Portador (y peso molecular del portador) (*opcional). • Ingresar la relación de concentración – Solute/Absorbente (Masa o volumen). • Indicar la cantidad de datos disponibles. • Ingresar los datos experimentales. <p>Selecciona “Calcular relaciones de equilibrio” y seguidamente muestra la curva de equilibrio en función de los datos administrados.</p> <p>Luego se selecciona la opción de valores mínimos y se ingresa la concentración conocida a la salida o recuperada, de ser el caso, para el gas pobre o para el líquido rico.</p> <p>Selecciona “Calcular equilibrio” y el programa brinda los siguientes resultados:</p> <p>Gráfico, valores de flujos molares de entrada y salida, valores masicos de entrada y salida de equipo, $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min}$ y flujos mínimos.</p>
Referencia Cruzada	R.1, R.5, R.7, R.8, R.12, R.13, R.14, R.15, R.17.
Curso Normal de los Eventos	
Actor	Sistema

1.- El usuario ingresa al software (App).	2.- El software muestra la caratula de la App.
3.- El usuario selecciona "Inicio".	4.- El software muestra el menú principal.
5.- El usuario selecciona "Equipo de absorción".	6.- El software muestra opciones: <ul style="list-style-type: none"> • Datos experimentales • Curva de equilibrio según ley de Henry o Raoult.
7.- El usuario selecciona datos experimentales.	8.- El software muestra dos imágenes del equipo, de valores mínimos y de etapas.
9.- El usuario selecciona valores mínimos.	10.- El software ingresa a la activity (interfase) de la opción seleccionada.
11.- El usuario ingresa los datos necesarios para el cálculo: Temperatura, unidades de temperatura, presión, unidades de presión, nombre del soluto, peso molecular del soluto, porcentaje del soluto en el gas rico, liquido absorbente, porcentaje del soluto en el líquido absorbente (≥ 0), nombre del portador (*Opcional), peso molecular del portador (*Opcional), la relación de concentración – Solute/Absorbente, si la relación es en masa o en volumen, relación soluto, relación absorbente, la cantidad de datos experimentales disponibles y los datos experimentales.	12.- El software recoge los datos ingresados y realiza operaciones con variables de proceso, y condicionales para poder graficar la curva de equilibrio, y la muestra automáticamente en pantalla.
13.- El usuario selecciona "regresa a la pestaña anterior".	14.- El software muestra opciones adicionales, valores mínimos (Selección por defecto) y opciones de concentración conocida o porcentaje de recuperación.
15.- El usuario selecciona la opción de concentración conocida (% de soluto en gas pobre o % de soluto en el líquido rico) o porcentaje de recuperación (% de soluto recuperado en el líquido o % de soluto	16.- El software procesa los datos ingresados y con la ayuda de algoritmos de IA para la tendencia de curva de equilibrio y para los valores mínimos de flujo, determina la fracción molar que satisface a las condiciones de los

recuperado en el gas) e ingresa el dato necesario. Y selecciona "Calcular equilibrio".	datos proporcionados. Carga los resultados al cuadro resumen de flujos de fracciones molares, y muestra resultado de $(Ls/Gs)_{min}$. (El resumen masico queda aún pendiente dado que no se ingresó el valor de flujo con el que se alimentara al equipo).
17.- El usuario selecciona el botón "Graficar".	18.- El software muestra gráficamente la línea de operación en su valor mínimo, la curva de equilibrio, los puntos de los datos experimentales y los limites según la información que se proporcionó.
Cursos alternos de los eventos	
Si los datos son absurdos, como datos negativos y otros para los diagramas de absorción, el software mostrara algunos errores para guía del usuario. Si el usuario ingresa datos que no son correlativos a la curva de equilibrio de soluciones diluidas, aplica IA para poder detectarlos y tomar decisión de si omitirlos o utilizarlos en el proceso de construcción de la curva de equilibrio. Si los valores experimentales no están dentro del rango de las fracciones molares solicitadas, el software no podrá hacer las iteraciones para encontrar el valor mínimo.	

Caso de Uso	Cálculo de flujos mínimos y experimentales en equipo de Absorción. (En base a la ley de Raoult o Ley de Henry)
Actor	Usuario
Tipo	Primario
Descripción	El usuario ingresa a la primera opción del software, e ingresa los datos conocidos del problema que son: <ul style="list-style-type: none"> • Temperatura (y unidades). • Presión (y unidades). • Solute (y peso molecular del soluto). • Porcentaje del soluto en el gas rico. • Liquido absorbente (y peso molecular).

	<ul style="list-style-type: none"> • Porcentaje del soluto en el líquido absorbente (≥ 0). • Portador (y peso molecular del portador) (*opcional). • Indicar si la curva de equilibrio sigue la ley de Henry o la ley de Raoult. • Ingresar el coeficiente de Henry o la tensión de vapor según sea el caso. • Indicar la amplitud de los datos que ingresaran. • Ingresar la cantidad de datos con lo que se trabajara. <p>Selecciona “Calcular relaciones de equilibrio” y seguidamente muestra la curva de equilibrio en función de los datos administrados.</p> <p>Luego se selecciona la opción de valores mínimos y se ingresa la concentración conocida a la salida o recuperada, de ser el caso, para el gas pobre o para el líquido rico.</p> <p>Selecciona “Calcular equilibrio” y el programa brinda los siguientes resultados:</p> <p>Gráfico, valores de flujos molares de entrada y salida, valores masicos de entrada y salida de equipo, $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min}$ y flujos mínimos.</p>
Referencia Cruzada	R.1, R.5, R.7, R.8, R.10, R.11, R.13, R.14, R.15, R.17.
Curso Normal de los Eventos	
Actor	Sistema
1.- El usuario ingresa al software (App).	2.- El software muestra la caratula de la App.
3.- El usuario selecciona “Inicio”.	4.- El software muestra el menú principal.
5.- El usuario selecciona “Equipo de absorción”.	6.- El software muestra opciones: <ul style="list-style-type: none"> • Datos experimentales • Curva de equilibrio según ley de Henry o Raoult.

7.- El usuario selecciona, curva de equilibrio según ley de Henry o Raoult.	8.- El software muestra dos imágenes del equipo, de valores mínimos y de etapas.
9.- El usuario selecciona valores mínimos.	10.- El software ingresa a la activity (interfase) de la opción seleccionada.
11.- El usuario ingresa los datos necesarios para el cálculo: Temperatura, unidades de temperatura, presión, unidades de presión, nombre del soluto, peso molecular del soluto, porcentaje del soluto en el gas rico, liquido absorbente, porcentaje del soluto en el líquido absorbente (≥ 0), nombre del portador (*Opcional), peso molecular del portador (*Opcional), selecciona la opción de Ley de Henry o ley de Raoult, ingresa el valor del coeficiente de Henry o tensión de vapor según sea el caso y la cantidad de datos con los que se trabajara.	12.- El software recoge los datos ingresados y realiza operaciones con variables de proceso, y condicionales para poder graficar la curva de equilibrio, y la muestra automáticamente en pantalla.
13.- El usuario selecciona “regresa a la pestaña anterior”.	14.- El software muestra opciones adicionales, valores mínimos (Selección por defecto) y opciones de concentración conocida o porcentaje de recuperación.
15.- El usuario selecciona la opción de concentración conocida (% de soluto en gas pobre o % de soluto en el líquido rico) o porcentaje de recuperación (% de soluto recuperado en el líquido o % de soluto recuperado en el gas) e ingresa el dato necesario. Y selecciona “Calcular equilibrio”.	16.- El software procesa los datos ingresados y con la ayuda de algoritmos de IA para la tendencia de curva de equilibrio y para los valores mínimos de flujo, determina la fracción molar que satisface a las condiciones de los datos proporcionados. Carga los resultados al cuadro resumen de flujos de fracciones molares, y muestra resultado de $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min}$. (El resumen masico queda aún pendiente dado que no se ingresó el valor de flujo con el que se alimentara al equipo).
17.- El usuario selecciona el botón “Graficar”.	18.- El software muestra gráficamente la línea de operación en su valor mínimo, la curva de

	equilibrio, los puntos de los datos experimentales y los límites según la información que se proporcionó.
Cursos alternos de los eventos	
Si en la cantidad de datos seleccionada no llega al valor del límite, el software le solicitará incrementar la cantidad de datos, de ser el caso de haber llegado al límite de 20 datos que brinda la aplicación, se recomienda incremental el valor de la amplitud de datos.	

Caso de Uso	Cálculo de flujos mínimos y experimentales en equipo de Desorción. (Datos experimentales)
Actor	Usuario
Tipo	Primario
Descripción	<p>El usuario ingresa a la primera opción del software, e ingresa los datos conocidos del problema que son:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Temperatura (y unidades). • Presión (y unidades). • Solute (y peso molecular del soluto). • Porcentaje del soluto en el gas rico. • Gas desorbente (y peso molecular). • Porcentaje del soluto en el gas desorbente (≥ 0). • Portador (y peso molecular del portador) (*opcional). • Ingresar la relación de concentración – Solute/Desorbente (Masa o volumen). • Indicar la cantidad de datos disponibles. • Ingresar los datos experimentales. <p>Selecciona “Calcular relaciones de equilibrio” y seguidamente muestra la curva de equilibrio en función de los datos administrados.</p> <p>Luego se selecciona la opción de valores mínimos y se ingresa la concentración</p>

	<p>conocida a la salida o recuperada, de ser el caso, para el gas rico o para el líquido pobre. Selecciona “Calcular equilibrio” y el programa brinda los siguientes resultados:</p> <p>Gráfico, valores de flujos molares de entrada y salida, valores masicos de entrada y salida de equipo, $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{max}$ y flujos mínimos.</p>
Referencia Cruzada	R.2, R.6, R.7, R.8, R.12, R.13, R.14, R.15, R.17.
Curso Normal de los Eventos	
Actor	Sistema
1.- El usuario ingresa al software (App).	2.- El software muestra la caratula de la App.
3.- El usuario selecciona “Inicio”.	4.- El software muestra el menú principal.
5.- El usuario selecciona “Equipo de desorción”.	6.- El software muestra opciones: <ul style="list-style-type: none"> • Datos experimentales • Curva de equilibrio según ley de Henry o Raoult.
7.- El usuario selecciona datos experimentales.	8.- El software muestra dos imágenes del equipo, de valores mínimos y de etapas.
9.- El usuario selecciona valores mínimos.	10.- El software ingresa a la activity (interfase) de la opción seleccionada.
11.- El usuario ingresa los datos necesarios para el cálculo: Temperatura, unidades de temperatura, presión, unidades de presión, nombre del soluto, peso molecular del soluto, porcentaje del soluto en el líquido rico, gas desorbente, porcentaje del soluto en el gas desorbente (≥ 0), nombre del portador (*Opcional), peso molecular del portador (*Opcional), la relación de concentración – Solute/Desorbente, si la relación es en masa o en volumen, relación soluto, relación desorbente, la cantidad de datos	12.- El software recoge los datos ingresados y realiza operaciones con variables de proceso, y condicionales para poder graficar la curva de equilibrio, y la muestra automáticamente en pantalla.

experimentales disponibles y los datos experimentales.	
13.- El usuario selecciona “regresa a la pestaña anterior”.	14.- El software muestra opciones adicionales, valores mínimos (Selección por defecto) y opciones de concentración conocida o porcentaje de recuperación.
15.- El usuario selecciona la opción de concentración conocida (% de soluto en gas rico o % de soluto en el líquido pobre) o porcentaje de recuperación (% de soluto recuperado en el líquido o % de soluto recuperado en el gas) e ingresa el dato necesario. Y selecciona “Calcular equilibrio”.	16.- El software procesa los datos ingresados y con la ayuda de algoritmos de IA para la tendencia de curva de equilibrio y para los valores mínimos de flujo, determina la fracción molar que satisface a las condiciones de los datos proporcionados. Carga los resultados al cuadro resumen de flujos de fracciones molares, y muestra resultado de $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{max}$. (El resumen masico queda aún pendiente dado que no se ingresó el valor de flujo con el que se alimentara al equipo).
17.- El usuario selecciona el botón “Graficar”.	18.- El software muestra gráficamente la línea de operación en su valor mínimo, la curva de equilibrio, los puntos de los datos experimentales y los limites según la información que se proporcionó.
Cursos alternos de los eventos	
Si los datos son absurdos, como datos negativos y otros para los diagramas de desorción, el software mostrara algunos errores para guía del usuario. Si el usuario ingresa datos que no son correlativos a la curva de equilibrio de soluciones diluidas, aplica IA para poder detectarlos y tomar decisión de si omitirlos o utilizarlos en el proceso de construcción de la curva de equilibrio. Si los valores experimentales no están dentro del rango de las fracciones molares solicitadas, el software no podrá hacer las iteraciones para encontrar el valor mínimo.	

Caso de Uso	Cálculo de flujos mínimos y experimentales en equipo de desorción. (En base a la ley de Raoult o Ley de Henry)
--------------------	---

Actor	Usuario
Tipo	Primario
Descripción	<p>El usuario ingresa a la primera opción del software, e ingresa los datos conocidos del problema que son:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Temperatura (y unidades). • Presión (y unidades). • Solute (y peso molecular del soluto). • Porcentaje del soluto en el gas rico. • Gas desorbente (y peso molecular). • Porcentaje del soluto en el gas desorbente (≥ 0). • Portador (y peso molecular del portador) (*opcional). • Indicar si la curva de equilibrio sigue la ley de Henry o la ley de Raoult. • Ingresar el coeficiente de Henry o la tensión de vapor según sea el caso. • Indicar la amplitud de los datos que ingresaran. • Ingresar la cantidad de datos con lo que se trabajará. <p>Selecciona "Calcular relaciones de equilibrio" y seguidamente muestra la curva de equilibrio en función de los datos administrados.</p> <p>Luego se selecciona la opción de valores mínimos y se ingresa la concentración conocida a la salida o recuperada, de ser el caso, para el gas rico o para el líquido pobre.</p> <p>Selecciona "Calcular equilibrio" y el programa brinda los siguientes resultados:</p> <p>Gráfico, valores de flujos molares de entrada y salida, valores masicos de entrada y salida de equipo, $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{max}$ y flujos mínimos.</p>

Referencia Cruzada	R.2, R.6, R.7, R.8, R.10, R.11, R.13, R.14, R.15, R.17.
Curso Normal de los Eventos	
Actor	Sistema
1.- El usuario ingresa al software (App).	2.- El software muestra la caratula de la App.
3.- El usuario selecciona "Inicio".	4.- El software muestra el menú principal.
5.- El usuario selecciona "Equipo de desorción".	6.- El software muestra opciones: <ul style="list-style-type: none"> • Datos experimentales • Curva de equilibrio según ley de Henry o Raoult.
7.- El usuario selecciona "Curva de equilibrio según ley de Henry o Raoult".	8.- El software muestra dos imágenes del equipo, de valores mínimos y de etapas.
9.- El usuario selecciona valores mínimos.	10.- El software ingresa a la activity (interfase) de la opción seleccionada.
11.- El usuario ingresa los datos necesarios para el cálculo: Temperatura, unidades de temperatura, presión, unidades de presión, nombre del soluto, peso molecular del soluto, porcentaje del soluto en el líquido rico, gas desorbente, porcentaje del soluto en el gas desorbente (≥ 0), nombre del portador (*Opcional), peso molecular del portador (*Opcional), selecciona la opción de Ley de Henry o ley de Raoult, ingresa el valor del coeficiente de Henry o tensión de vapor según sea el caso y la cantidad de datos con los que se trabajará.	12.- El software recoge los datos ingresados y realiza operaciones con variables de proceso, y condicionales para poder graficar la curva de equilibrio, y la muestra automáticamente en pantalla.
13.- El usuario selecciona "regresa a la pestaña anterior".	14.- El software muestra opciones adicionales, valores mínimos (Selección por defecto) y opciones de concentración conocida o porcentaje de recuperación.
15.- El usuario selecciona la opción de concentración conocida (% de soluto en	16.- El software procesa los datos ingresados y con la ayuda de algoritmos de IA para la

<p>gas rico o % de soluto en el líquido pobre) o porcentaje de recuperación (% de soluto recuperado en el líquido o % de soluto recuperado en el gas) e ingresa el dato necesario. Y selecciona "Calcular equilibrio".</p>	<p>tendencia de curva de equilibrio y para los valores mínimos de flujo, determina la fracción molar que satisface a las condiciones de los datos proporcionados. Carga los resultados al cuadro resumen de flujos de fracciones molares, y muestra resultado de $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{max}$. (El resumen masico queda aún pendiente dado que no se ingresó el valor de flujo con el que se alimentara al equipo).</p>
<p>17.- El usuario selecciona el botón "Graficar".</p>	<p>18.- El software muestra gráficamente la línea de operación en su valor mínimo, la curva de equilibrio, los puntos de los datos experimentales y los limites según la información que se proporcionó.</p>
<p>Cursos alternos de los eventos</p>	
<p>Si en la cantidad de datos seleccionada no llega al valor del límite, el software le solicitara incrementar la cantidad de datos, de ser el caso de haber llegado al límite de 20 datos que brinda la aplicación, se recomienda incremental el valor de la amplitud de datos.</p>	

<p>Caso de Uso</p>	<p>Cálculo de etapas o platos teóricos en equipo de Absorción. (Datos experimentales)</p>
<p>Actor</p>	<p>Usuario</p>
<p>Tipo</p>	<p>Primario</p>
<p>Descripción</p>	<p>El usuario ingresa a la primera opción del software, e ingresa los datos conocidos del problema que son:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Temperatura (y unidades). • Presión (y unidades). • Soluto (y peso molecular del soluto). • Porcentaje del soluto en el gas rico. • Líquido absorbente (y peso molecular). • Porcentaje del soluto en el líquido absorbente (≥ 0).

	<ul style="list-style-type: none"> • Portador (y peso molecular del portador) (*opcional). • Ingresar la relación de concentración – Solute/Absorbente (Masa o volumen). • Indicar la cantidad de datos disponibles. • Ingresar los datos experimentales. <p>Selecciona “Calcular relaciones de equilibrio” y seguidamente muestra la curva de equilibrio en función de los datos administrados.</p> <p>Si se calculará con una relación de valores mínimos, se selecciona la opción de valores mínimos y se ingresa la concentración conocida a la salida o recuperada, de ser el caso, para el gas pobre o para el líquido rico.</p> <p>Si se calculará considerando flujos conocido, se debe seleccionar la opción de datos experimentales y se debe habilitar y llenar al menos 2 de flujos ya conocidos.</p> <p>Selecciona “Calcular equilibrio” y el programa brinda los siguientes resultados:</p> <p>Número de etapas, gráfico, valores de flujos molares de entrada y salida, valores masicos de entrada y salida de equipo, $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min}$ y flujos experimentales.</p>
Referencia Cruzada	R.1, R.3, R.5, R.7, R.8, R.9, R.12, R.13, R.14, R.15, R.16, R.17.
Curso Normal de los Eventos	
Actor	Sistema
1.- El usuario ingresa al software (App).	2.- El software muestra la caratula de la App.
3.- El usuario selecciona “Inicio”.	4.- El software muestra el menú principal.
5.- El usuario selecciona “Equipo de absorción”.	6.- El software muestra opciones: <ul style="list-style-type: none"> • Datos experimentales

	<ul style="list-style-type: none"> • Curva de equilibrio según ley de Henry o Raoult.
7.- El usuario selecciona datos experimentales.	8.- El software muestra dos imágenes del equipo, de valores mínimos y de etapas.
9.- El usuario selecciona valores mínimos.	10.- El software ingresa a la activity (interfase) de la opción seleccionada. (Muestra un pequeño resumen del equipo seleccionado y explica el funcionamiento una torre de absorción)
11.- El usuario ingresa los datos necesarios para el cálculo: Temperatura, unidades de temperatura, presión, unidades de presión, nombre del soluto, peso molecular del soluto, porcentaje del soluto en el gas rico, líquido absorbente, porcentaje del soluto en el líquido absorbente (≥ 0), nombre del portador (*Opcional), peso molecular del portador (*Opcional), la relación de concentración – Solutos/Absorbente, si la relación es en masa o en volumen, relación soluto, relación absorbente, la cantidad de datos experimentales disponibles y los datos experimentales.	12.- El software recoge los datos ingresados y realiza operaciones con variables de proceso, y condicionales para poder graficar la curva de equilibrio, y la muestra automáticamente en pantalla.
13.- El usuario selecciona “regresa a la pestaña anterior”.	14.- El software muestra opciones adicionales, valores mínimos (Selección por defecto) y opciones de concentración conocida o porcentaje de recuperación.
15.- El usuario selecciona la opción de concentración conocida (% de soluto en gas pobre o % de soluto en el líquido rico) o porcentaje de recuperación (% de soluto recuperado en el líquido o % de soluto recuperado en el gas) e ingresa el dato necesario. Y selecciona “Calcular equilibrio”.	16.- El software procesa los datos ingresados y con la ayuda de algoritmos de IA para la tendencia de curva de equilibrio y para los valores mínimos de flujo, determina la fracción molar que satisface a las condiciones de los datos proporcionados. Carga los resultados al

	cuadro resumen de flujos de fracciones molares, y muestra resultado de $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min}$.
17.- El usuario selecciona valores experimentales.	18.- El software muestra un nuevo menú de número de moles o caudal del gas para seleccionar.
<p>19.- El usuario ingresa los datos conocidos.</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ Si se conoce el número de moles en el gas rico, gas pobre, liquido rico o liquido pobre según la concentración o recuperación conocida (Ingresar la alimentación en número de moles directamente en el cuadro de la parte inferior). ✓ Si se conoce el caudal o flujo del gas, (Ingresar con las respectivas unidades). <p>Luego selecciona la pestaña de exceso Ls Experimental (Liquido libre de soluto), e ingresa el valor del porcentaje en función del valor mínimo de flujo. (100% es el valor mínimo).</p> <p>Luego selecciona el botón "Calcular equilibrio"</p>	<p>20.- El software alimenta el cuadro resumen de ingreso y salida de flujos, determina baja limites propuesto por IA el número de etapas necesarias para el proceso. Muestra en la parte inferior los datos más relevantes del cálculo, como son El número de etapas, La relación $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min}$, Gs experimental, Ls mínimo, Ls Experimental. Y habilita las opciones de ver resumen de valores masicos de entrada y salida y la opción de ver el proceso y etapas en un diagrama.</p>
21.- El usuario selecciona el botón "Ver resumen".	22.- El software muestra resumen de todos los valores masicos en gramos de ingreso y salida del equipo y la relación proporcional de masa del líquido y gas.
23.- El usuario selecciona el botón "Graficar".	24.- El software muestra gráficamente la línea de operación en su valor experimental, la curva de equilibrio, los puntos de los datos experimentales, los limites según la información que se proporcionó y el gráfico de

	las etapas correspondientes y necesarias para el equipo.
Cursos alternos de los eventos	
<p>Si los datos son absurdos, como datos negativos y otros para los diagramas de absorción, el software mostrara algunos errores para guía del usuario. Si el usuario ingresa datos que no son correlativos a la curva de equilibrio de soluciones diluidas, aplica IA para poder detectarlos y tomar decisión de si omitirlos o utilizarlos en el proceso de construcción de la curva de equilibrio. Si los valores experimentales no están dentro del rango de las fracciones molares solicitadas, el software no podrá hacer las iteraciones para encontrar el valor mínimo, así como tampoco hacer las iteraciones para los valores experimentales. Si se desea encontrar directamente el valor de la línea de operación experimental, sin el mínimo (Aunque es un caso muy raro), es necesario conocer al menos los valores de 2 flujos para el cuadro resumen, para no tener un resultado absurdo.</p>	

Caso de Uso	Cálculo de etapas o platos teóricos en equipo de Absorción. (En base a la ley de Raoult o Ley de Henry)
Actor	Usuario
Tipo	Primario
Descripción	<p>El usuario ingresa a la primera opción del software, e ingresa los datos conocidos del problema que son:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Temperatura (y unidades). • Presión (y unidades). • Solute (y peso molecular del soluto). • Porcentaje del soluto en el gas rico. • Líquido absorbente (y peso molecular). • Porcentaje del soluto en el líquido absorbente (≥ 0). • Portador (y peso molecular del portador) (*opcional). • Indicar si la curva de equilibrio sigue la ley de Henry o la ley de Raoult.

	<ul style="list-style-type: none"> • Ingresar el coeficiente de Henry o la tensión de vapor según sea el caso. • Indicar la amplitud de los datos que ingresaran. • Ingresar la cantidad de datos con lo que se trabajara. <p>Selecciona “Calcular relaciones de equilibrio” y seguidamente muestra la curva de equilibrio en función de los datos administrados.</p> <p>Si se calculará con una relación de valores mínimos, se selecciona la opción de valores mínimos y se ingresa la concentración conocida a la salida o recuperada, de ser el caso, para el gas pobre o para el líquido rico.</p> <p>Si se calculará considerando flujos conocido, se debe seleccionar la opción de datos experimentales y se debe habilitar y llenar al menos 2 de flujos ya conocidos.</p> <p>Selecciona “Calcular equilibrio” y el programa brinda los siguientes resultados:</p> <p>Número de etapas, gráfico, valores de flujos molares de entrada y salida, valores masicos de entrada y salida de equipo, $(Ls/Gs)_{min}$ y flujos experimentales.</p>
Referencia Cruzada	R.1, R.3, R.5, R.7, R.8, R.9, R.10, R.11, R.13, R.14, R.15, R.16, R.17.
Curso Normal de los Eventos	
Actor	Sistema
1.- El usuario ingresa al software (App).	2.- El software muestra la caratula de la App.
3.- El usuario selecciona “Inicio”.	4.- El software muestra el menú principal.
5.- El usuario selecciona “Equipo de absorción”.	6.- El software muestra opciones: <ul style="list-style-type: none"> • Datos experimentales • Curva de equilibrio según ley de Henry o Raoult.

7.- El usuario selecciona, curva de equilibrio según ley de Henry o Raoult.	8.- El software muestra dos imágenes del equipo, de valores mínimos y de etapas.
9.- El usuario selecciona valores mínimos.	10.- El software ingresa a la activity (interfase) de la opción seleccionada.
11.- El usuario ingresa los datos necesarios para el cálculo: Temperatura, unidades de temperatura, presión, unidades de presión, nombre del soluto, peso molecular del soluto, porcentaje del soluto en el gas rico, liquido absorbente, porcentaje del soluto en el líquido absorbente (≥ 0), nombre del portador (*Opcional), peso molecular del portador (*Opcional), selecciona la opción de Ley de Henry o ley de Raoult, ingresa el valor del coeficiente de Henry o tensión de vapor según sea el caso y la cantidad de datos con los que se trabajara.	12.- El software recoge los datos ingresados y realiza operaciones con variables de proceso, y condicionales para poder graficar la curva de equilibrio, y la muestra automáticamente en pantalla.
13.- El usuario selecciona “regresa a la pestaña anterior”.	14.- El software muestra opciones adicionales, valores mínimos (Selección por defecto) y opciones de concentración conocida o porcentaje de recuperación.
15.- El usuario selecciona la opción de concentración conocida (% de soluto en gas pobre o % de soluto en el líquido rico) o porcentaje de recuperación (% de soluto recuperado en el líquido o % de soluto recuperado en el gas) e ingresa el dato necesario. Y selecciona “Calcular equilibrio”.	16.- El software procesa los datos ingresados y con la ayuda de algoritmos de IA para la tendencia de curva de equilibrio y para los valores mínimos de flujo, determina la fracción molar que satisface a las condiciones de los datos proporcionados. Carga los resultados al cuadro resumen de flujos de fracciones molares, y muestra resultado de $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min}$.
17.- El usuario selecciona valores experimentales.	18.- El software muestra un nuevo menú de número de moles o caudal del gas para seleccionar.
19.- El usuario ingresa los datos conocidos.	20.- El software alimenta el cuadro resumen de ingreso y salida de flujos, determina baja

<ul style="list-style-type: none"> ✓ Si se conoce el número de moles en el gas rico, gas pobre, liquido rico o liquido pobre según la concentración o recuperación conocida (Ingresar la alimentación en número de moles directamente en el cuadro de la parte inferior). ✓ Si se conoce el caudal o flujo del gas, (Ingresar con las respectivas unidades). <p>Luego selecciona la pestaña de exceso L_s Experimental (Liquido libre de soluto), e ingresa el valor del porcentaje en función del valor mínimo de flujo. (100% es el valor mínimo).</p> <p>Luego selecciona el botón "Calcular equilibrio"</p>	<p>limites propuesto por IA el número de etapas necesarias para el proceso. Muestra en la parte inferior los datos más relevantes del cálculo, como son El número de etapas, La relación $(L_s/G_s)_{min}$, G_s experimental, L_s mínimo, L_s Experimental. Y habilita las opciones de ver resumen de valores masicos de entrada y salida y la opción de ver el proceso y etapas en un diagrama.</p>
<p>21.- El usuario selecciona el botón "Ver resumen".</p>	<p>22.- El software muestra resumen de todos los valores masicos en gramos de ingreso y salida del equipo y la relación proporcional de masa del líquido y gas.</p>
<p>23.- El usuario selecciona el botón "Graficar".</p>	<p>24.- El software muestra gráficamente la línea de operación en su valor experimental, la curva de equilibrio, los puntos de los datos experimentales, los limites según la información que se proporcionó y el gráfico de las etapas correspondientes y necesarias para el equipo.</p>
<p>Cursos alternos de los eventos</p>	
<p>Si en la cantidad de datos seleccionada no llega al valor del límite, el software le solicitara incrementar la cantidad de datos, de ser el caso de haber llegado al límite de 20 datos que brinda la aplicación, se recomienda incremental el valor de la amplitud de datos. Si se desea encontrar directamente el valor de la línea de operación experimental, sin el mínimo</p>	

(Aunque es un caso muy raro), es necesario conocer al menos los valores de 2 flujos para el cuadro resumen, para no tener un resultado absurdo.

Caso de Uso	Cálculo de etapas o platos teóricos en equipo de Desorción. (Datos experimentales)
Actor	Usuario
Tipo	Primario
Descripción	<p>El usuario ingresa a la primera opción del software, e ingresa los datos conocidos del problema que son:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Temperatura (y unidades). • Presión (y unidades). • Solute (y peso molecular del soluto). • Porcentaje del soluto en el gas rico. • Gas desorbente (y peso molecular). • Porcentaje del soluto en el gas desorbente (≥ 0). • Portador (y peso molecular del portador) (*opcional). • Ingresar la relación de concentración – Solute/Desorbente (Masa o volumen). • Indicar la cantidad de datos disponibles. • Ingresar los datos experimentales. <p>Selecciona “Calcular relaciones de equilibrio” y seguidamente muestra la curva de equilibrio en función de los datos administrados.</p> <p>Si se calculará con una relación de valores mínimos, se selecciona la opción de valores mínimos y se ingresa la concentración conocida a la salida o recuperada, de ser el caso, para el gas rico o para el líquido pobre.</p> <p>Si se calculará considerando flujos conocido, se debe seleccionar la opción de datos</p>

	<p>experimentales y se debe habilitar y llenar al menos 2 de flujos ya conocidos en el cuadro mostrado.</p> <p>Selecciona "Calcular equilibrio" y el programa brinda los siguientes resultados:</p> <p>Número de etapas o platos teóricos, grafico, valores de flujos molares de entrada y salida, valores masicos de entrada y salida de equipo, $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{max}$ y flujos experimentales.</p>
Referencia Cruzada	R.2, R.4, R.6, R.7, R.8, R.9, R.12, R.13, R.14, R.15, R.16, R.17.
Curso Normal de los Eventos	
Actor	Sistema
1.- El usuario ingresa al software (App).	2.- El software muestra la caratula de la App.
3.- El usuario selecciona "Inicio".	4.- El software muestra el menú principal.
5.- El usuario selecciona "Equipo de desorción".	6.- El software muestra opciones: <ul style="list-style-type: none"> • Datos experimentales • Curva de equilibrio según ley de Henry o Raoult.
7.- El usuario selecciona datos experimentales.	8.- El software muestra dos imágenes del equipo, de valores mínimos y de etapas.
9.- El usuario selecciona valores mínimos.	10.- El software ingresa a la activity (interfase) de la opción seleccionada.
11.- El usuario ingresa los datos necesarios para el cálculo: Temperatura, unidades de temperatura, presión, unidades de presión, nombre del soluto, peso molecular del soluto, porcentaje del soluto en el líquido rico, gas desorbente, porcentaje del soluto en el gas desorbente (≥ 0), nombre del portador (*Opcional), peso molecular del portador (*Opcional), la relación de concentración – Solute/Desorbente, si la relación es en	12.- El software recoge los datos ingresados y realiza operaciones con variables de proceso, y condicionales para poder graficar la curva de equilibrio, y la muestra automáticamente en pantalla.

<p>masa o en volumen, relación soluto, relación desorbente, la cantidad de datos experimentales disponibles y los datos experimentales.</p>	
<p>13.- El usuario selecciona “regresa a la pestaña anterior”.</p>	<p>14.- El software muestra opciones adicionales, valores mínimos (Selección por defecto) y opciones de concentración conocida o porcentaje de recuperación.</p>
<p>15.- El usuario selecciona la opción de concentración conocida (% de soluto en gas rico o % de soluto en el líquido pobre) o porcentaje de recuperación (% de soluto recuperado en el líquido o % de soluto recuperado en el gas) e ingresa el dato necesario. Y selecciona “Calcular equilibrio”.</p>	<p>16.- El software procesa los datos ingresados y con la ayuda de algoritmos de IA para la tendencia de curva de equilibrio y para los valores mínimos de flujo, determina la fracción molar que satisface a las condiciones de los datos proporcionados. Carga los resultados al cuadro resumen de flujos de fracciones molares, y muestra resultado de $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{max}$. (El resumen masico queda aún pendiente dado que no se ingresó el valor de flujo con el que se alimentara al equipo).</p>
<p>17.- El usuario selecciona valores experimentales.</p>	<p>18.- El software muestra un nuevo menú de número de moles o caudal del gas para seleccionar.</p>
<p>19.- El usuario ingresa los datos conocidos.</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ Si se conoce el número de moles en el gas rico, gas pobre, liquido rico o liquido pobre según la concentración o recuperación conocida (Ingresar la alimentación en número de moles directamente en el cuadro de la parte inferior). ✓ Si se conoce el caudal o flujo del gas, (Ingresar con las respectivas unidades). 	<p>20.- El software alimenta el cuadro resumen de ingreso y salida de flujos, determina baja limites propuesto por IA el número de etapas necesarias para el proceso. Muestra en la parte inferior los datos más relevantes del cálculo, como son El número de etapas, La relación $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{max}$, Ls experimental, Gs mínimo, Gs Experimental. Y habilita las opciones de ver resumen de valores masicos de entrada y salida y la opción de ver el proceso y etapas en un diagrama.</p>

<p>Luego selecciona la pestaña de exceso G_s Experimental (Gas libre de soluto), e ingresa el valor del porcentaje en función del valor mínimo de flujo. (100% es el valor mínimo).</p> <p>Luego selecciona el botón "Calcular equilibrio"</p>	
<p>21.- El usuario selecciona el botón "Ver resumen".</p>	<p>22.- El software muestra resumen de todos los valores masicos en gramos de ingreso y salida del equipo y la relación proporcional de masa del líquido y gas.</p>
<p>23.- El usuario selecciona el botón "Graficar".</p>	<p>24.- El software muestra gráficamente la línea de operación en su valor experimental, la curva de equilibrio, los puntos de los datos experimentales, los limites según la información que se proporcionó y el gráfico de las etapas correspondientes y necesarias para el equipo.</p>
<p>Cursos alternos de los eventos</p>	
<p>Si los datos son absurdos, como datos negativos y otros para los diagramas de desorción, el software mostrara algunos errores para guía del usuario. Si el usuario ingresa datos que no son correlativos a la curva de equilibrio de soluciones diluidas, aplica IA para poder detectarlos y tomar decisión de si omitirlos o utilizarlos en el proceso de construcción de la curva de equilibrio. Si los valores experimentales no están dentro del rango de las fracciones molares solicitadas, el software no podrá hacer las iteraciones para encontrar el valor mínimo, ni el valor experimental. Si se desea encontrar directamente el valor de la línea de operación experimental, sin el mínimo (Aunque es un caso muy raro), es necesario conocer al menos los valores de 2 flujos para el cuadro resumen, para no tener un resultado absurdo.</p>	

<p>Caso de Uso</p>	<p>Cálculo de etapas o platos teóricos en equipo de Desorción. (En base a la ley de Raoult o Ley de Henry)</p>
<p>Actor</p>	<p>Usuario</p>
<p>Tipo</p>	<p>Primario</p>

<p>Descripción</p>	<p>El usuario ingresa a la primera opción del software, e ingresa los datos conocidos del problema que son:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Temperatura (y unidades). • Presión (y unidades). • Solute (y peso molecular del soluto). • Porcentaje del soluto en el gas rico. • Gas desorbente (y peso molecular). • Porcentaje del soluto en el gas desorbente (≥ 0). • Portador (y peso molecular del portador) (*opcional). • Indicar si la curva de equilibrio sigue la ley de Henry o la ley de Raoult. • Ingresar el coeficiente de Henry o la tensión de vapor según sea el caso. • Indicar la amplitud de los datos que ingresaran. • Ingresar la cantidad de datos con lo que se trabajará. <p>Selecciona "Calcular relaciones de equilibrio" y seguidamente muestra la curva de equilibrio en función de los datos administrados.</p> <p>Si se calculará con una relación de valores mínimos, se selecciona la opción de valores mínimos y se ingresa la concentración conocida a la salida o recuperada, de ser el caso, para el gas rico o para el líquido pobre.</p> <p>Si se calculará considerando flujos conocido, se debe seleccionar la opción de datos experimentales y se debe habilitar y llenar al menos 2 de flujos ya conocidos en el cuadro mostrado.</p> <p>Selecciona "Calcular equilibrio" y el programa brinda los siguientes resultados:</p>
---------------------------	--

	Número de etapas o platos teóricos, gráfico, valores de flujos molares de entrada y salida, valores masicos de entrada y salida de equipo, $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{max}$ y flujos experimentales.
Referencia Cruzada	R.2, R.4, R.6, R.7, R.8, R.9, R.10, R.11, R.13, R.14, R.15, R.16, R.17.
Curso Normal de los Eventos	
Actor	Sistema
1.- El usuario ingresa al software (App).	2.- El software muestra la caratula de la App.
3.- El usuario selecciona "Inicio".	4.- El software muestra el menú principal.
5.- El usuario selecciona "Equipo de desorción".	6.- El software muestra opciones: <ul style="list-style-type: none"> • Datos experimentales • Curva de equilibrio según ley de Henry o Raoult.
7.- El usuario selecciona "Curva de equilibrio según ley de Henry o Raoult".	8.- El software muestra dos imágenes del equipo, de valores mínimos y de etapas.
9.- El usuario selecciona valores mínimos.	10.- El software ingresa a la activity (interfase) de la opción seleccionada.
11.- El usuario ingresa los datos necesarios para el cálculo: Temperatura, unidades de temperatura, presión, unidades de presión, nombre del soluto, peso molecular del soluto, porcentaje del soluto en el líquido rico, gas desorbente, porcentaje del soluto en el gas desorbente (≥ 0), nombre del portador (*Opcional), peso molecular del portador (*Opcional), selecciona la opción de Ley de Henry o ley de Raoult, ingresa el valor del coeficiente de Henry o tensión de vapor según sea el caso y la cantidad de datos con los que se trabajará.	12.- El software recoge los datos ingresados y realiza operaciones con variables de proceso, y condicionales para poder graficar la curva de equilibrio, y la muestra automáticamente en pantalla.

<p>13.- El usuario selecciona “regresa a la pestaña anterior”.</p>	<p>14.- El software muestra opciones adicionales, valores mínimos (Selección por defecto) y opciones de concentración conocida o porcentaje de recuperación.</p>
<p>15.- El usuario selecciona la opción de concentración conocida (% de soluto en gas rico o % de soluto en el líquido pobre) o porcentaje de recuperación (% de soluto recuperado en el líquido o % de soluto recuperado en el gas) e ingresa el dato necesario. Y selecciona “Calcular equilibrio”.</p>	<p>16.- El software procesa los datos ingresados y con la ayuda de algoritmos de IA para la tendencia de curva de equilibrio y para los valores mínimos de flujo, determina la fracción molar que satisface a las condiciones de los datos proporcionados. Carga los resultados al cuadro resumen de flujos de fracciones molares, y muestra resultado de $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{max}$. (El resumen masico queda aún pendiente dado que no se ingresó el valor de flujo con el que se alimentara al equipo).</p>
<p>17.- El usuario selecciona valores experimentales.</p>	<p>18.- El software muestra un nuevo menú de número de moles o caudal del gas para seleccionar.</p>
<p>19.- El usuario ingresa los datos conocidos.</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ Si se conoce el número de moles en el gas rico, gas pobre, liquido rico o liquido pobre según la concentración o recuperación conocida (Ingresar la alimentación en número de moles directamente en el cuadro de la parte inferior). ✓ Si se conoce el caudal o flujo del gas, (Ingresar con las respectivas unidades). <p>Luego selecciona la pestaña de exceso G_s Experimental (Gas libre de soluto), e ingresa el valor del porcentaje en función del valor mínimo de flujo. (100% es el valor mínimo).</p>	<p>20.- El software alimenta el cuadro resumen de ingreso y salida de flujos, determina baja limites propuesto por IA el número de etapas necesarias para el proceso. Muestra en la parte inferior los datos más relevantes del cálculo, como son El número de etapas, La relación $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{max}$, L_s experimental, G_s mínimo, G_s Experimental. Y habilita las opciones de ver resumen de valores masicos de entrada y salida y la opción de ver el proceso y etapas en un diagrama.</p>

Luego selecciona el botón "Calcular equilibrio"	
21.- El usuario selecciona el botón "Ver resumen".	22.- El software muestra resumen de todos los valores masicos en gramos de ingreso y salida del equipo y la relación proporcional de masa del líquido y gas.
23.- El usuario selecciona el botón "Graficar".	24.- El software muestra gráficamente la línea de operación en su valor experimental, la curva de equilibrio, los puntos de los datos experimentales, los limites según la información que se proporcionó y el gráfico de las etapas correspondientes y necesarias para el equipo.
Cursos alternos de los eventos	
Si en la cantidad de datos seleccionada no llega al valor del límite, el software le solicitara incrementar la cantidad de datos, de ser el caso de haber llegado al límite de 20 datos que brinda la aplicación, se recomienda incremental el valor de la amplitud de datos. Si se desea encontrar directamente el valor de la línea de operación experimental, sin el mínimo (Aunque es un caso muy raro), es necesario conocer al menos los valores de 2 flujos para el cuadro resumen, para no tener un resultado absurdo.	

Caso de Uso	Resultados del dimensionamiento del equipo
Actor	Usuario
Tipo	Primario
Descripción	<p>El usuario ingresa a la opción del equipo que desea diseñar con el software, e ingresa los datos conocidos del problema que son:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Temperatura (y unidades). • Presión (y unidades). • Solute (y peso molecular del soluto). • Porcentaje del soluto en el líquido rico. • Líquido absorbente o gas desorbente (y peso molecular). *según el caso.

	<ul style="list-style-type: none"> • Porcentaje del soluto en el líquido absorbente o gas desorbente (≥ 0). *según el caso. • Portador (y peso molecular del portador) (*opcional). • Si se conocen los datos experimentales: <ul style="list-style-type: none"> ✓ Ingresar la relación de concentración – Solute/desorbente (Masa o volumen). ✓ Indicar la cantidad de datos disponibles. ✓ Ingresar los datos experimentales. • Si se determinara la curva por constantes de Henry o Raoult: <ul style="list-style-type: none"> ○ Relación de concentración para ley de Henry. ○ Presión parcial para ley Raoult ✓ Indicar la cantidad de datos disponibles. ✓ Ingresar los datos experimentales. • <p>Selecciona “Calcular relaciones de equilibrio” y seguidamente muestra la curva de equilibrio en función de los datos administrados.</p> <p>Si se calculará con una relación de valores mínimos, se selecciona la opción de valores mínimos y se ingresa la concentración conocida a la salida o recuperada, de ser el caso, para el gas rico o para el líquido pobre.</p> <p>Si se calculará considerando flujos conocido, se debe seleccionar la opción de datos</p>
--	--

	<p>experimentales y se debe habilitar y llenar al menos 2 de flujos ya conocidos en el cuadro mostrado.</p> <p>Selecciona "Calcular equilibrio" y el programa brinda los siguientes resultados:</p> <p>Número de etapas o platos teóricos, grafico, valores de flujos molares de entrada y salida, valores masicos de entrada y salida de equipo, $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{max}$ y flujos experimentales.</p>
Referencia Cruzada	R.1, R.2, R.3, R.4, R.5, R.6, R.7, R.8, R.9, R.10, R.11, R.12, R.13, R.14, R.15, R.16, R.17, R.18, R.19, R.20.
Curso Normal de los Eventos	
Actor	Sistema
1.- El usuario ingresa al software (App).	2.- El software muestra la caratula de la App.
3.- El usuario selecciona "Inicio".	4.- El software muestra el menú principal.
5.- El usuario selecciona "Equipo de absorción o desorción".	6.- El software muestra opciones: <ul style="list-style-type: none"> • Datos experimentales • Curva de equilibrio según ley de Henry o Raoult.
7.- El usuario selecciona "Datos experimentales" o "Curva de equilibrio según ley de Henry o Raoult".	8.- El software muestra dos imágenes del equipo, de valores mínimos y de etapas.
9.- El usuario selecciona valores mínimos.	10.- El software ingresa a la activity (interfase) de la opción seleccionada.
11.- El usuario ingresa los datos necesarios para el cálculo.	12.- El software recoge los datos ingresados y realiza operaciones con variables de proceso, y condicionales para poder graficar la curva de equilibrio, y la muestra automáticamente en pantalla.
13.- El usuario selecciona "regresa a la pestaña anterior".	14.- El software muestra opciones adicionales, valores mínimos (Selección por defecto) y opciones de concentración conocida o porcentaje de recuperación.

<p>15.- El usuario selecciona la opción de concentración o porcentaje de recuperación e ingresa el dato necesario. Y selecciona “Calcular equilibrio”.</p>	<p>16.- El software procesa los datos ingresados y con la ayuda de algoritmos de IA para la tendencia de curva de equilibrio y para los valores mínimos de flujo, determina la fracción molar que satisface a las condiciones de los datos proporcionados. Carga los resultados al cuadro resumen de flujos de fracciones molares, y muestra resultado de la relación $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{max}$ o la relación $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min}$ según el caso. (El resumen masico queda aún pendiente dado que no se ingresó el valor de flujo con el que se alimentara al equipo).</p>
<p>17.- El usuario selecciona valores experimentales.</p>	<p>18.- El software muestra un nuevo menú de número de moles o caudal del gas para seleccionar.</p>
<p>19.- El usuario ingresa los datos conocidos. Luego selecciona la pestaña de exceso G_s Experimental, e ingresa el valor del porcentaje en función del valor mínimo de flujo. (100% es el valor mínimo). Luego selecciona el botón “Calcular equilibrio”</p>	<p>20.- El software alimenta el cuadro resumen de ingreso y salida de flujos, determina baja limites propuesto por IA el número de etapas necesarias para el proceso. Muestra en la parte inferior los datos más relevantes del cálculo, como son El número de etapas, La relación $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{max}$ o la relación $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min}$ según el caso, L_s experimental, G_s mínimo, G_s Experimental. Y habilita las opciones de ver resumen de valores masicos de entrada y salida y la opción de ver el proceso y etapas en un diagrama.</p>
<p>20.- El usuario selecciona “Calcular dimensionamiento de la columna”.</p>	<p>21.- El software muestra un nuevo menú de número de moles o caudal del gas para seleccionar.</p>
<p>22.- Luego ingresa los datos necesarios para el dimensionamiento, que son:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Espacio entre bandejas. • Factor de formación de espuma. • Fracción de inundación de (f). 	<p>23.- El software procesa los datos ingresados para determinar:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Dimensionamiento de cada etapa. • Dimensionamiento de la columna.

<ul style="list-style-type: none"> • Tensión superficial. • Densidad del absorbente (Para absorción). • Densidad del desorbente (Para desorción). • Diámetro de perforación de la bandeja (De ser el caso). • Distancia entre centros de perforación (De ser el caso). • Espeso de bandeja (De ser el caso). <p>Y selecciona “Dimensionamiento del equipo”.</p>	
<p>24.- El usuario selecciona el botón “Ver resumen”.</p>	<p>25.- El software muestra resumen de todos los valores masicos en gramos de ingreso y salida del equipo, la relación proporcional de masa del líquido y gas y datos del dimensionamiento del equipo.</p>
<p>Cursos alternos de los eventos</p>	
<p>Si en la cantidad de datos seleccionada no llega al valor del límite, el software le solicitara incrementar la cantidad de datos, de ser el caso de haber llegado al límite de 20 datos que brinda la aplicación, se recomienda incremental el valor de la amplitud de datos. Si se desea encontrar directamente el valor de la línea de operación experimental, sin el mínimo (Aunque es un caso muy raro), es necesario conocer al menos los valores de 2 flujos para el cuadro resumen, para no tener un resultado absurdo.</p>	

3.2.3. Estudio de factibilidad.

3.2.3.1. Factibilidad técnica.

Después del análisis de los requerimientos del usuario, se hace el análisis de la plataforma del sistema operativo Android. Encontrando de esta manera dicho Sistema Operativo capaz de brindar resultados a los Cálculos necesarios y a la implementación de algoritmos de condicional utilizados para los modelos y métodos de IA.

Por lo qué, el sistema es técnicamente factible.

3.2.3.2. Factibilidad operativa.

El software cuenta con la facilidad de estar publicada en la plataforma Play Store (Tienda de aplicaciones de Android). Así mismo cuenta con interfaces amigables para el usuario para el correcto uso.

Por lo que el software es operativamente factible de ser manejado.

3.2.1. Algoritmos fundamentales

3.2.1.1. Algoritmo – Determinación de Relación XY y grafico de Curva de equilibrio (Datos experimentales – Absorción).

Tabla 9. Declaración de variables.

Variable	Descripción
T	Temperatura.
P	Presión.
Sto	Soluto.
PMsto	Peso molecular del soluto.
%sto	Porcentaje del soluto en el gas rico.
Abs	Líquido absorbente.
PMabs	Peso molecular del líquido absorbente.
Port	Gas portador.
PMport	Peso molecular del gas portador.
R	Relación de concentración – Soluto/Absorbente (Masa o volumen).
Rsto	Es la relación del soluto.
Rabs	Es la relación absorbente.
Item	Cantidad de datos experimentales disponibles.

Inicio

Leer datos de proceso de absorción (P, Sto, PMsto, %sto, Abs, PMabs, Port, PMport, R, Rsto, Rabs, Item).

Ingresa los datos experimentales.

//Declara variables de proceso. (Vsto, Vabs, Vt, i, xi, Xi, yi, Yi, Ppi, Ci) (El valor "i" será máximo es 20 datos).

Item = i

Si R = Masa, entonces:

//Halla la fracción molar x

$$x_i = ((R_{sto} * C_i) / PM_{sto}) / (((R_{sto} * C_i) / PM_{sto}) + (R_{abs} / PM_{abs}));$$

//Halla la fracción molar x

$$y_i = P_{pi} / P \quad //\text{Según la (Ec. 3).}$$

$$X_i = x_i / (1 - x_i) \quad //\text{Según la (Ec. 21).}$$

$$Y_i = y_i / (1 - y_i) \quad //\text{Según la (Ec. 16).}$$

Escribir (X_i, Y_i)

Caso contrario, Si R = Volumen, entonces:

$$V_{sto} = C_i$$

$$V_t = (R_{sto} * C_i) + R_{abs}$$

$$x_i = V_{sto} / V_t \quad //\text{Según la ley de Avogadro: } \frac{V_{Sto}}{V_{Total}} = \frac{n_{Sto}}{n_{Total}} .$$

$$y_i = P_{pi} / P \quad //\text{Según la (Ec. 3).}$$

$$X_i = x_i / (1 - x_i) \quad //\text{Según la (Ec. 21).}$$

$$Y_i = y_i / (1 - y_i) \quad //\text{Según la (Ec. 16).}$$

Escribir (X_i, Y_i)

Comprueba los resultados de x_i & y_i en los parámetros [0,1]

//Comprobación de datos para curva de equilibrio.

Inicio

Declara variable del valor tope (tx, ty)

Leer datos de X_i

Inicio de bucle comparativo hasta $i = \text{ítem}$

Si $X_i < 0$ & $X_i \neq \text{indeterminado o infinito}$, entonces $t_x = i$

Leer datos de Y_i

Inicio de bucle comparativo hasta $i = \text{ítem}$

Si $Y_i < 0$ & $Y_i \neq \text{indeterminado o infinito}$, entonces $t_y = i$

Fin

Grafica los resultados (X_{t_x}, Y_{t_y}) (Curva de equilibrio)

Fin

Script del algoritmo (APÉNDICE IA)

3.2.1.2. Algoritmo – Determinación de Relación XY y grafico de Curva de equilibrio (Ley de Raoult o Ley de Henry – Absorción).

Tabla 10. Declaración de variables.

Variable	Descripción
T	Temperatura.
P	Presión.
Sto	Soluto.
PMsto	Peso molecular del soluto.
%sto	Porcentaje del soluto en el gas rico.
Abs	Líquido absorbente.
PMabs	Peso molecular del líquido absorbente.
Port	Gas portador.
PMport	Peso molecular del gas portador.
Ley	Ley de Henry / Ley de Raoult.
CH	Coeficiente de Ley de Henry.
TV	Tensión de vapor (Presión total) – Ley de Raoult.
A	Amplitud de datos.
Item	Cantidad de datos.

Inicio

Leer datos de proceso de absorción (P, Sto, PMsto, %sto, Abs, PMabs, Port, PMport, Ley, CH, TV, A, Item).

//Declara variables de proceso. (rao, i, xi, Xi, yi, Yi) (El valor "i" será máximo es 20 datos).

Item = i

Si Ley = Henry, Entonces:

$x_1 = 0$ // Primera fracción molar x

$x(i) = ((i-1) * A) / 1000$ // Desde la segunda fracción molar x

$y_i = x_i * CH$ //Según la (Ec. 9).

$X_i = x_i / (1 - x_i)$ //Según la (Ec. 21).

$Y_i = y_i / (1 - y_i)$ //Según la (Ec. 16).

Escribir (Xi,Yi)

Caso contrario, Si Ley = Raoult, entonces:

rao = TV / P

$x_1 = 0$ // Primera fracción molar x

$x(i) = ((i-1) * A) / 1000$

$y_i = x_i * rao$ //Según la (Ec. 5).

$X_i = x_i / (1 - x_i)$ //Según la (Ec. 21).

$Y_i = y_i / (1 - y_i)$ //Según la (Ec. 16).

Escribir (Xi,Yi)

Comprueba los resultados de xi & yi en los parámetros [0,1]

//Comprobación de datos para curva de equilibrio.

Inicio

Declara variable del valor tope (tx, ty)

Leer datos de Xi

Inicio de bucle comparativo hasta i = ítem

Si $X_i < 0$ & $X_i \neq$ indeterminado o infinito, entonces $t_x = i$

Leer datos de Yi

Inicio de bucle comparativo hasta i = ítem

Si $Y_i < 0$ & $Y_i \neq$ indeterminado o infinito, entonces $t_y = i$

Fin

Grafica los resultados (Xtx, Yty) (Curva de equilibrio)

Fin

Script del algoritmo (APÉNDICE IIA)

3.2.1.3. Algoritmo – Determinación de Relación XY y grafico de Curva de equilibrio (Datos experimentales – Desorción).

Tabla 11. Declaración de variables.

Variable	Descripción
T	Temperatura.
P	Presión.
Sto	Soluto.
PMsto	Peso molecular del soluto.
%sto	Porcentaje del soluto en el líquido rico.
Des	Líquido absorbente.
PMdes	Peso molecular del líquido desorbente.
Port	Líquido portador.
PMport	Peso molecular del gas portador.
R	Relación de concentración – Solute/Desorbente (Masa o volumen).

Rsto	Es la relación del soluto.
Rdes	Es la relación desorbente.
Item	Cantidad de datos experimentales disponibles.

Inicio

Leer datos de proceso de absorción (P, Sto, PMsto, %sto, Des, PMdes, Port, PMport, R, Rsto, Rdes, Item).

Ingresar los datos experimentales.

//Declara variables de proceso. (Vsto, Vdes, Vt, i, xi, Xi, yi, Yi, Ppi, Ci) (El valor "i" será máximo es 20 datos).

Item = i

Si R = Masa, entonces:

//Halla la fracción molar x

$$xi = ((Rsto * Ci) / PMsto) / (((Rsto * Ci) / PMsto) + (Rdes / PMdes));$$

//Halla la fracción molar x

$$yi = Ppi / P \quad //Según la (Ec. 3).$$

$$Xi = xi / (1 - xi) \quad //Según la (Ec. 21).$$

$$Yi = yi / (1 - yi) \quad //Según la (Ec. 16).$$

Escribir (Xi, Yi)

Caso contrario, Si R = Volumen, entonces:

$$Vsto = Ci$$

$$Vt = (Rsto * Ci) + Rdes$$

$$xi = Vsto / Vt \quad //Según la ley de Avogadro$$

$$yi = Ppi / P \quad //Según la (Ec. 3).$$

$$Xi = xi / (1 - xi) \quad //Según la (Ec. 21).$$

$Y_i = y_i / (1 - y_i)$ //Según la (Ec. 16).

Escribir (X_i, Y_i)

Comprueba los resultados de X_i & Y_i en los parámetros $[0,1]$

//Comprobación de datos para curva de equilibrio.

Inicio

Declara variable del valor tope (t_x, t_y)

Leer datos de X_i

Inicio de bucle comparativo hasta $i = \text{ítem}$

Si $X_i < 0$ & $X_i \neq$ indeterminado o infinito, entonces $t_x = i$

Leer datos de Y_i

Inicio de bucle comparativo hasta $i = \text{ítem}$

Si $Y_i < 0$ & $Y_i \neq$ indeterminado o infinito, entonces $t_y = i$

Fin

Grafica los resultados (X_{t_x}, Y_{t_y}) (Curva de equilibrio)

Fin

Script del algoritmo (APÉNDICE IIIA)

3.2.1.4. Algoritmo – Determinación de Relación XY y grafico de Curva de equilibrio (Ley de Raoult o Ley de Henry – Desorción).

Tabla 12. Declaración de variables.

Variable	Descripción
T	Temperatura
P	Presión
Sto	Soluto.
PMsto	Peso molecular del soluto.

%sto	Porcentaje del soluto en el líquido rico.
Des	Líquido absorbente.
PMdes	Peso molecular del líquido desorbente.
Port	Líquido portador.
PMport	Peso molecular del gas portador.
Ley	Ley de Henry / Ley de Raoult.
CH	Coefficiente de Ley de Henry.
TV	Tensión de vapor (Presión total) – Ley de Raoult.
A	Amplitud de datos.
Item	Cantidad de datos.

Inicio

Leer datos de proceso de absorción (P, Sto, PMsto, %sto, Des, PMdes, Port, PMport, Ley, CH, TV, A, Item).

//Declara variables de proceso. (rao, i, xi, Xi, yi, Yi) (El valor "i" será máximo es 20 datos).

Item = i

Si Ley = Henry, Entonces:

$x_1 = 0$ // Primera fracción molar x

$x(i) = ((i-1) * A) / 1000$ // Desde la segunda fracción molar x

$y_i = x_i * CH$ //Según la (Ec. 9).

$X_i = x_i / (1 - x_i)$ //Según la (Ec. 21).

$Y_i = y_i / (1 - y_i)$ //Según la (Ec. 16).

Escribir (Xi,Yi)

Caso contrario, Si Ley = Raoult, entonces:

$rao = TV / P$

$x_1 = 0$ // Primera fracción molar x

$$x(i) = ((i-1) * A) / 1000$$

$$y_i = x_i * \text{rao} \quad //\text{Según la (Ec. 5).}$$

$$X_i = x_i / (1 - x_i) \quad //\text{Según la (Ec. 21).}$$

$$Y_i = y_i / (1 - y_i) \quad //\text{Según la (Ec. 16).}$$

Escribir (X_i, Y_i)

//Comprobación de datos para curva de equilibrio.

Inicio

Declara variable del valor tope (tx, ty)

Leer datos de X_i

Inicio de bucle comparativo hasta i = ítem

Si X_i < 0 & X_i ≠ indeterminado o infinito, entonces tx = i

Leer datos de Y_i

Inicio de bucle comparativo hasta i = ítem

Si Y_i < 0 & Y_i ≠ indeterminado o infinito, entonces ty = i

Fin

Grafica los resultados (X_{tx}, Y_{ty}) (Curva de equilibrio)

Fin

Script del algoritmo (APÉNDICE IVA)

3.2.1.5. Algoritmo – IA para curva de equilibrio, tendencia y ecuación de curva de tendencia. (Datos experimentales para Absorción y Desorción).

Tabla 13. Declaración de variables.

Variable	Descripción
X _i	(i) Datos del eje X de la curva de equilibrio
Y _i	(i) Datos del eje y de la curva de equilibrio

i	Número de datos experimentales disponibles.
%S	Límite para gráfico. (%sto.) (Gas rico para absorción, Líquido rico para desorción)
p	Tipo de distancia

Inicio

Leer datos X & Y de la curva de equilibrio ($X_1, X_2, X_3, \dots, X_i, Y_1, Y_2, Y_3, \dots, Y_i$).

Declaración de datos de proceso ($p_1, p_2, p_3, V, \text{contador, tope, amp, lim, A, B, C, D, E, F, G, K}_j, X_t, Y_t, z, k$)

//Método de IA - KNN (K Nearest Neighbor)

INICIO DE CONDICIONAL Si $i \geq 4$ entonces:

Comprobación de posición de datos.

Inicio de bucle “para” hasta tope = i

Contador = 4, hasta Contador = i

Primera comprobación (***comprobación de datos vecinos y tendencia por diferencia de pendientes***)

(Pendiente 1), $p_1 = (Y_2 - Y_1) / (X_2 - X_1)$

(Pendiente 2), $p_2 = (Y_3 - Y_2) / (X_3 - X_2)$

(Pendiente 3), $p_3 = (Y_4 - Y_3) / (X_4 - X_3)$

Si $p_1 \& p_3 > 0$, entonces comprobar:

Si $p_2 > 0$, ($V = \text{Contador}-1$),

caso contrario, (***Detecta error en datos experimentales***)

$K_j = \text{Contador} - 2$

Inicia Interpolación Lagrange (**2.2.7.1**).

Productivo con los puntos (X_1, Y_1), (X_3, Y_3), (X_4, Y_4) (**Ec. 42**)

Determinación de valores A, B & C.

Escribe: $Y = AX^2 + BX + C$ //Ecuación de tendencia de curva

Escribe nuevo punto $(X(Kj), Y(Kj))$

$V = \text{Contador}-1$

Caso contrario

Si $p_2 < 0$

//Aplicación de algoritmo de k-NN, utilizando la curva tendencia. **Script del algoritmo (APÉNDICE IXA)**

Inicia bucle repetir: desde $i=1$ hasta $i=n$

Comprobación **Minkowski** (Ec. 48)

Para $P=1$ Si (X_i) , entonces: $Y_{eu} = AX_i^2 + BX_i + C$; Dato 1 (X_i, Y_i) .

Para $P=2$ Si (X_i) , entonces: $Y_{ma} = AX_i^2 + BX_i + C$; Dato 1 (X_i, Y_i) .

Calculo promedio del mayor valor = z

(Pendiente 1), $p_1 = (Y_z - Y_{z-2}) / (X_z - X_{z-2})$

(Pendiente 2), $p_2 = (Y_{z+2} - Y_z) / (X_{z+2} - X_z)$

Si $p_1 > 0$ & $p_2 > 0$ ó $p_1 < 0$ & $p_2 < 0$, entonces "sin exclusión de (X_z, Y_z) caso contrario se excluye de (X_z, Y_z) .

Fin del bucle repetir.

//Aplicación de algoritmo de k-means **Script del algoritmo (APÉNDICE XA)**

Declaramos variables numéricas (k, i, d, menor1, menor2).

Se lee datos $(X_1, X_2, X_3, \dots, X_i, Y_1, Y_2, Y_3, \dots, Y_i)$.

Si $n = \text{nro. de datos}$ // sin datos observados.

Para $d = 1$, hasta $d = n$, hacer:

Para k-means; $k_d = \text{clusters}$

Para k-means; i_d = inercia.

//Calculo de distancia de origen a punto de clusters (k_d, i_d)

menor1 = Ec.Euclidiana ((0;0),($k_d;i_d*10$)) //(Ec.46)

//Comprobación de la relación menor: Método del codo.

Si $d=1$, entonces; menor2 = menor1; $k=d$, caso contrario

Si menor1 < menor2, entonces; menor2 = menor1; $k=d$.

Inicia Interpolación Newton.

Si $k>6$, entonces $k= 6$.

Con los puntos (X_1,Y_1), (X_2,Y_2), .. , (X_{k-1},Y_{k-1}), (X_k,Y_k) (**Ec. 45**)

Determinación de valores A, B, C, D, E, F, G.

Escribe: $Y = AX^5 + BX^4 + CX^3 + DX^2 + EX + F$ //Ecuación de tendencia de curva

Escribe nuevo punto ($X(K_j), Y(K_j)$)

V = Contador-1

Fin de bucle.

FIN DE CONDICIONAL

//Determinación y gráfica de curva de tendencia

amp = $(X_1-X_2) / 10$ //Amplitud para grafica.

lim = $(\%S/100) / (1-(\%S/100))$

Contador = 0, t = 1

INICIO DE CONDICIONAL Si i = 3, entonces,

Inicia Interpolación Lagrange (**2.2.7.1**).

Productivo con los puntos (X_1,Y_1), (X_2,Y_2), (X_3,Y_3) (**Ec. 42**)

Determinación de valores A, B & C.

Escribe: $Y = AX^2 + BX + C$ //Ecuación de tendencia de curva

Fin de interpolación Lagrange

//Gráfica

Inicio de bucle para la gráfica de la curva de tendencia. (Hasta $X_t \geq \text{lim} * 1.2$)

$X_t = 0$

$Y_t = AX_t^2 + BX_t + C$

Contador = Contador + amp

Fin de bucle.

Grafica de valores X_t , Y_t

FIN DE CONDICIONAL

INICIO DE CONDICIONAL Si $i > 3$, entonces,

//Aplicación de algoritmo de k-NN, utilizando la curva tendencia.

//Aplicación de algoritmo de k-means

Bucle PARA:

Para $i = 4$, hacer

Inicia Interpolación Newton (**2.2.7.2**)

Productivo con los puntos (X_1, Y_1) , (X_2, Y_2) , (X_3, Y_3) , (X_4, Y_4) (**Ec. 45**)

Determinación de valores A, B, C & D.

Escribe: $Y = AX^3 + BX^2 + CX + D$ //Ecuación de tendencia de curva.

Fin de interpolación Lagrange

//Gráfica

Inicio de bucle para la gráfica de la curva de tendencia. (Hasta $X_t \geq \text{lim} * 1.2$)

$X_t = 0$

$$Y_t = AX_t^3 + BX_t^2 + CX_t + D$$

$$\text{Contador} = \text{Contador} + \text{amp}$$

Fin de bucle.

Grafica de valores X_t , Y_t

Para $i = 5$, hacer

Inicia Interpolación Newton **(2.2.7.2)**

Productivo con los puntos (X_1, Y_1) , (X_2, Y_2) , (X_3, Y_3) , (X_4, Y_4) , (X_5, Y_5)
(Ec. 45)

Determinación de valores A, B, C, D & E.

Escribe: $Y = AX^4 + BX^3 + CX^2 + DX + E$ //Ec. de tendencia de curva.

Fin de interpolación Lagrange

//Gráfica

Inicio de bucle para la gráfica de la curva de tendencia. (Hasta $X_t \geq \text{lim} * 1.2$)

$$X_t = 0$$

$$Y_t = AX_t^4 + BX_t^3 + CX_t^2 + DX_t + E$$

$$\text{Contador} = \text{Contador} + \text{amp}$$

Fin de bucle.

Grafica de valores X_t , Y_t

Para $i > 6$, saltar los valores para hallar con las iteraciones de Newton.

Fin de bucle PARA

FIN DE CONDICIONAL

**Script del algoritmo para absorción con datos experimentales acortado
(APÉNDICE VA)**

3.2.1.6. Algoritmo – IA para gráfico y determinación de valores mínimos – Random Forest. (Para Absorción y Desorción).

Tabla 14. Declaración de variables.

Variable	Descripción
T	Temperatura
P	Presión
%S	Porcentaje del soluto en el gas rico (Absorción) o líquido rico (Desorción) dependiendo del proceso.
%AD	Porcentaje del soluto en el líquido absorbente (Absorción) o gas desorbente (Desorción) dependiendo del proceso.
Xi	(i) Datos del eje X de la curva de equilibrio
Yi	(i) Datos del eje y de la curva de equilibrio
i	Número de datos experimentales disponibles.
%R	Porcentaje de concentración conocida o recuperada.

Inicio

Leer datos de curva de tendencia por el método de IA //Metodo de IA - KNN (K Nearest Neighbor)

$$Y_t = AX_t^4 + BX_t^3 + CX_t^2 + DX_t + E$$

Leer datos %S, %AD, i, %R, dat, error y Xi, Yi de la curva de equilibrio (X₁, X₂, X₃, ..., Xi, Y₁, Y₂, Y₃, ..., Yi).

Declaración de datos de proceso (cx₁, cx₂, cy₁, cy₂, sum, pen, cX₁, cX₂, cY₁, cY₂)

//Recupera los datos.

Para absorción cx₂ = %S, cx₁ = %AD, cy₁ = %R; cy₂ = 0

Para desorción cx₂ = %S, cy₂ = %AD, cy₁ = %R; cx₁ = 0

$$cX_1 = cx_1 / (1 - cx_1)$$

$$cX_2 = cx_2 / (1 - cx_2)$$

$$cY_1 = cy_1 / (1 - cy_1)$$

$$cY_2 = cy_2 / (1 - cy_2)$$

//Determinación del dato desconocido (cy₂ para absorción y cx₂ para desorción)

//Metodo de IA – Random Forest

INICIO DE CONDICIONAL Si error <= 0.01

Para (Interpolación de Newton)

Para Y → $Y_t = AX_t^4 + BX_t^3 + CX_t^2 + DX_t + E$

$cY_2 = Y_t$

$dat = A cX_2^4 + B cX_2^3 + C cX_2^2 + D cX_2 + E$

$error = |dat - cy_2|$

Para (Interpolación de Lagrange)

Para X →

$part1 = (-A * C) + (A * cY_2) + (0.25 * B * B)$

$part2 = (-B) / (2 * A)$

$part3 = A * A$

$part4 = \text{Math.sqrt}(part1 / part3)$

$part5a = part2 - part4$

$part5b = part2 + part4$

Si part5a existe

entonces $part5a = cX_2$

caso contrario $part5b = cX_2$

$$dat = \sqrt{\frac{-A * C + A * cY_2 + 0.25 * B^2}{A^2}} \pm \frac{-B}{2A}$$

$error = |dat - cX_2|$

// Calculo de pendiente → $pen = (cY_2 - cY_1) / (cX_2 - cX_1)$

Para absorción $pen = (Ls/Gs)_{\min}$

Para desorción $pen = (Ls/Gs)_{\max}$

FIN DE CONDICIONAL

Fin de bucle.

Escribe resultados para línea de operación con valores mínimos.

Script del algoritmo para absorción con datos experimentales acortado (APÉNDICE VIA)

3.2.1.7. Algoritmo – IA para determinación de número de etapas. (Absorción y Desorción).

Tabla 15. Declaración de variables.

Variable	Descripción
cX1, cY1, mX1, mY1, mX2, mY2.	Línea de operación
m	Pendiente
ib	Intersección en el eje.
a,b,c,d,e,f,g	Datos para ecuación.
NEtap	Numero de etapas

Inicio

Leer datos de la línea de operación.

Leer cX1, cY1, mX1, mY1, mX2, mY2.

//Calculo de pendiente e intersección con eje.

$$m = (mY2 - mY1) / (mX2 - mX1);$$

$$ib = mY1 - m * mX1;$$

//Verifica para **Método de IA** el límite de grafica de etapas & Calcula las etapas

etapas = 0, x = 0, y = 0, ic = 0.

Si ($mX1 \geq cX1$)

Para **reajuste de etapas** seleccionado, hacer:

$$etx1 = mX2; ety1 = mY2; etx2 = etx1;$$

$$ety2 = a*etx2*etx2+b*etx2+c; ety3 = ety2;$$

$$etx3 = (ety3-ib)/m;$$

$$x = etx3; y = ety3;$$

para $i = 1; x \geq mX1$; mientras sube de 1 en 1

Si (i dividido entre 2 es 0)

$$etapas = (i+2)/2; x = (y-ib)/m; ic=i;$$

Caso contrario:

$$etapas = (i+3)/2; y = a*x*x+b*x+c; ic=i;$$

Para **reajuste de etapas** no seleccionado, hacer:

$$etx1 = mX1; ety1 = mY1; ety2 = ety1;$$

$$etx2 = \sqrt{\frac{-A*C + A*cY_2 + 0.25*B^2}{A^2}} + \frac{-B}{2A}$$

$$etx3 = etx2; ety3 = etx3*m+ib; x = etx3; y = ety3;$$

$$prueba = ((-a*c)+(a*y)+(0.25*b^2));$$

Si (prueba ≥ 0)

Para $i = 1; y \leq mY2$; de 1 en 1

Si (i dividido entre 2 es 0)

$$etapas = (i+2)/2; y = m*x+ib; ic=i;$$

Caso contrario:

$$\text{etapas} = (i+3)/2;$$

$$x = -\sqrt{\frac{-A * C + A * cY_2 + 0.25 * B^2}{A^2}} + \frac{-B}{2A}; \text{ic}=i;$$

Caso contrario:

$$\text{etx1} = mX1; \text{ety1} = mY1; \text{ety2} = \text{ety1};$$

$$\text{etx2} = -\sqrt{\frac{-A * C + A * cY_2 + 0.25 * B^2}{A^2}} + \frac{-B}{2A};$$

$$\text{etx3} = \text{etx2}; \text{ety3} = \text{etx3} * m + ib; x = \text{etx3}; y = \text{ety3};$$

para: $i = 1$; $y \leq mY2$; de 1 en 1

Si (i dividido entre 2 es 0)

$$\text{etapas} = (i+2)/2; y = m * x + ib; \text{ic}=i;$$

Caso contrario:

$$\text{etapas} = (i+3)/2;$$

$$x = -\sqrt{\frac{-A * C + A * cY_2 + 0.25 * B^2}{A^2}} + \frac{-B}{2A}; \text{ic}=i;$$

Caso contrario:

$$\text{ety1} = cY1; \text{etx1} = (\text{ety1} - ib) / m; \text{ety2} = \text{ety1};$$

$$\text{etx2} = \sqrt{\frac{-A * C + A * cY_2 + 0.25 * B^2}{A^2}} + \frac{-B}{2A}$$

$$\text{etx3} = \text{etx2}; \text{ety3} = \text{etx3} * m + ib; x = \text{etx3}; y = \text{ety3};$$

para $i = 1$; $y \leq mY2$; de 1 en 1

Si (i dividido entre 2 es 0)

$$\text{etapas} = (i+2)/2;$$

$$y = m * x + ib;$$

Caso contrario

etapas = (i+3)/2;

$$x = -\sqrt{\frac{-A * C + A * cY_2 + 0.25 * B^2}{A^2}} + \frac{-B}{2A}$$

FIN DE CONDICIONAL

Fin de bucle.

Escribe resultados para número de etapas.

Script del algoritmo para absorción con datos experimentales acortado (APÉNDICE VIIA)

3.2.1.8. Algoritmo – Para el dimensionamiento del equipo (Absorción y Desorción).

Tabla 16. Declaración de variables.

Variable	Descripción
L	Flujo liquido
V	Flujo gas o vapor
porSto	Porcentaje del soluto contenido en el flujo de donde recuperar
PMsto	Masa molar del soluto
PMPor	Masa molar del portador
dl	Densidad del liquido
t	Unidad de tiempo del flujo (segundos, minutos u horas)
P	Presión del sistema
T	Temperatura del sistema
et	Numero de etapas
Ml	Masa molar del absorbente (de ser el caso)
E	Espaciado entre bodejas
FF	Factor de formación de espuma
f	Fracción de inundación
g	Tensión superficial
d	Diámetro de perforación de bandeja

p	Distancia entre centros
e	Espesor de la bandeja

Inicio

Recupera los datos (L, V, porSto, PMsto, PMPor, dl, t, P, T, et, MI, E, FF, f, g).

Valida la existencia de los valores de d, p, e.

Si (d, p, e = 0)

Tomar valores estándar: d = (0.5); p = (1.5); e = (0.3)

Caso contrario; Leer d, p, e.

Declaración de variables de proceso (s, m, h, t)

s = 3.6; m = 0.06; h = 0.001;

Si (t = segundos); L = L*s; V = V*s;

Si (t = minutos); L = L*m; V = V*m;

Si (t = horas); L = L*h; V = V*h;

R = 0.082; convertir P en mmHg; convertir T a °K.

Declaración de variables de proceso (Mv, dv, flv)

Mv = PMsto*porSto+PMPor*(1-porSto);

dv = (P*Mv)/(R*(T));

flv = (float) (((L*MI)/(V*Mv))*(dv/dl)^0.5);

Declaración de variables de proceso (Cf, Fst, AdA, AhAa, FHA, C, uf, dt)

Si (E = 36) Si (flv < 1) {Cf = -0.3699*(flv)³ + 0.9614*(flv)² - 0.9584*flv + 0.5168;}

Caso contrario {Cf = -0.113*ln(flv) + 0.1513;}

Si (E = 24) Si (flv < 1) {Cf = (0.2071*(flv)⁴ - 0.843*(flv)³ + 1.1836*(flv)² - 0.8174*flv + 0.3947;}

Caso contrario {Cf = -0.091 * ln(flv) + 0.1263;}

Si (E = 18) Si (flv < 1) {Cf = -0.0665*(flv)³ + 0.2732*(flv)² - 0.3985*flv + 0.2909;}

Caso contrario {Cf = -0.066 * ln(flv) + 0.0997;}

Si (E = 12) Si (flv < 1) {Cf = -0.0594*(flv)³ + 0.2354*(flv)² - 0.3248*flv + 0.2278;}

Caso contrario {Cf = -0.054 * ln(flv) + 0.081;}

Si (E = 9) Si (flv < 1) {Cf = -0.0184*(flv)³ + 0.0955*(flv)² - 0.187*flv + 0.1804;}

Si (E = 6) Si (flv < 1) {Cf = -0.0216*(flv)³ + 0.0978*(flv)² - 0.1685*flv + 0.1563;}

Fst = (g/20)^{0.2};

Si (flv <= 0.1) {AdA = 0.1}

Caso contrario

Si (flv <= 1) {AdA = 0.1 + ((flv - 1) / 9);} Caso contrario {AdA = 0.2;}

AhAa = 0.907 * (d/p)²;

Si (AhAa <= 0.1) {FHA = 5 * AhAa + 0.5;} Caso contrario {FHA = 1}

C = Fst * FF * FHA * Cf;

uf = C * ((dl - dv) / dv)^{0.5};

dt = (4 * (V / 3600) * Mv) / (f * (uf / 3.28) * 3.1416 * (1 - AdA) * dv);

Declara variables para respuesta al problema (DT, A)

DT = (dt)^{0.5};

Espaciado en centímetros (E = E * 2.54)

A = et * e + et * E + 14 * 30.48;

Escribir DT (diámetro de torre) y A (Altura de torre). // Escribe respuestas en metros

Fin.

Script del algoritmo para dimensionamiento acertado (APÉNDICE VIII A).

CAPITULO IV

4. RESULTADOS:

Como resultado final; se hace una comparación de los métodos bibliográficos (Manuales) con el nuevo método esquematizado mediante la aplicación desarrollada, que tiene integrada en ella algoritmos en base a las técnicas de inteligencia artificial (IA) que son K Nearest Neighbor Y Random Forest.

4.1. Cálculo de dimensionamiento de una columna de absorción mediante una relación.

PROBLEMA

Un gas de alumbrado se va a liberar del aceite ligero lavándolo con un aceite de lavado como absorbente; Las circunstancias son:

Absorbedor. Gas entrante, $0.250 \text{ m}^3/\text{s}$ ($31800 \text{ ft}^3/\text{h}$) a $T = 26^\circ\text{C}$; $P_t = 1,07 \cdot 10^5 \text{ N/m}^2$

($803 \text{ mmHg} = 1.05658 \text{ atm}$), contendrá 2.0 % en volumen de vapores de aceite ligero en otros gases ($M_{\text{otros}} = 46 \text{ uma}$). Se va a suponer que todo el aceite ligero es benceno

y que se requiere un 96 % de eliminación. El aceite de lavado va a entrar a 26°C , contendrá 0.005 fracción mol de benceno y tendrá un peso molecular promedio de 260 uma ; y una densidad de 886 kg/m^3 . Se va a utilizar un flujo de circulación del aceite

de 1.5 veces la mínima. Las soluciones de aceite de lavado-benceno son ideales. La temperatura va a ser constante e igual a 26°C . Calcular el número de platos teóricos que se requieren para el absorbedor;

Correlación de Fair, para estimar el diámetro de la columna de absorción. Suponga un espacio entre bandejas de 24 in (pulgadas), un factor de formación de espuma de 0,9 y una fracción de inundación de 0,8. La tensión superficial es de 70 dinas/cm .

Datos técnicos de las bandejas perforadas; Diámetro de perforación de bandeja 0.5 cm , distancia entre centros perforados 1.5 cm , espesor de la bandeja 0.3 cm .

(Fuente del ejercicio: Robert E. Treybal.: "MASS-TRANSFER OPERATIONS" 3th. Ed. Mc.Graw Hill Chemical Engineering Series – Book Company:(1981), pp. 292-293).

Fuente propia de interpretación.

4.1.1. Cálculo bibliográfico manual.

Solución:

Se define como base de cálculo 1 segundo; por tanto, se trabaja con la masa. (Trabajado en función al gráfico del equipo de absorción (Figura 5) mostrado en este documento); Se calculará L, L_s, G, G_s en términos de $\frac{kmol}{s}$.

Cálculo de G : (La alimentación a la torre es G_2)

$$\text{Conversión de m}^3 \text{ a Kmol} \rightarrow G_2 = 0.250 \frac{273}{273+26} \frac{1.07 \times 10^5}{1.0133 \times 10^5} \frac{1}{22.4} = 0.01075 \frac{kmol}{s}$$

También se puede determinar con la ecuación de estado

$$PV = nRT \quad (3,1)$$

Cálculo de G_s ; Se sabe $y_2 = 0.02$; se utiliza la ecuación (Ec. 16)

$$Y_2 = \frac{y_2}{1-y_2} = \frac{0.02}{1-0.02} = 0.0204 \frac{kmol_{Benceno}}{kmol_{Gas\ Seco}}$$

Reemplaza en la ecuación (Ec. 13)

$$G_s = G_2(1-y_2) = 0.01075(1-0.02) = 0.01051 \frac{kmol_{Gas\ Seco}}{s}$$

Para el 96% de recuperación se tiene:

$$Y_1 = 0.05(Y_2) = 0.04(0.0204) = 0.000816 \frac{kmol_{Benceno}}{kmol_{Gas\ Seco}}$$

Se sabe $x_1 = 0.005$; se utiliza la ecuación (Ec. 21)

$$X_1 = \frac{x_1}{1-x_1} = \frac{0.005}{1-0.005} = 0.005025 \frac{kmol_{Benceno}}{kmol_{Aceite}}$$

Halla la presión de saturación del benceno mediante la ecuación de Antoine (Ec. 7): si la temperatura es de 26 °C

$$\ln p' = A - B / (T + C); \quad \text{despeja P}; \quad p_{Benceno}^s = e^{A - \frac{B}{T+C}}$$

Si se sabe que la temperatura es $T = 273.15 + 26 = 299.15$; Las constantes A, B y C del

benceno para la ecuación de Antoine son:

$$A = 15.9008 \quad B = 2788.51 \quad C = -52.36$$

Fuentes de los datos: H. M. Spencer, *Ind. Eng. Chem.*, vol. 40, pp. 2152-2154, 1948; K. K. Kelley, *U.S. Bur. Mines Bull*, 584, 1960; L. B. Pankratz, *U.S. Bur. Mines Bull*, 672, (1982)

Reemplazando en la ecuación de Antoine se tiene:

$$p_{\text{Benceno}}^S = e^{A - \frac{B}{T+C}} = e^{15.9008 - \frac{2788.51}{299.15 + (-52.36)}} = 99.65 \text{ mmHg}$$

Según la ley de Raoult para sistemas ideales reemplaza en la ecuación (Ec. 5)

$$y_A = x_A \left(\frac{p_A^S}{P} \right) = x_A \left(\frac{100}{803} \right) \rightarrow y_A = 0.125x_A$$

Tabulando se tiene (Tabla 18):

Tabla 18. Tabulación de datos utilizando la constante empírica.

x_A	0	0.02	0.04	0.06	0.08	0.1	0.12	0.14	0.16	0.18	0.2
y_A	0	0.0025	0.005	0.0075	0.01	0.0125	0.015	0.0175	0.02	0.0225	0.025

Dibuja la curva de equilibrio con los datos según las ecuaciones (Ec. 16) y (Ec. 21).

Tabla 19. Cálculo de relaciones de la fracción molar en fase líquida (X_A) y relaciones de la fracción en la fase gaseosa (Y_A).

x_A	y_A	$X_A = \frac{x_A}{1-x_A}$	$Y_A = \frac{y_A}{1-y_A}$
0	0	0	0
0.02	0.0025	0.02040816	0.00250627
0.04	0.005	0.04166667	0.00502513
0.06	0.0075	0.06382979	0.00755668
0.08	0.01	0.08695652	0.01010101
0.10	0.0125	0.11111111	0.01265823
0.12	0.015	0.13636364	0.01522843
0.14	0.0175	0.1627907	0.0178117
0.16	0.02	0.19047619	0.02040816
0.18	0.0225	0.2195122	0.0230179
0.20	0.025	0.25	0.02564103

Se grafica la curva de equilibrio y posteriormente se debe empezar a dibujar líneas de operación hasta encontrar la intersección o el cruce con la curva de equilibrio (Figura 20) (Como límite para este punto de cruce (Y_1)).

Figura 20. Búsqueda de punto de intersección para determinar valores mínimos.

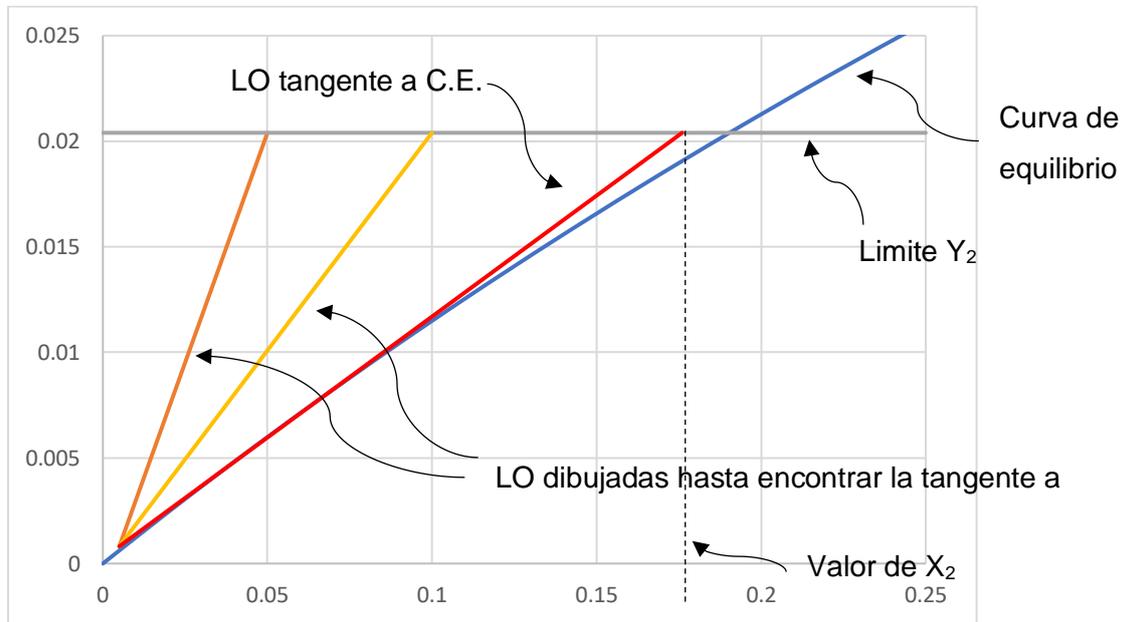


Tabla 20. Datos recogidos de la figura 20.

		Limite	0.000	0.020400
			0.250	0.020400
LO1	X1Y1	0.005	0.000816	
	X2Y2	0.050	0.020400	
LO2	X1Y1	0.005	0.000816	
	X2Y2	0.100	0.020400	
LO3	X1Y1	0.005	0.000816	
	X2Y2	0.176	0.020400	

$$\left(\frac{Ls}{Gs} \right)_{min}$$

Como se puede ver en el gráfico (Figura 20); es necesario tener que ir dibujando manualmente la curva de equilibrio y posteriormente líneas de operación que parten en X_1, Y_1 ; teniendo como límite, la ordenada Y_2 ; es así que dibujando y tanteando el gráfico, se puede encontrar la línea de operación para el valor mínimo "LO3" con el valor de $X_2 = 0.176$; donde esta línea de operación corta en un punto tangencial a la curva de equilibrio.

Pendiente de "LO3" es $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min}$

A partir de aquí se puede hacer los cálculos matemáticos para hallar las masas, relaciones molares y flujos de la columna de absorción.

De la ecuación (Ec. 31)

$$(Y_2 - Y_1) = \frac{Ls}{Gs}(X_2 - X_1) \text{ se tiene: } (Y_2 - Y_1) = \left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min} (X_2 - X_1)$$

Despejando:

$$\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min} = \frac{Gs(Y_2 - Y_1)}{(X_2 - X_1)} = \frac{0.01051(0.0204 - 0.000816)}{(0.176 - 0.005025)} = 1.204 \cdot 10^{-3} \frac{kmol_{Aceite}}{s}$$

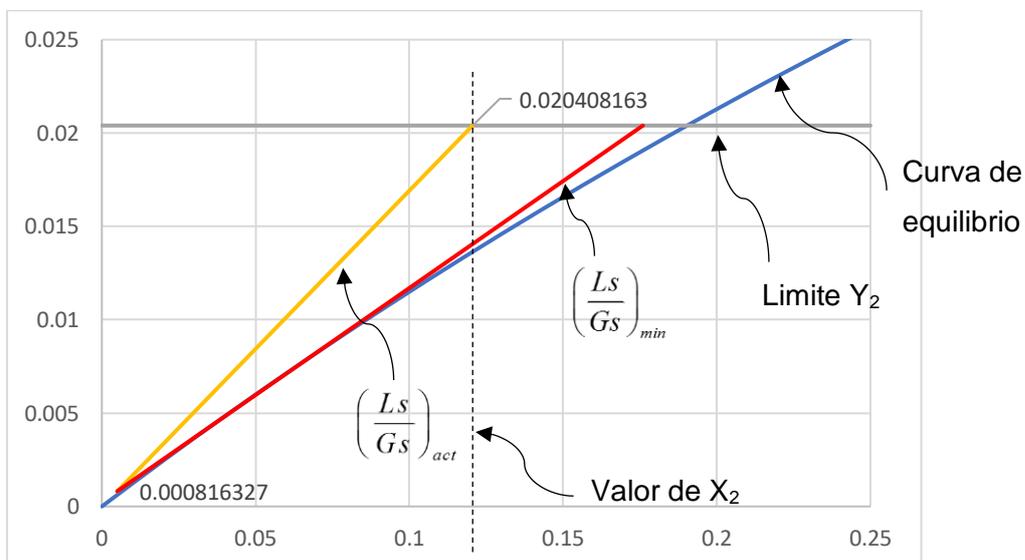
El problema nos indica que el valor del flujo será 1,5 veces el mínimo; por consiguiente:

$$\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{act} = 1.5 \left(\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min}\right) = 1.5 \left(1.204 \cdot 10^{-3} \frac{kmol_{Aceite}}{s}\right) = 1.806 \cdot 10^{-3} \frac{kmol_{Aceite}}{s}$$

Despejando X_2 de la ecuación (Ec. 31).

$$X_2 = \frac{Gs(Y_2 - Y_1)}{Ls} + X_1 = \frac{0.01051(0.0204 - 0.000816)}{1.806 \cdot 10^{-3}} + 0.00503 = 0.118747 \frac{kmol_{Benceno}}{kmol_{Aceite}}$$

Figura 21.



Se graficaron los datos (Figura 21) según los hallado para la tabla 21.

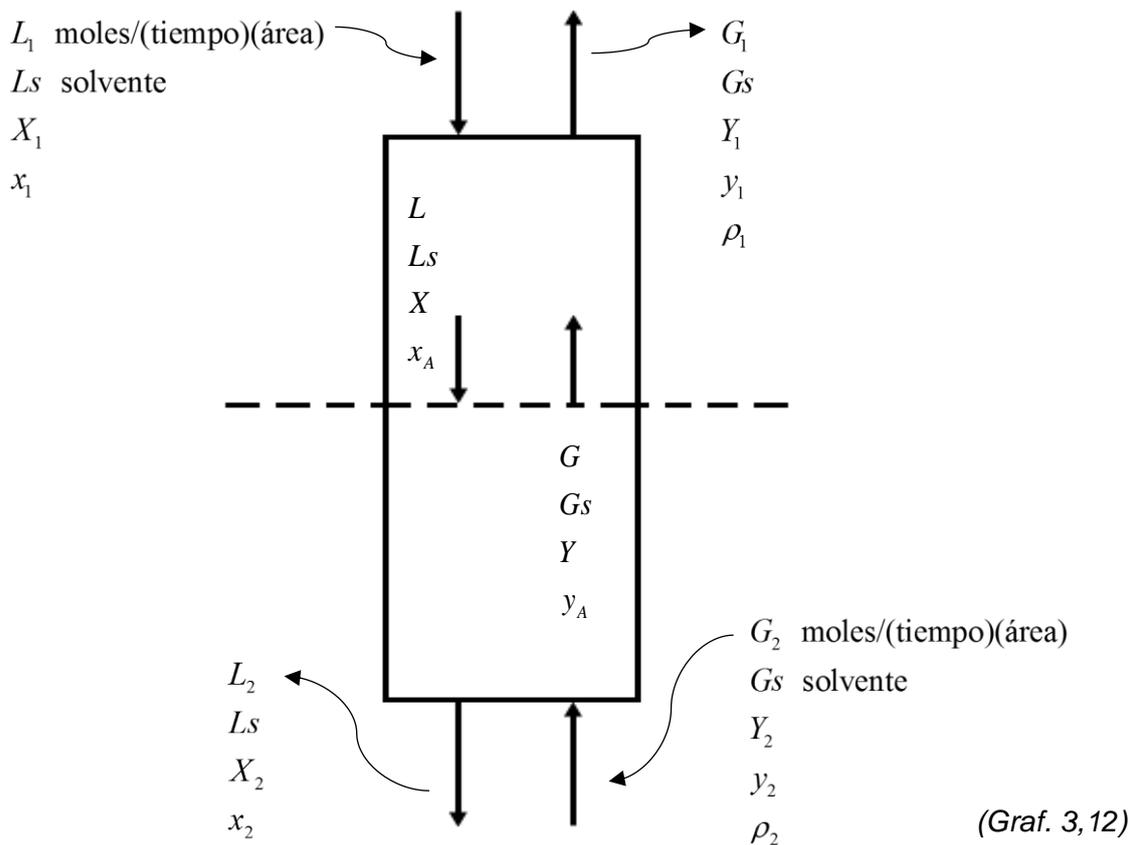
Tabla 21. Datos recogidos de la línea de operación mínima y activa.

	Limite	0	0.0204	
		0.25	0.0204	
LO3	X1Y1	0.005	0.000816	$\left(\frac{L_s}{G_s}\right)_{min}$
	X2Y2	0.176	0.0204	
LO4	X1Y1	0.005	0.000816	$\left(\frac{L_s}{G_s}\right)_{act}$
	X2Y2	0.118747	0.0204	

Puesto que la torre será un arreglo de platos, se van a hacer los siguientes cambios en la notación:

Figura 22.

Cantidades de flujo para un Absorbedor.



Nota. El diagrama muestra los datos necesarios de los flujos de entrada y salida de una columna de absorción. Tomado de: Robert E. Treybal.: "MASS-TRANSFER OPERATIONS" 3th. Ed. Mc.Graw Hill Chemical Engineering Series – Book Company:(1981), pp. 283.

Donde: (ρ_1, ρ_2) = presión parcial de los flujos de gas.

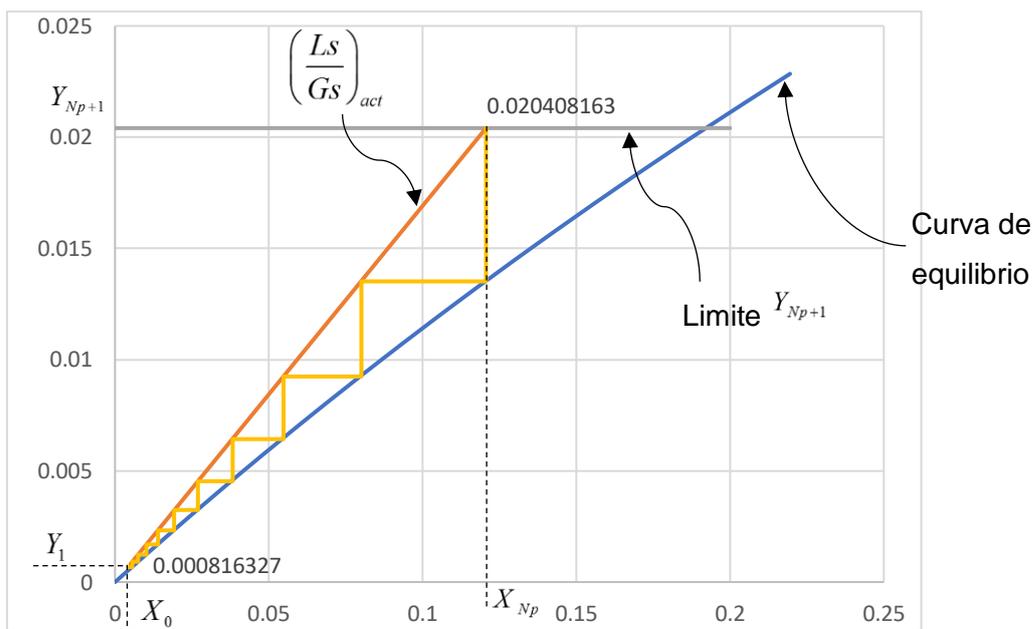
Tabla 22. Cambio de notación a los flujos para columnas de absorción de etapas.

L_2 es cambiado a L_{Np}	G_2 es cambiado a G_{Np+1}	x_2 es cambiado a x_{Np}
L_1 es cambiado a L_0	G_1 es cambiado a G_1	x_1 es cambiado a x_0
X_2 es cambiado a X_{Np}	Y_2 es cambiado a Y_{Np+1}	y_2 es cambiado a y_{Np+1}
X_1 es cambiado a X_0	Y_1 es cambiado a Y_1	y_1 es cambiado a y_1

Determinación grafica de número de etapas.

El diagrama de operación se establece en la figura (Figura 21) y se vuelve a graficar en (Figura 23) utilizando el modelo de la figura (Figura 9), en donde se adelantan los platos teóricos.

Figura 23. Determinación grafica de etapas con perpendiculares y paralelas a la abscisa, con origen en la línea de operación y limite en la curva de equilibrio



Se requieren entre 9 y 10 (aproximadamente 10) platos teóricos.

Determinación analítica de número de etapas.

Alternativamente, el número de platos teóricos se puede calcular analíticamente.

Según lo hallado; el problema nos indica que el valor del flujo será 1,5 veces el mínimo; y se obtuvo los siguientes datos:

$$(Ls)_{act} = 1.806 \cdot 10^{-3} \frac{kmol_{Aceite}}{s} \rightarrow Ls \quad \& \quad Gs = 0.01051 \frac{kmol_{Gas\ Seco}}{s} \rightarrow Gs$$

La alimentación a la torre es $G_2 = 0.01075 \frac{\text{kmol}}{\text{s}} \rightarrow G_{Np+1}$

$$X_2 = 0.118747 \frac{\text{kmol}_{\text{Benceno}}}{\text{kmol}_{\text{Aceite}}} \rightarrow X_{Np}$$

$$Y_2 = 0.0204 \frac{\text{kmol}_{\text{Benceno}}}{\text{kmol}_{\text{Gas Seco}}} \rightarrow Y_{Np+1}$$

$$Y_1 = 0.000816 \frac{\text{kmol}_{\text{Benceno}}}{\text{kmol}_{\text{Gas Seco}}} \rightarrow Y_1$$

$$X_1 = 0.005025 \frac{\text{kmol}_{\text{Benceno}}}{\text{kmol}_{\text{Aceite}}} \rightarrow X_0$$

Según la ley de Raoult (Ec. 5) $y_A = x_A \left(\frac{P_A^s}{P} \right) \rightarrow y_A = 0.124 x_A$

Estos datos serán necesarios para determinar analíticamente el número de etapas.

Despeja de la ecuación (Ec. 21) para hallar y_{Np+1} y y_1 .

$$y_{Np+1} = \frac{Y_{Np+1}}{1 + Y_{Np+1}} = \frac{0.0204}{1 + 0.0204} = 0.01999 \cong 0.02$$

$$y_1 = \frac{Y_1}{1 + Y_1} = \frac{0.000816}{1 + 0.000816} = 0.0008153$$

Despeja de la ecuación (Ec. 16) para hallar x_{Np} y x_0 .

$$x_{Np} = \frac{X_{Np}}{1 + X_{Np}} = \frac{0.118747}{1 + 0.118747} = 0.106142$$

$$x_0 = \frac{X_0}{1 + X_0} = \frac{0.005025}{1 + 0.005025} = 0.004999 \cong 0.005$$

Considerando las ecuaciones $(y_A = x_A \left(\frac{P_A^s}{P} \right))$ (Ec. 5) & $y_A = m_A x_A$ (Ec. 9))

$$y_A = \left(\frac{p_A^s}{P} \right) x_A = m_A x_A \rightarrow y_A = 0.124 x_A ; \text{ de donde se obtiene el valor: } m_A = 0.124$$

De las ecuaciones ($Ls = L(1-x)$ (Ec. 18) & $x = \frac{X}{1+X}$ (Ec. 21)), se tiene:

$$L = Ls(1+X) \quad (50)$$

entonces para el problema, de la ecuación (Ec. 50):

$$L_{Np} = Ls(1+X_{Np}) = 1.806 \cdot 10^{-3} (1+0.118747) = 2.02 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kmol}}{\text{s}}$$

Para aquellos casos en que tanto la línea de operación como la curva en el equilibrio pueden considerarse rectas, son válidas las ecuaciones de Kremser, cuando se tienen mezclas relativamente diluidas de gases y líquidos.

Para el cálculo de los platos según el diagrama del número de etapas teóricas para cascadas a contracorriente, con el equilibrio de la Ley de Henry y factores de absorción o desorción constantes (ANEXO I); Es necesario el cálculo del factor de absorción A , que es el cociente entre la pendiente de la línea de operación y la pendiente de la línea de equilibrio; Donde:

$$A = \frac{L}{mG} \quad (51)$$

(Fuente: Robert E. Treybal.: "MASS-TRANSFER OPERATIONS" 3th. Ed. Mc.Graw Hill Chemical Engineering Series – Book Company:(1981), pp. 291-292).

De la ecuación (Ec. 55):

$$A_{Np} = \frac{L_{Np}}{m_A G_{Np}} \approx \frac{L_{Np}}{m_A G_{Np+1}} = \frac{2.02 \cdot 10^{-3}}{0.124(0.01075)} = 1.5154$$

De la ecuación (Ec. 50) se determina L_0 :

$$L_0 = Ls(1+X_0) = 1.806 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kmol}}{\text{s}} (1+0.005025) = 1.815 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kmol}}{\text{s}}$$

De las ecuaciones ($Gs = G(1-y)$ (Ec. 13) & $y = \frac{Y}{1+Y}$ (Ec. 16)), se tiene:

$$G = G_s(1+Y) \quad (52)$$

para el problema con la ecuación (Ec. 56).

$$G_1 = G_s(1+Y_1) = 0.01051 \frac{\text{kmol}}{\text{s}} (1+0.000816) = 0.01052 \frac{\text{kmol}}{\text{s}}$$

De la ecuación (Ec. 55):

$$A_1 = \frac{L_1}{m_A G_1} \approx \frac{L_0}{m_A G_1} = \frac{1.815 \cdot 10^{-3}}{0.124(0.01052)} = 1.39136$$

Se determina el valor de A , de la relación de A_{Np} y A_0 :

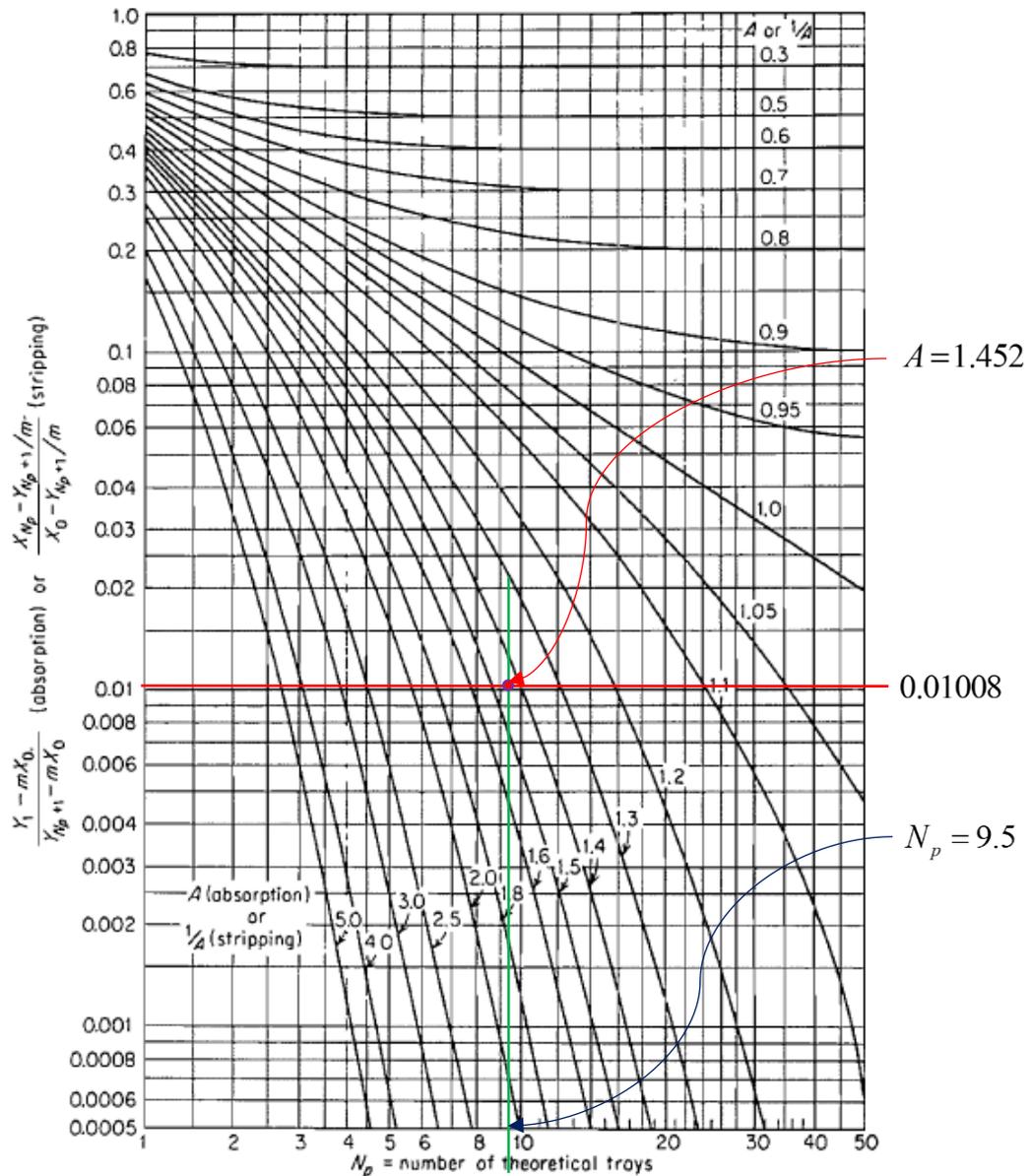
$$A = [1.5154(1.39136)]^{0.5} = 1.452$$

Calcula los datos necesarios para lectura en el anexo (ANEXO I) [Por Hachmuth y Vance, chem. Eng. Progr.,48, 523, 570, 617 (1952)].

$$\frac{y_1 - mx_0}{y_{Np+1} - mx_0} = \frac{0.0008153 - 0.124(0.005)}{0.02 - 0.124(0.005)} = 0.01008$$

Con los valores 1.425 y 0.0204, determina según el cuadro del anexo (ANEXO III); la lectura es determinando el valor de la ordenada (0.0204), y posteriormente tanteando el posible valor de la curva que corresponde al valor de 1.425; que será entre las curvas 1.4 y 1.5 respectivamente. Posterior a ello se grafica una extensión perpendicular con dirección a la abscisa que parte del punto de intersección; así es como se puede determinar el valor del número de etapas.

Figura 24. Diagrama de número de etapas teóricas para cascadas a contracorriente, con el equilibrio de la Ley de Henry y factores de absorción o desorción constantes. [Por Hachmuth y Vance, *chem. Eng. Progr.*, 48, 523, 570, 617 (1952)].



Nota. Forma gráfica para la determinación de etapas. Tomado de: (Treybal, R. E., 1981), pp. 142).

Por el análisis del gráfico (ANEXO I), se obtiene $N_p = 9.5 \approx 10$ etapas.

Para la determinación del diámetro de la columna; es necesario determinar datos de proceso, que serán reemplazados en la ecuación (Ec. 39) del diámetro en metros.

Utilizando la correlación de Fair para estimar el diámetro de la columna de absorción

y suponiéndolos datos: Espacio entre bandejas de 24 in (pulgadas), factor de formación de espuma de 0,9 y fracción de inundación de $f = 0,8$. La tensión superficial es de 70 dinas/cm .

Del ejemplo se tienen los siguientes datos:

- $T = 26^\circ\text{C}$
- $P = 803 \text{ mmHg}$
- $V \rightarrow G_{Np+1} = 0.01075 \frac{\text{kmol}}{\text{s}} = 38.7 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$
- $L \rightarrow L_0 = 1.815 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kmol}}{\text{s}} = 6.534 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$

Determina la masa molar promedio del vapor y del líquido:

$$M_V = 0.98(46) + 0.02(78.11) = 46.64 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$M_L = 260 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

Calcula las densidades del vapor y del líquido:

Según la conjugada de la ecuación de estado de los gases con la densidad (

$\rho = m/V$) y numero de moles ($n = m/M$)

$$\rho_V = \frac{PM}{RT} = \frac{803 \text{ mmHg} (46.64 \frac{\text{g}}{\text{mol}})}{62.38 \frac{\text{mmHg} \cdot \text{l}}{\text{mol} \cdot \text{K}} (26 + 273.15) \text{ K}} = 2.007 \frac{\text{g}}{\text{l}} = 2.007 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

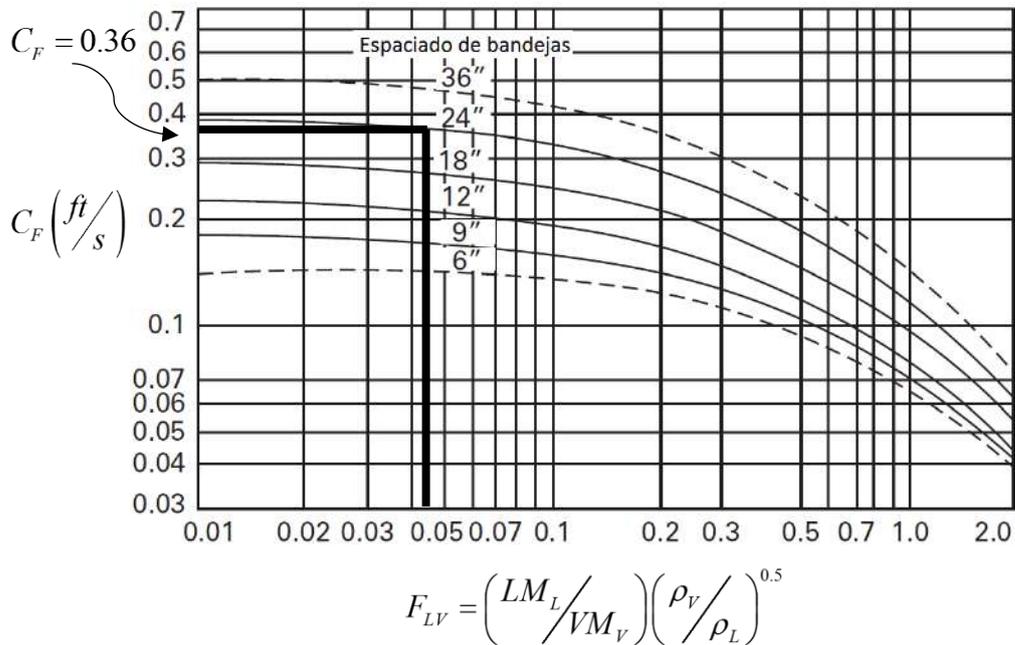
$$\rho_L = 886 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

Determina la relación de energía cinética F_{LV} (Ec. 34):

$$F_{LV} = \left(\frac{LM_L}{VM_V} \right) \left(\frac{\rho_V}{\rho_L} \right)^{0.5} = \left(\frac{6.4656 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} 260 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{38.7 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} 46.64 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \right) \left(\frac{2.007 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}}{886 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}} \right)^{0.5} = 0.044327$$

Para un espacio entre bandejas de 24in (24 pulgadas); se verifica en el grafico (Figura 11):

Figura 25. Tabla de correlación de Fair



Nota. Forma gráfica de datos de proceso en la correlación de Fair.

El valor de $C_F = 0.36 \text{ ft/s}$

Ahora se determina el factor de tensión superficial (F_{ST}) (Ec. 36):

$$F_{ST} = \left(\frac{\sigma}{20} \right)^{0.2} = \left(\frac{70}{20} \right)^{0.2} = 1.285 \text{ ft/s}$$

Se sabe que el factor de formación de espuma es: $F_F = 0.90$

Verificando en (Ec. 40); como $F_{LV} < 0.1$, entonces: $A_d/A = 0.1$

Con los datos de especificación de la bandeja, Diámetro de perforación de bandeja ($d_0 = 0.5 \text{ cm}$). Distancia entre centros de perforación ($p' = 1.5 \text{ cm}$). se calcula el

valor de $\frac{A_h}{A_a}$ en la ecuación (Ec. 40)

$$\frac{A_h}{A_a} = 0.907 \cdot \left(\frac{d_0}{p'} \right)^2 = 0.907 \cdot \left(\frac{0.5}{1.5} \right)^2 = 0.1008$$

Con el valor de $\frac{A_h}{A_d}$, según la ecuación (Ec. 37) se determina el valor de $F_{HA} = 1$.

Con todos los datos obtenidos, se calcula el valor de C en la ecuación (Ec. 35).

$$C = F_{ST} \cdot F_F \cdot F_{HA} \cdot C_F = 1.285 \frac{ft}{s} (0.9)(1)(0.36) = 0.417 \frac{ft}{s}$$

Se hace el cálculo de u_f , según la ecuación (Ec. 33).

$$u_f = C \left(\frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_V} \right)^{1/2} = 0.417 \frac{ft}{s} \left(\frac{886 \frac{kg}{m^3} - 2.007 \frac{kg}{m^3}}{2.007 \frac{kg}{m^3}} \right)^{1/2} = 8.754 \frac{ft}{s}$$

Con todos los datos de proceso obtenidos, finalmente se puede hallar el diámetro de la columna D_T , mediante la ecuación (Ec. 39).

$$D_T = \left[\frac{4VM_v}{fu_f \pi \left(1 - \frac{A_d}{A}\right) \rho_V} \right]^{0.5} = \left[\frac{4 \left(38.76 \frac{kmol}{h} \frac{1}{3600 s} \right) \left(46.64 \frac{kg}{kmol} \right)}{0.8 \left(8.754 \frac{ft}{s} \frac{1}{3.28 ft} \right) (\pi) (1 - 0.1) \left(2.007 \frac{kg}{m^3} \right)} \right]^{0.5} = 0.4072 m$$

Para calcular la altura h_T , se considera los valores teóricos recomendados:

En base a las estimaciones del número de etapas y el espaciamento entre ellas, la altura de la columna se calcula entre la bandeja superior y la bandeja inferior; agregando 4 pies (191.92 cm) sobre la bandeja superior para retirar el líquido arrastrado (h_{top}) y 10 pies (304.8 cm) por debajo de la bandeja inferior para los fondos ($h_{background}$), y de esa manera se estima la altura de la columna (Seader, J. D., Henley, E. J. y Keith Roper, D., 2010), pp. 226).

Por tanto, si el espaciado entre bandejas es de $24in = 60.96cm$.

$$h_T = \text{Etapas}(e) + \text{Etapas}(\text{espaciado}) + h_{top} + h_{background}$$

$$h_T = 10(0.3 cm) + 10(60.96 cm) + 191.92 cm + 304.8 cm = 1039.32 cm = 10.39 m$$

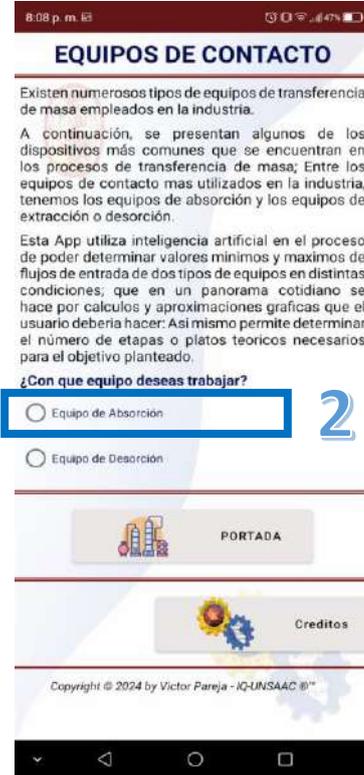
Las dimensiones de cada etapa son: $D_T = 40.72 cm$ y $h_T = 10.39 m$.

4.1.2. Cálculo del dimensionamiento mediante el uso de la aplicación.

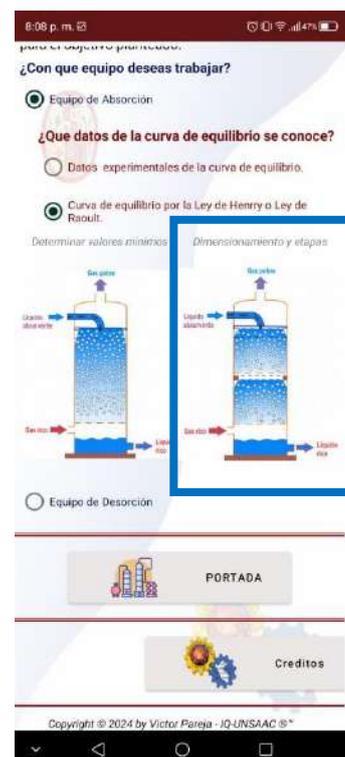
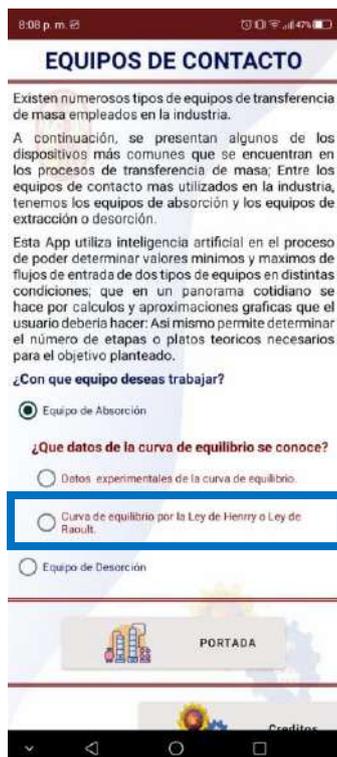
Secuencia de pasos a seguir para el cálculo del dimensionamiento de la columna de etapas del ejercicio propuesto en este documento.



1. Iniciar la aplicación.



2. Seleccionar el equipo, tipo de ingreso de datos y el cálculo.

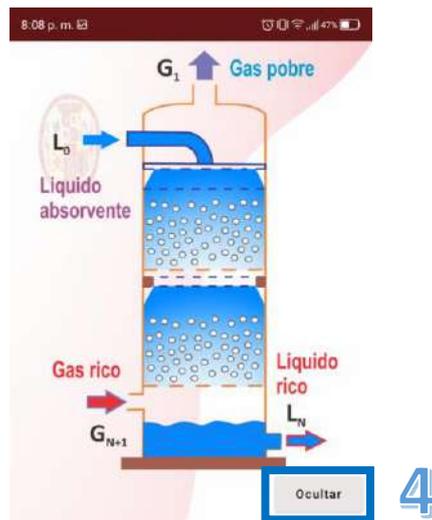




3



3. Información del equipo.



4

Ingresar las condiciones del equilibrio en función de presión parcial VS Concentración:

Temperatura: °C °K

Presión: atm mmHg

Soluto:

Porcentaje del soluto en gas rico: (%)

Líquido absorbente:

Porcentaje de soluto en absorbente: (%)

4. Ocultar información del equipo.

Dimensionamiento y calculo del número de etapas para un equipo de absorción en contracorriente

¿Sobre el equipo?

Ingresar las condiciones del equilibrio en función de presión parcial VS Concentración:

Temperatura: °C °K

Presión: atm mmHg

Soluto:

Porcentaje del soluto en gas rico: (%)

Líquido absorbente:

Porcentaje de soluto en absorbente: (%)

Portador:

¿Bajo que relación ingresara los datos? Ley de Henry Ley de Raoult

Coef. Henry: Amplitud:

Nota: Debe ingresar la cantidad de datos para el equilibrio.

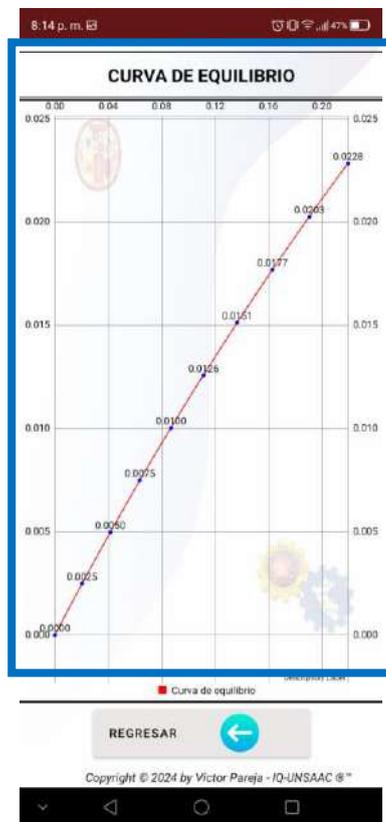
Indica la cantidad de datos disponibles:

Fracción molar y (Calculado)

CALCULAR RELACIONES DE EQUILIBRIO

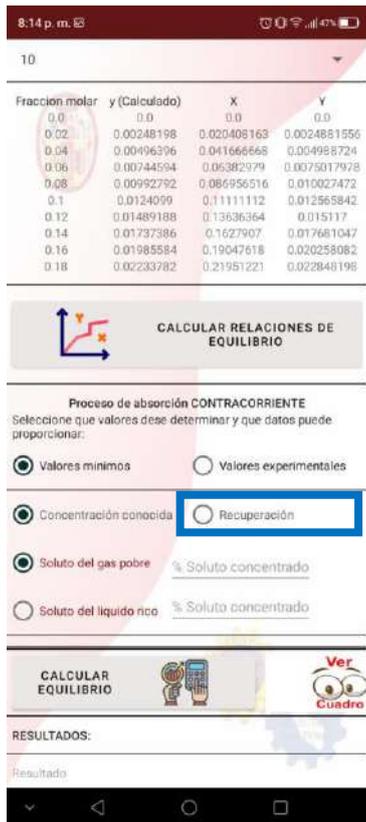
5

5. Ingresar los datos y seleccionar calcular.



6

6. La app muestra curva de equilibrio.



7. Seleccionar el tipo de flujo que se conoce.



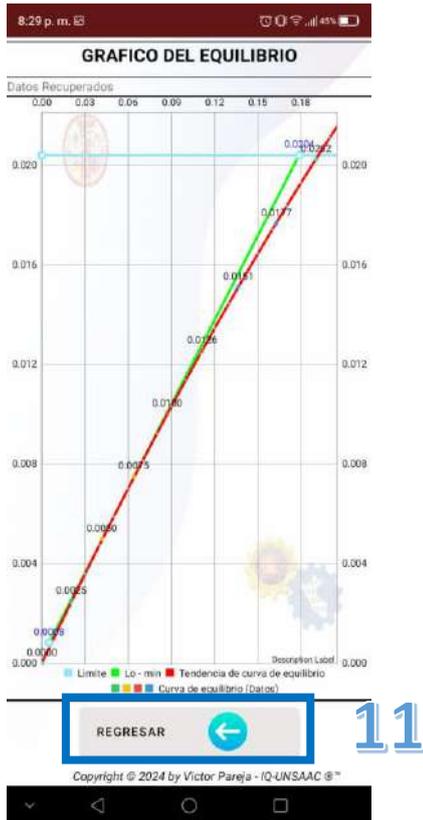
8. Ingresar porcentaje de soluto recuperado y calcular.



9. El Software muestra los valores molares mínimos.



10. Seleccionar graficar.



11. Muestra grafico de valores mínimos y seleccionar regresar.

8:16 p. m.

proporcionar:

Valores mínimos Valores experimentales

Concentración conocida Recuperación

Sóluto recuperado en el líquido 96

Sóluto recuperado en el gas % Sóluto recuperado

¿Conoces otros datos extras?

Número de moles Caudal del gas

Ingreso (gas): 0.250 m3 / seg

Exceso Ls experimental

Nota: El valor experimental al 100%, representa el valor mínimo necesario para el equilibrio.

%(Ls)Exp: 150

CALCULAR EQUILIBRIO

Ver Cuadro

Calcular dimensionamiento de la columna

RESULTADOS:

El cálculo del equilibrio de Benceno como sóluto, portado en Otros al 2 % de concentración, a condiciones de 1.06 atm de presión y a una temperatura de 26 °C, con 10 datos experimentales, que se obtiene en Aceite como absorbente, con una concentración de sóluto del 0.5 % es:

Nro. de etapas: Número de etapas

(Ls/Gs)min 0.112963155

12. Ingresar datos experimentales y calcular equilibrio.

8:17 p. m.

¿Conoces otros datos extras?

Número de moles Caudal del gas

Ingreso (gas): 0.250 m3 / seg

Exceso Ls experimental

Nota: El valor experimental al 100%, representa el valor mínimo necesario para el equilibrio.

%(Ls)Exp: 150

Ver equipo

Líquido absorbente		Gas pobre	
L0	1.8038145	G1	10.600864
LS	1.7947955	GS	10.592217
Lq0	0.009019017	Gg1	0.00846955
x0	0.005	y1	8.156611E-4
X0	0.0050251255	Y1	8.1632694E-4
Gas rico		Líquido rico	
GN+1	10.808385	LN	2.0113264
GS	10.592217	LS	1.7947955
GgN+1	0.21616769	LgN	0.21633971
yn+1	0.02	xN	0.10715809
YN+1	0.020408163	XN	0.10284566

13

13. El software muestra flujos.

8:18 p. m.

CALCULAR EQUILIBRIO

Ver Cuadro

Calcular dimensionamiento de la columna

RESULTADOS:

El cálculo del equilibrio de Benceno como sóluto, portado en Otros al 2 % de concentración, a condiciones de 1.06 atm de presión y a una temperatura de 26 °C, con 10 datos experimentales, que se obtiene en Aceite como absorbente, con una concentración de sóluto del 0.5 % es:

Nro. de etapas: 10

(Ls/Gs)min 0.112963155

Gs 10.592217

(Ls)min 1.1965303

(Ls)Exp. 1.7947955

Ver resumen

GRAFICAR

Reajuste del sentido de etapas

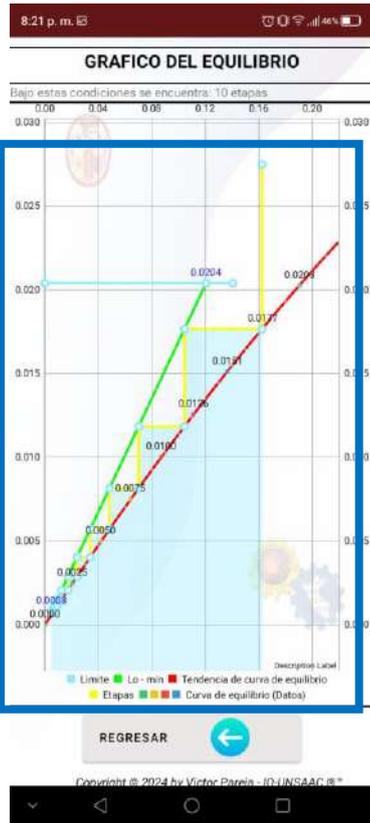
MENU PRINCIPAL

Copyright © 2024 by Víctor Pareja - IQ-UNSAAC ®

14

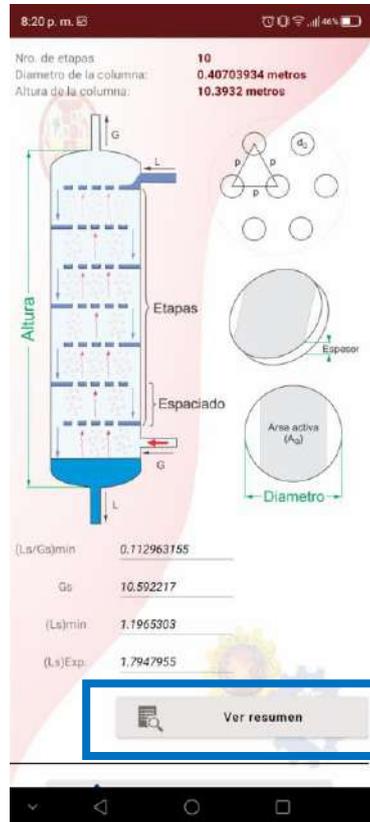
14. Muestra el número de etapas y seleccionar graficar.

15



15. Muestra grafica de las etapas.

16. Seleccionar dimensionamiento y datos. calcular



17. Muestra dimensionamiento.

Líquido absorbente	
Masa del soluto (g):	0.70447546 g de Benceno
Masa líquido absorbente (g):	467.3513 g de Aceite & Benceno
% en peso del soluto	0.15051101 % en peso de Bence
Gas pobre	
Masa del soluto (g):	0.67541444 g de Benceno
Masa gas pobre (g):	487.91742 g de Otros & Bencen
% en peso del soluto	0.13823666 % en peso de Bence
Líquido rico	
Masa del soluto (g):	16.91392 g de Benceno
Masa líquido rico (g):	483.56073 g de Aceite & Bencen
% en peso del soluto	3.3795757 % en peso de Bencen
Gas rico	
Masa del soluto (g):	16.88486 g de Benceno
Masa gas rico (g):	504.12686 g de Otros & Bencen
% en peso del soluto	3.240783 % en peso de Benceno
Resultados generales	
Masa del líquido libre de soluto (g):	466.64682 g de Aceite
Masa del gas libre de soluto (g):	487.242 g de Citros
Relación de masa líquido gas:	0.9577311 proporcion.

18. Muestra resumen de flujos/t

4.2. Cálculo de valores mínimos de equilibrio de una columna de absorción mediante datos experimentales.

En el proceso de obtención de H_2 a partir del gas de agua se dispone de la siguiente mezcla gaseosa: 62,8 % H_2 ; 33.4 % CO_2 ; 3,2 % N_2 ; 0,6 % CH_4 ; y se ha de reducir al 1 % en volumen el contenido en CO_2 lavando la mezcla con agua. Calcúlese la cantidad de agua necesaria y la concentración de la disolución líquida de salida de la torre en $\frac{Kg(CO_2)}{Kg(H_2O)}$. Si se emplea el 125 % de la cantidad mínima y la operación se verifica isotérmicamente a 12,4 °C y a 20 atm. (Puede suponerse que en las condiciones de operación son despreciables las solubilidades del H_2 , N_2 , CH_4 en el agua.). Los datos de equilibrio para este sistema (CO_2 en agua) a 12,4 °C expresados en p^* (presión parcial del en la fase gaseosa, atm) frente a C (concentración del CO_2 en agua en cm^3 de CO_2 a 12,4 °C y 1 atm, por cm^3 de agua) son:

Tabla 23.

p^*	1	5	10	12	15	18	20	23	25
c	1.086	5.15	9.65	30.12	13.63	24.5	17.11	19.1	20.31

(Fuente del ejercicio: Joaquín Ocon García, Gabriel Tojo Barreiro.: “PROBLEMAS DE INGENIERÍA QUÍMICA” 1st. Ed. Aguilar S.A. Ediciones:(1970), pp. 101).

4.2.1. Cálculo bibliográfico manual.

Solución: Este método lo utilizaremos con ayuda de Microsoft Excel; Iniciamos tomando los datos del problema: (Condiciones de presión y temperatura; composición centesimal de la sustancia problema, pesos moleculares y demás datos).

Tabla 24. Datos del problema.

Equilibrio	Condiciones		Composición	%	PM
	P (atm)	T (°C)			
	20	12.4	H_2	62.8	2
			CO_2	33.4	44
			N_2	3.2	28
			CH_4	0.6	16
			Total	100	

Se le dice método esquematizado dado que lo haremos con ayuda de un diagrama o cuadro para poder reconocer las entradas y salidas de nuestro equipo:

Tabla 25. *Tabla sistematizada para flujos de entrada y salida de la columna.*

ARRIBA				ABAJO			
Líquido absorbente		Gas pobre		Líquido rico		Gas rico	
L_1		G_1		L_2		G_2	
L_s		G_s		L_s		G_s	
Lg_1		Gg_1		Lg_2		Gg_2	
x_1		y_1		x_2		y_2	
X_1		Y_1		X_2		Y_2	

Donde:

- L_1 = Líquido absorbente más soluto (*poco o nada de soluto*).
- L_2 = Líquido rico en soluto. (*Salida*)
- G_1 = Gas con menor concentración de soluto a la entrada o libre de él.
- G_2 = Gas rico en soluto. (*Entrada*)
- L_s = Líquido absorbente (*Constante a la entrada y salida*).
- G_s = Gas portador (*Constante a la entrada y salida*).
- x_1, x_2 = Composición del soluto en el líquido (Fracción molar).
- y_1, y_2 = Composición del soluto en el gas (Fracción molar).
- Gg_1, Gg_2 = Solute en el gas.
- Lg_1, Lg_2 = Solute en el líquido.
- X_1, X_2 = Razón o relación molar en el líquido.
- Y_1, Y_2 = Razón o relación molar en el gas. (*Relación: soluto / portador*)

Esquematizamos nuestros datos experimentales de presión y concentración:

Tabla 26. *Toma de datos del problema.*

Presión (p_i)	Concentración			
$P (CO_2)$ (atm)	$C (cm^3 CO_2 / cm^3 H_2O)$	$V (CO_2)$	$V (H_2O)$	V_i (Total)
1	1.086	1.086	1	2.086
5	5.15	5.15	1	6.15

10	9.65	9.65	1	10.65
12	30.12	30.12	1	31.12
15	13.63	13.63	1	14.63
18	24.5	24.5	1	25.5
20	17.11	17.11	1	18.11
23	19.1	19.1	1	20.1
25	20.31	20.31	1	21.31

Determinamos los valores de x_i, y_i, X_i, Y_i ; según la ley de Avogadro:

$$\frac{V_1}{V_2} = \frac{n_1}{n_2} \quad (53)$$

Tabla 27. Cálculo de relaciones (X_i, Y_i) de fracción molar de la fase líquida y la fase gaseosa.

	(Ec. 2,4)	(Ec. 2,29)	(Ec. 2,24)
$x_i = \frac{n_{CO_2}}{n_{i-total}} = \frac{V(CO_2)}{V_i(Total)}$	$y_i = \frac{P_i}{P_{total}}$	$X_i = \frac{x_i}{(1-x_i)}$	$Y_i = \frac{y_i}{(1-y_i)}$
x_i	y_i	X_i	Y_i
0.52061361	0.05	1.086	0.05263158
0.83739837	0.25	5.15	0.33333333
0.90610329	0.5	9.65	1
0.96794872	0.6	30.2	1.5
0.9316473	0.75	13.63	3
0.96078431	0.9	24.5	9
0.94478189	1	17.11	#¡DIV/0!
0.95024876	1.15	19.1	-7.66666667
0.95307367	1.25	20.31	-5

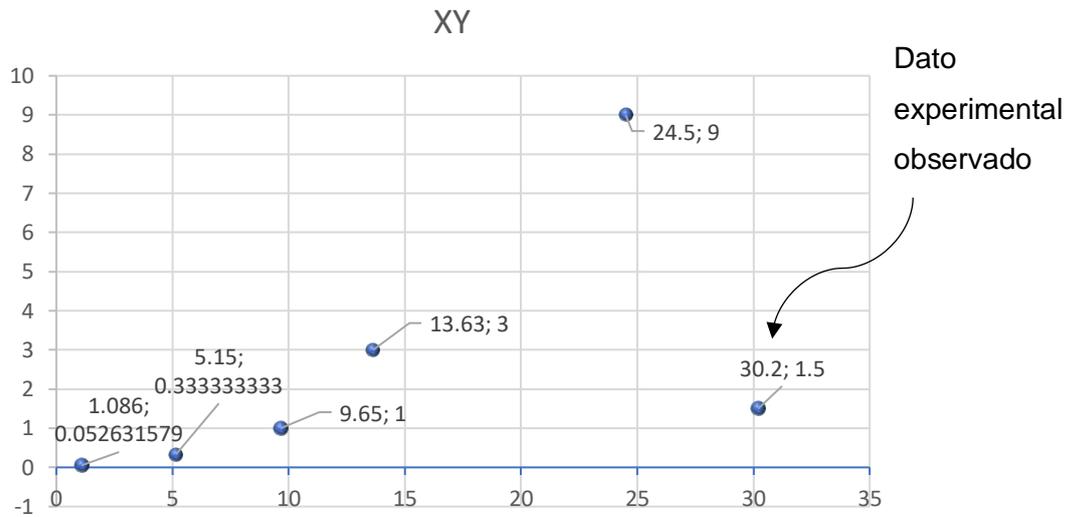
Los datos X_i, Y_i son aquellos que son necesarios para que se pueda graficar nuestra curva de equilibrio.

El valor de x_i, y_i no pueden ser mayor a 1; son fracciones molares, por tanto, se toma la decisión de considerar solo hasta séptimo dato.

Se debe hacer el análisis de la lógica de los datos a considerar por ser un procedimiento experimental.

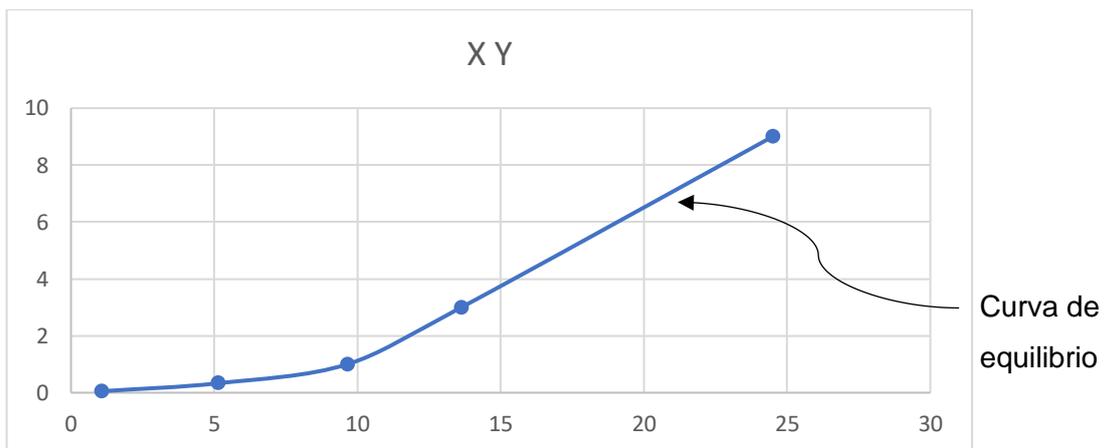
Graficamos la curva de equilibrio con los datos X_i, Y_i obtenidos.

Figura 26. Ubicación de datos experimentales del problema.



Se grafica curva de equilibrio considerando los datos experimentales.

Figura 27. Grafico de curva de equilibrio exceptuando datos observados.



Colocamos los datos del problema en el cuadro.

Tabla 28. Tabla sistematizada para flujos de entrada y salida de la columna.

ARRIBA				ABAJO			
Líquido absorbente		Gas pobre		Líquido rico		Gas rico	
L_1		G_1		L_2		G_2	
L_s		G_s		L_s		G_s	
Lg_1		Gg_1		Lg_2		Gg_2	
x_1	0	y_1	0.01	x_2		y_2	0.334
X_1		Y_1		X_2		Y_2	

Utilizando las ecuaciones (Ec. 16) & (Ec. 19) se debe llenar los datos X_1, Y_1, Y_2 (Cuando

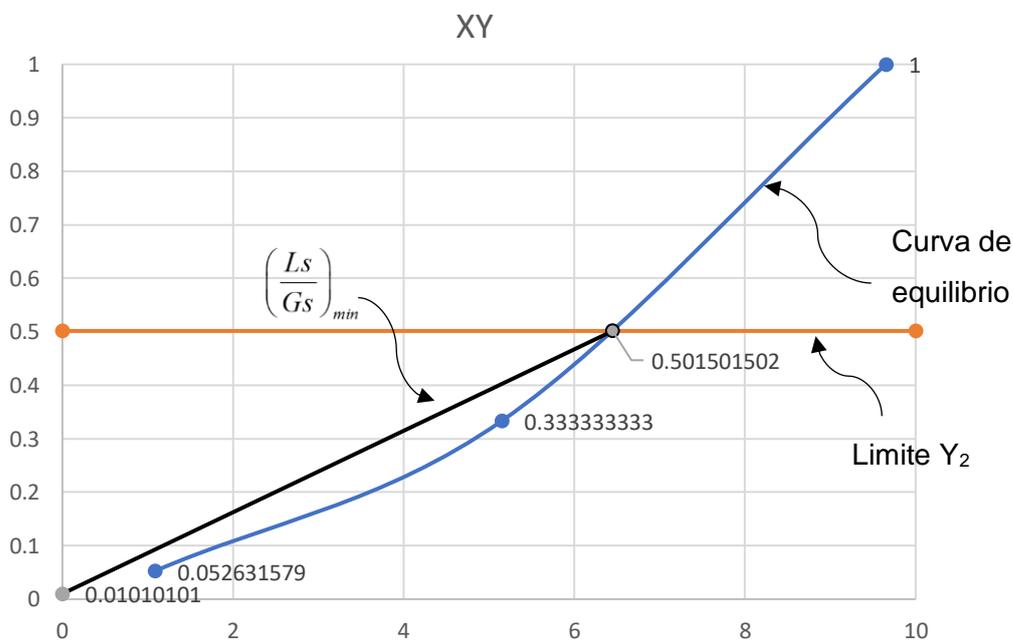
se determina el flujo mínimo es solo necesario conocer $x_1, x_2, y_1, y_2, X_1, X_2, Y_1, Y_2$).

Tabla 29. Tabla sistematizada para flujos de entrada y salida de la columna.

ARRIBA				ABAJO			
Líquido absorbente		Gas pobre		Líquido rico		Gas rico	
L_1		G_1		L_2		G_2	
Ls		Gs		Ls		Gs	
Lg_1		Gg_1		Lg_2		Gg_2	
x_1	0	y_1	0.01	x_2		y_2	0.334
X_1	0	Y_1	0.01010101	X_2		Y_2	0.501501502

Al observar que nos faltan los datos x_2, X_2 se tiene que determinar de forma manual; tanteando posibles valores para X_2 hasta encontrar un dato que grafique la línea de operación $\{(X_1, Y_1), (X_2, Y_2)\}$ en la intersección con la curva de equilibrio en el valor límite de Y_2 ; o en un punto de tangencia si es una curva que disminuye su pendiente en función del eje x. (Considerar graficar el límite en la ordenada con el valor de Y_2). Así se tiene:

Figura 28. Ubicación de intersección de línea de operación con curva de equilibrio para determinación de valores mínimos.



Dado este gráfico obtenido se tienen los datos en el cuadro: (El valor de x_2 se puede

hallar despejando la ecuación (Ec. 19); así se tiene: $x_2 = \frac{X_2}{(1 + X_2)}$).

Tabla 30. Tabla sistematizada para flujos de entrada y salida de la columna.

ARRIBA				ABAJO			
Líquido absorbente		Gas pobre		Líquido rico		Gas rico	
L_1		G_1		L_2		G_2	
Ls		Gs		Ls		Gs	
Lg_1		Gg_1		Lg_2		Gg_2	
x_1	0	y_1	0.01	x_2	0.865771812	y_2	0.334
X_1	0	Y_1	0.01010101	X_2	6.45	Y_2	0.501501502

Con este esquema se puede calcular los siguientes datos:

Según la figura (Fig.6) se tiene: Pendiente = $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min}$

Hallamos la pendiente de $(X_1, Y_1); (X_2, Y_2)$ (Ec. 32)

$$m = \frac{Y_2 - Y_1}{X_2 - X_1} = \frac{0.501501502 - 0.01010101}{6.45 - 0} = 0.07618612 = \left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min}$$

$$\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min} = 0.07618612$$

Ahora que se encontró la fracción molar mínima para el problema; nos solicita determinar el 125 % del mínimo; pero puesto que no tenemos el valor del flujo inicial, podemos asumir un valor de 100 moles de gas rico alimentado. ($G_2 = 100$ moles)

Ahora se puede calcular todos los datos despejando las ecuaciones de las tablas (Tabla 3) & (Tabla 4).

Tabla 31. Tabla sistematizada para flujos de entrada y salida de la columna.

ARRIBA				ABAJO			
Líquido absorbente		Gas pobre		Líquido rico		Gas rico	
L_1		G_1	67.27272727	L_2		G_2	100
Ls		Gs	66.6	Ls		Gs	66.6
Lg_1		Gg_1	0.672727273	Lg_2		Gg_2	33.4
x_1	0	y_1	0.01	x_2		y_2	0.334
X_1	0	Y_1	0.01010101	X_2		Y_2	0.501501502

Con el valor de Gs calculado podemos determinar el valor del $(Ls)_{min}$ según el valor

encontrado de $\left(\frac{Ls}{Gs}\right)_{min}$:

$$(Ls)_{min} = Gs(0.07618612) = 66.6(0.07618612) \rightarrow (Ls)_{min} = 5.07399577$$

$$Ls = 125\%(Ls)_{min} = 125\%(5.07399577) \rightarrow Ls = 6.34249471$$

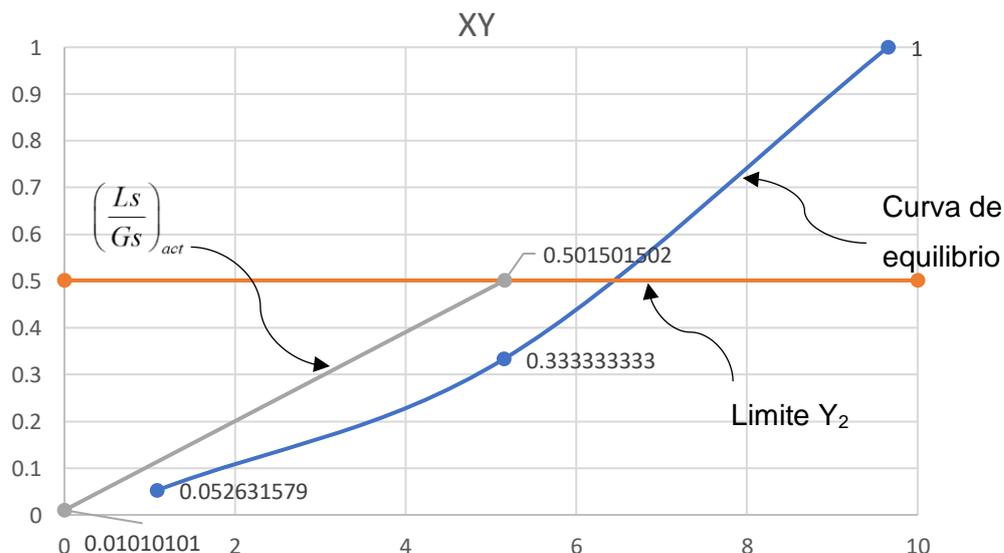
Los datos obtenidos nos ayudan a encontrar los valores que faltan en el cuadro para determinar los flujos y fracciones molares; (Usamos las ecuaciones despejadas necesarias de las tablas (Tabla 3) & (Tabla 4).)

Tabla 32. Tabla sistematizada para flujos de entrada y salida de la columna.

ARRIBA				ABAJO			
Líquido absorbente		Gas pobre		Líquido rico		Gas rico	
L_1	6.342494715	G_1	67.27272727	L_2	39.06976744	G_2	100
Ls	6.342494715	Gs	66.6	Ls	6.342494715	Gs	66.6
Lg_1	0	Gg_1	0.672727273	Lg_2	32.72727273	Gg_2	33.4
x_1	0	y_1	0.01	x_2	0.837662338	y_2	0.334
X_1	0	Y_1	0.01010101	X_2	5.16	Y_2	0.501501502

Con los datos obtenidos podemos realizar el grafico final y observar que la línea de operación queda fuera de la curva de equilibrio y por encima de la misma por ser un equipo en contracorriente.

Figura 29. Ubicación de línea de operación con valores 125% de los mínimos.



En estas condiciones, el problema decía: “Calcúlese la cantidad de agua necesaria y la concentración de la disolución líquida de salida de la torre.”

Por consiguiente:

La cantidad de agua necesaria será: $L_s = 6.34249471 \text{ moles de agua}$

Para determinar el número de moles (n) se tiene la siguiente ecuación:

$$n = \frac{\text{masa}}{PM} \quad (54)$$

Donde n = Nro. de moles y PM = Peso molecular.

Despejando de esta ecuación, si el peso molecular del H_2O es 18: se tiene:

$$\text{masa}_{(agua)} = n_{agua} (PM_{agua}) = 6.34249471 \text{ moles} \left(18 \frac{g}{mol}\right) \rightarrow \text{masa}_{(agua)} = 114.16 \text{ g}$$

Para determinar la concentración del líquido rico a la salida de la torre en $\frac{kg(CO_2)}{kg(H_2O)}$; es necesario determinar la masa del soluto (CO_2) en el flujo de

salida del líquido rico; si $L_{g_2} = 32.72727273$ indica el número de moles del soluto de este flujo, convertimos este valor a masa, si el peso molecular del CO_2 es 44: (Utilizando la ecuación (Ec. 54))

$$\text{masa}_{(CO_2)} = n_{CO_2} (PM_{CO_2}) = 32.72727273 \text{ moles} \left(44 \frac{g}{mol}\right) \rightarrow \text{masa}_{(CO_2)} = 1440 \text{ g}$$

La concentración en gramos o en kg es proporcional, por tanto:

$$C = \frac{\text{masa}_{(CO_2)}}{\text{masa}_{(Agua)}} = \frac{1440 \text{ kg}_{(CO_2)}}{114.16 \text{ kg}_{(Agua)}}$$

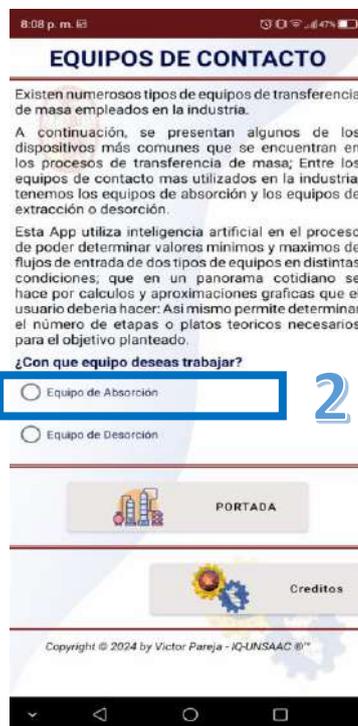
$$C = 12.6138 \frac{\text{kg}_{(CO_2)}}{\text{kg}_{(Agua)}}$$

4.2.2. Cálculo de los valores mínimos de una columna de absorción mediante el uso de la aplicación.

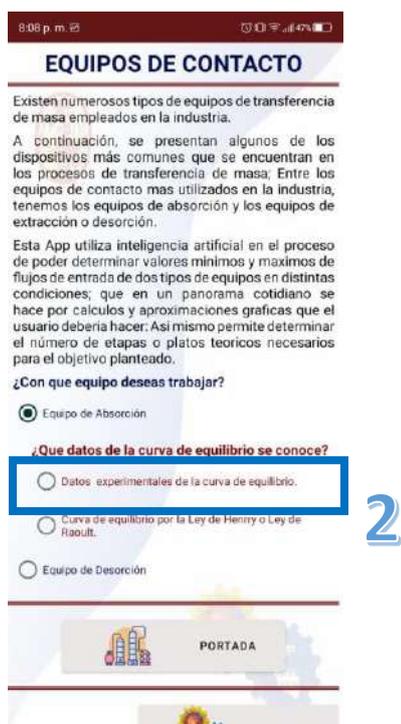
Secuencia de pasos a seguir para el cálculo del dimensionamiento de la columna de etapas del ejercicio propuesto en este documento.



1. Iniciar la aplicación.



2. Seleccionar el equipo, tipo de ingreso de datos y el cálculo.

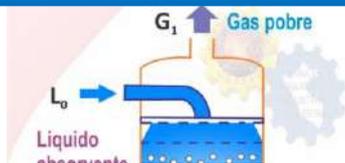


8:08 p. m. 47%

Dimensionamiento y calculo del número de etapas para un equipo de absorción en contracorriente

El proceso de absorción convencionalmente se refiere al contacto íntimo de una mezcla gaseosa con un líquido de modo que parte de uno o más de los constituyentes del gas se disuelva en el líquido. El contacto suele tener lugar en algún tipo de columna empacada. Las columnas empacadas se utilizan para el contacto continuo entre líquido y gas. La columna empacada en contracorriente es el tipo de unidad más común que se encuentra en el control de contaminantes gaseosos para la eliminación de gases, vapores u olores indeseables. Este tipo de columna también ha encontrado una amplia aplicación en la industria química. La corriente de gas se mueve hacia arriba a través del lecho empacado contra un líquido absorbente o reactivo que se introduce en la parte superior del empaque. Esto da como resultado la mayor eficiencia de recuperación posible. Dado que la concentración en la corriente de gas disminuye a medida que asciende a través de la columna, constantemente hay líquido más fresco disponible para el contacto. Esto proporciona una fuerza impulsora media máxima para el proceso de transferencia en todo el lecho. Al encontrar un proceso que es paulatino de absorción, en la presente se muestra un equipo por etapas; y en esta pestaña se calculara el numero de etapas o platos teóricos.

3



3. Información del equipo.

8:08 p. m. 47%

Ocultar

4

Ingresar las condiciones del equilibrio en función de presión parcial VS Concentración:

Temperatura: °C °K

Presión: atm mmHg

Soluto: Nombre del soluto Peso molecular

Porcentaje del soluto en gas rico: (%) Valor porcentual

Líquido absorbente: Nombre del abs. Peso molecular

Porcentaje de soluto en absorbente: (%) Valor porcentual

4. Ocultar información del equipo.

10:26 p. m. 100%

Equipo de absorción en contracorriente

¿Sobre el equipo?

Ingresar las condiciones del equilibrio en función de presión parcial VS Concentración:

Temperatura: 12.4 °C °K

Presión: 20 atm mmHg

Soluto: CO2 44

Porcentaje del soluto en gas rico: (%) 33.4

Líquido absorbente: Agua 18

Porcentaje de soluto en absorbente: (%) 0

* Portador: Otros 3.375

Relacion de concentración - Soluto/Absorbente: Masa Volumen

Soluto: 1 Absorbente: 1

Nota: Debe ingresar en las mismas unidades de presión que el dato.

5

5. Ingresar los datos generales.

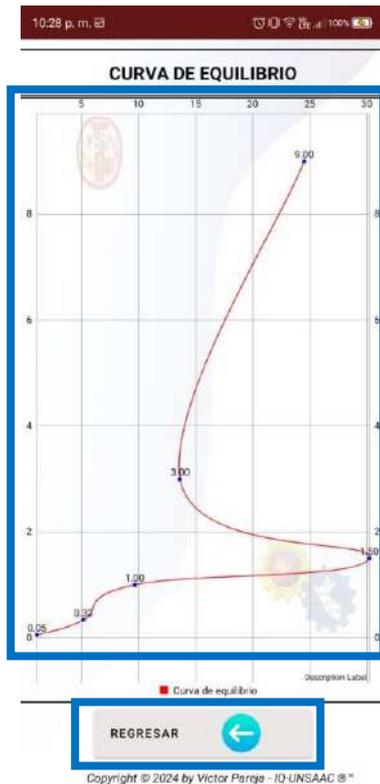
10:27 p. m. 100%

Ingresar los datos de equilibrio experimentales de presión parcial y concentración.

Pparcial: <input type="text"/> 1	Concentración: <input type="text"/> 1.086
Pparcial: <input type="text"/> 5	Concentración: <input type="text"/> 5.15
Pparcial: <input type="text"/> 10	Concentración: <input type="text"/> 9.65
Pparcial: <input type="text"/> 12	Concentración: <input type="text"/> 30.2
Pparcial: <input type="text"/> 15	Concentración: <input type="text"/> 13.63
Pparcial: <input type="text"/> 18	Concentración: <input type="text"/> 24.5
Pparcial: <input type="text"/> 20	Concentración: <input type="text"/> 17.11
Pparcial: <input type="text"/> 23	Concentración: <input type="text"/> 19.1
Pparcial: <input type="text"/> 25	Concentración: <input type="text"/> 20.31

6

6. Ingresar datos experimentales y el seleccionar el botón calcular.



7. El software muestra los datos experimentales y seleccionar el boton regresar

10:28 p. m. 📶 🔋 100%

Ingres los datos de equilibrio experimentales de presión parcial y concentración.

9

Pparcial: 1	Concentración: 1.086
Pparcial: 5	Concentración: 5.15
Pparcial: 10	Concentración: 9.65
Pparcial: 12	Concentración: 30.2
Pparcial: 15	Concentración: 13.63
Pparcial: 18	Concentración: 24.5
Pparcial: 20	Concentración: 17.11
Pparcial: 23	Concentración: 19.1
Pparcial: 25	Concentración: 20.31

X	Y
1.086	0.05263158
5.149999	0.33333334
9.649995	1.0
30.200016	1.5000001
13.63	3.0
24.500002	8.9999998
17.110004	Infinity
19.100008	-7.666668
-1.1144644	-5.0

CALCULAR RELACIONES DE EQUILIBRIO

8. Se muestran los valores de X & Y calculados.

10:29 p. m. 📶 🔋 100%

Pparcial: 25 Concentración: 20.31

X	Y
1.086	0.05263158
5.149999	0.33333334
9.649995	1.0
30.200016	1.5000001
13.63	3.0
24.500002	8.9999998
17.110004	Infinity
19.100008	-7.666668
-1.1144644	-5.0

CALCULAR RELACIONES DE EQUILIBRIO

Proceso de absorción CONTRACORRIENTE
 Seleccione que valores dese determinar y que datos puede proporcionar:

Valores mínimos Valores experimentales

Concentración conocida Recuperación

Soluto del gas pobre Soluto del liquido rico % Soluto concentrado

CALCULAR EQUILIBRIO Ver Cuadro

RESULTADOS:

Resultado

9. Seleccionar el dato conocido y el valor porcentual.

10:29 p. m. 📶 🔋 100%

CALCULAR RELACIONES DE EQUILIBRIO

Proceso de absorción CONTRACORRIENTE
 Seleccione que valores dese determinar y que datos puede proporcionar:

Valores mínimos Valores experimentales

Concentración conocida Recuperación

Soluto del gas pobre Soluto del liquido rico % Soluto concentrado

CALCULAR EQUILIBRIO Ver Cuadro

RESULTADOS:

El calculo del equilibrio de CO2 como soluto, portado en Otros al 33.4 % de concentración, a condiciones de 20 atm de presión y a una temperatura de 12.4 °C, con 9 datos experimentales; que se obtiene en Agua como absorbente, con una concentración de soluto del 0.074950874.

(Ls/Gs)min **0.074950874**

Gs Gs

(Ls)min (Ls)min

Ver resumen

10. El software analiza los datos experimentales e indica el valor Ls/Gs min (Análisis IA).



11. El software muestra la curva de equilibrio y la línea de operación mínima.

12. Seleccionar la opción de valores experimentales y numero de moles para una base de cálculo.

13

14

13. Se ingresa el exceso porcentual del mínimo y el flujo para base; y luego calcular equilibrio.



15

15. El software grafica la línea de operación requerida.

14. El software muestra resultados experimentales. Seleccionar el botón graficar.

Líquido absorbente	
Masa del soluto (g):	0.0 g de CO2
Masa líquido absorbente (g):	712.31389 g de Agua & CO2
% en peso del soluto	0.0 % en peso de CO2
Gas pobre	
Masa del soluto (g):	29.60098 g de CO2
Masa gas pobre (g):	254.37509 g de Otros & CO2
% en peso del soluto	70.42348 % en peso de CO2
Líquido rico	
Masa del soluto (g):	1440.0 g de CO2
Masa líquido rico (g):	7552.3138 g de Agua & CO2
% en peso del soluto	48.12329 % en peso de CO2
Gas rico	
Masa del soluto (g):	1469.6001 g de CO2
Masa gas rico (g):	1694.3751 g de Otros & CO2
% en peso del soluto	46.447906 % en peso de CO2
Resultados generales	
Masa del líquido libre de soluto (g):	712.31389 g de Agua
Masa del gas libre de soluto (g):	224.775 g de Otros
Relación de masa líquido gas:	0.49967253 proporción

16

16. Regresar y ver el resumen de flujos/t.

4.3. CÁLCULO DE ERROR.

Tabla 33. Tabla de análisis de error entre resultados bibliográficos, resultados por software desarrollado y otro software.

Ejercicio planteado en el contenido.						
Problema 1	Descripción de lo hallado	Valor bibliográfico	Valor por Software	Error absoluto	Error Relativo	Valor por Chemsep
<p>Un gas de alumbrado se va a liberar del aceite ligero lavándolo con un aceite de lavado como absorbente; Las circunstancias son: Absorbedor: Gas entrante, 250 M³/s (31800 ft³/s) a T = 26°C ; P_t=1.07 x 10⁵(803 mmHg = 1.05658 atm), contendrá 2.0 % en volumen de vapores de aceite ligero en otros gases (M = 46 uma). Se va a suponer que todo el aceite ligero es benceno y que se requiere un 96% de eliminación. El aceite de lavado va a entrar a 26°C, contendrá 0.005 fracción mol de benceno y tendrá un peso molecular promedio de 260 uma; y una densidad de 886 kg/m³. Se va a utilizar un flujo de circulación del aceite de veces la mínima. Las soluciones de aceite de lavado-benceno son ideales. La temperatura va a ser constante e igual a 26°C. Calcular el número de platos teóricos que se requieren para el absorbedor; Correlación de Fair, para estimar el diámetro de la columna de absorción. Suponga un espacio entre bandejas de 24 in (pulgadas), un factor de formación de espuma de 0.9 y una fracción de inundación de 0.8. La tensión superficial es de 70 dinas/cm. Datos técnicos de las bandejas perforadas. Diámetro de perforación de bandeja 0.5cm, distancia entre centros perforados 1.5 cm, espesor de la bandeja 0.3 cm.</p>						
	Sto. en Abs. (mol/s)	0.0092305599	0.0089681150	0.000262445	2.843%	0.00923
	Sto. en G. (mol/s)	0.2180976180	0.2180976100	8.04788E-09	0.000%	0.218098
	Gg ₁ (mol/s)	0.0087239047	0.0087242130	3.08278E-07	0.004%	0.0328225
	LG _N (mol/s)	0.2186042732	0.2183415100	0.000262763	0.120%	0.194505
	(Ls)min (mol/s)	1.2040	1.1898	0.0142261	1.182%	
	(Ls)exp (mol/s)	1.8060	1.7847	0.0213392	1.182%	1.8060000
	Etapas	10	10	0	0.000%	10
	Diámetro (m)	0.4072	0.4069359	0.00026413	0.065%	
	Altura (m)	10.390000	10.3932	0.0032	0.031%	
Ejercicio 3.2 André B. de Haan – Burak Eral – Boelo Schuur; “INDUSTRIAL SEPARATION PROCESSES - FUNDAMENTALS” 2th. Ed. Walter de Gruyter GmbH & Co KG: (2020).						
Problema 2	Descripción de lo hallado	Valor bibliográfico	Valor por Software	Error absoluto	Error Relativo	Valor por Chemsep
<p>Cuando se fermenta melaza para producir un licor que contiene etanol, se desprende un vapor rico en CO₂ que contiene una pequeña cantidad de etanol. El alcohol se puede recuperar mediante absorción con agua en una torre de bandejas de tamiz. Para las siguientes condiciones, determine el número de etapas de equilibrio necesarias para el flujo contracorriente de líquido y gas, suponiendo condiciones isotérmicas e isobáricas en la torre y despreciando la</p>						
	Sto. en Abs. (mol/s)	0	0	0	0.000%	0
Sto. en G. (mol/s)	1	1	0	0.000%	1	

<p>transferencia de masa de todos los componentes excepto el etanol. Gas entrante: 180 kmol/h, 98% CO₂, 2% alcohol etílico, 30°C, 1,1 bar 100% agua, Líquido absorbente entrante: 30°C; 1,1 bar. Recuperación de etanol requerida: La presión de vapor del etanol asciende a 0,10 bar a 30°C, y su coeficiente de actividad en fase líquida en dilución infinita en agua puede tomarse como 7,5. (Constante empírica de Henry, m=0.682).</p>	G _{g1} (mol/s)	0.05	0.049999237	7.63E-07	0.002%	2.0053E-11
	LG _N (mol/s)	0.95	0.95000076	7.6E-07	0.000%	1.0000E+00
	(Ls)min (kmol/s)	31.4050	31.9691810	0.564181	1.796%	
	(Ls)exp (kmol/s)	47.1074	47.9537730	0.846334983	1.797%	47.1074380
	Etapas	6	6	0	0.000%	6

Ejercicio 8.1 - 6.8 J. D. Seader - Ernest J. Henley – D. Keith Roper; “SEPARATION PROCESS PRINCIPLES – with Applications Using Process Simulators” 4th. Ed. John Wiley & Sons, Inc.: (2016).

Problema 3	Descripción de lo hallado	Valor bibliográfico	Valor por Software	Error absoluto	Error Relativo	Valor por Chemsep
<p>En un bioproceso, la melaza se fermenta para producir un licor que contiene alcohol etílico. Se desprende un vapor rico en CO₂ con una pequeña cantidad de alcohol etílico. El alcohol se recupera mediante absorción con agua en una torre de bandejas tamizadoras. Determine el número de etapas de equilibrio necesarias para el flujo a contracorriente de líquido y gas, suponiendo condiciones isotérmicas, isobáricas y absorción de etanol únicamente. El gas que entra es 180 kmol/H, 98% CO₂ y 2% de alcohol etílico, 110kPa (825.068 mmHg). EL absorbente líquido entrante es 100% agua, 30°C, 110 kPa. La recuperación (absorción) requerida de alcohol etílico es de 97%. Suponga un espacio entre bandejas de 24 pulgadas, un factor de formación de espuma de 0.9 y una fracción de inundación de 0.8. La tensión superficial es de 70 dinas/cm.</p>	Sto. en Abs. (mol/s)	0	0	0	0.000%	0
	Sto. en G. (mol/s)	1	1	0	0.000%	1
	G _{g1} (mol/s)	0.03	0.02999878	1.22E-06	0.004%	0
	LG _N (mol/s)	0.97	0.9700012	1.2E-06	0.000%	1.24984
	(Ls)min (kmol/s)	27.0000	26.8760	0.124046	0.459%	
	(Ls)exp (kmol/s)	40.6000	40.3139	0.286069	0.705%	40.6
	Etapas	7	7	0	0.000%	7
	Diametro (m)	0.82	0.8130466	0.0069534	0.848%	
	Altura (m)	8.50	8.5554	0.0554	0.652%	

Ejercicio 8.2 Robert E. Treybal.: “MASS-TRANSFER OPERATIONS” 3th. Ed. Mc.Graw Hill Chemical Engineering Series – Book Company:(1981)

Problema 4	Descripción de lo hallado	Valor bibliográfico	Valor por Software	Error absoluto	Error Relativo	Valor por Chemsep
<p>Gas entrante, 0.250 m³/s (31 800 ft³/h) a 26°C; P_t = 1.07(10⁵) N/m² (803 mm Hg), contendrá 2.0% en volumen de vapores de aceite ligero. Se va a suponer que todo el aceite ligero es benceno y que se requiere un 95% de eliminación. El aceite de lavado va a entrar a 26°C, contendrá 0.005 fracción mol de benceno y tendrá un peso molecular promedio de 260. Se va a utilizar un flujo de circulación del aceite de 1.5 veces la mínima. Las soluciones de aceite de lavado-benceno son ideales. La temperatura va a ser constante e igual a 26°C.</p>	Sto. en Abs. (mol/s)	0.009019835	0.00874567	0.000274165	3.040%	0.00901983
	Sto. en G. (mol/s)	0.215362011	0.21605931	0.000697299	0.324%	0.215362
	G _{g1} (mol/s)	0.010768101	0.010803223	3.51225E-05	0.326%	0.0232235
	LG _N (mol/s)	0.213613745	0.21400176	0.000388015	0.182%	0.201158
	(Ls)min (kmol/s)	1.1900	1.1564215	0.0335785	2.822%	

	(Ls)exp (kmol/s)	1.7850	1.7346323	0.05036775	2.822%	1.7850
	Etapas	8	8	0	0.000%	8
Ejercicio 12.1 Phillip C. Wankat; "SEPARATION PROCESS ENGINEERING – Includes mass transfer analysis" 3th. Ed. Pearson Education, Inc., publication: (2012).						
Problema 5	Descripción de lo hallado	Valor bibliográfico	Valor por Software	Error absoluto	Error Relativo	Valor por Chemsep
Se deben procesar 1000 kmol/h de aire que contiene 100 ppm (mol) de cloroformo a 25°C y 2,0 atmósferas. Planeamos absorber el cloroformo con agua pura a 25°C. La operación es a Ls/Gs = 1,4(Ls/Gs)min. Si queremos una corriente de aire de salida que contenga 10,0 ppm de cloroformo, ¿cuántas etapas de equilibrio se requieren?	Sto. en Abs. (mol/s)	0	0	0	0.000%	0
	Sto. en G. (mol/s)	0.027777778	0.027777914	1.36222E-07	0.000%	0.027778
	Gg ₁ (mol/s)	0.002777528	0.0027771	4.28175E-07	0.015%	0
	LG _N (mol/s)	0.02500025	0.025000814	5.63997E-07	0.002%	0.027778
	(Ls)min (kmol/s)	26596.00	26408.0800	187.92	0.707%	
	(Ls)exp (kmol/s)	37234.40	36971.3120	263.088	0.707%	37234.40
	Etapas	5	5	0	0.000%	5
Ejercicio 6.8 Joaquín Ocon Garcia, Gabriel Tojo Barreiro.: "PROBLEMAS DE INGENIERÍA QUÍMICA". Aguilar S.A. Ediciones: (1970).						
Problema 6	Descripción de lo hallado	Valor bibliográfico	Valor por Software	Error absoluto	Error Relativo	Valor por Chemsep
En el proceso de obtención de H ₂ a partir del gas de agua se dispone de la siguiente mezcla gaseosa: 62,8% H ₂ ; 33,4% CO ₂ ; 3,2% N ₂ ; 0,6% CH ₄ , y se ha de reducir al 1% en volumen el contenido en CO ₂ lavando la mezcla con agua. Calcúlese la cantidad necesaria de agua y la concentración de la disolución líquida de salida de la torre (expresada en Kg CO ₂ /Kg H ₂ O) si se emplea el 125% de la cantidad mínima y la operación se verifica isotérmicamente a 12,4°C y a 20 atm. Puede suponerse que en las condiciones de operación son despreciables las solubilidades del H ₂ , CH ₄ y N ₂ en el agua. Los datos de equilibrio para este sistema (CO ₂ en agua) a 12,4°C expresados en p* (presión parcial del CO ₂ en la fase gaseosa en atmosferas) frente a C (concentración del CO ₂ en agua en cm ³ de CO ₂ , a 12,4°C y 1 atm, por cm ³ de agua) son: (p* ; C): (1 ; 1,086), (5 ; 5,15), (10 ; 9,65), (15 ; 13,63), (20 ; 17,11), (25 ; 20,31).	Sto. en Abs. (mol/s)	0	0	0	0.000%	
	Sto. en G. (mol/s)	33.4	33.4	0	0.000%	
	Gg ₁ (mol/s)	0.672727273	0.6727295	2.22727E-06	0.000%	
	LG _N (mol/s)	32.72727273	32.7272	7.27273E-05	0.000%	
	(Ls)min (kmol/s)	5.0740	4.9917	0.082267472	1.621%	
	(Ls)exp (kmol/s)	6.3425	6.2397	0.10283434	1.621%	6.3425
	Etapas	4	4	0	0.000%	4

Ejercicio 6.9 Joaquín Ocon García, Gabriel Tojo Barreiro.: “PROBLEMAS DE INGENIERÍA QUÍMICA”. Aguilar S.A. Ediciones: (1970).						
Problema 7	Descripción de lo hallado	Valor bibliográfico	Valor por Software	Error absoluto	Error Relativo	Valor por Chemsep
En una columna de absorción de platos se tratan 150 m ³ /h, de una mezcla amoníaco/aire que entra por el fondo de la columna con una concentración del 3% en volumen de NH ₃ y sale por la cúspide con una concentración del 0.05% en volumen. La absorción con agua se verifica isotérmicamente a 30°C y atm. La relación de equilibrio para este sistema a concentraciones bajas de amoníaco viene dada por la ecuación “y = 0,185x” siendo x e y las fracciones molares del amoníaco en las fases líquidas y gaseosa, respectivamente. Calcúlese: a) La cantidad mínima de agua a emplear. b) El número de etapas teóricas necesarias si la cantidad de agua empleada es 60% superior a la mínima.	Sto. en Abs. (mol/s)	0	0	0	0.000%	0
	Sto. en G. (mol/s)	0.050285015	0.05028503	1.45323E-08	0.000%	0.0503
	Gg ₁ (mol/s)	0.000813348	0.000813365	1.72427E-08	0.002%	0.0482315
	LG _N (mol/s)	0.049471668	0.049471665	2.7104E-09	0.000%	0.00206852
	(Ls)min (kmol/s)	0.2811	0.2715901	0.009498971	3.379%	
	(Ls)exp (kmol/s)	0.4497	0.4345441	0.015198354	3.379%	0.4497424
	Etapas	8	8	0	0.000%	8
Ejercicio 8.2 Robert E. Treybal.: “MASS-TRANSFER OPERATIONS” 3th. Ed. Mc.Graw Hill Chemical Engineering Series – Book Company:(1981).						
Problema 8	Descripción de lo hallado	Valor bibliográfico	Valor por Software	Error absoluto	Error Relativo	Valor por Chemsep
La solución de benceno y aceite de un absorbedor se va a calentar a 120°C y va a entrar a un desorbedor a 1 atm de presión. El vapor desorbente va a estar a presión atm, sobrecalentado a 122°C. El aceite para eliminar el benceno, 0.005 fracción mol de benceno, se va a enfriar a 26°C y va a regresar al absorbedor. Se va a utilizar un flujo de vapor de 1.5 veces el mínimo. La temperatura va a ser constante a 122°C. Calcular los flujos mínimos y el número de etapas necesarias para este proceso.	Sto. en Liq ric (mol/s)	0.215756923	0.21591729	0.000160367	0.074%	0.216
	Sto. en Desorb (mol/s)	0	0	0	0.000%	0
	G _{N+1} (mol/s)	0.20674753	0.20690686	0.00015933	0.077%	0.216
	LG ₀ (mol/s)	0.009009392	0.009010434	1.04187E-06	0.012%	0
	(Vs)min (kmol/s)	15.3716	15.3159720	0.055591606	0.362%	
	(Vs)exp (kmol/s)	23.0573	22.9739590	0.083386409	0.362%	23.0573454
Etapas	6	6	0	0.000%	6	

Los resultados obtenidos por el software CHEMSEP se encuentran en: Apéndice XA (Problema 1), Apéndice XIA (Problema 2), Apéndice XIIA (Problema 3), Apéndice XIII A (Problema 4) , Apéndice XIVA (Problema 5) , Apéndice XVA (Problema 7) y Apéndice XVIA (Problema 8).

4.3.1. Análisis de error.

Análisis comparativo con respecto a software existente: Con respecto a los resultados obtenidos con el software desarrollado en el presente trabajo; y en comparación con un software existente (Para este caso CHEMSEP), se considera que los datos obtenidos son muy similares y con un bajo margen de error y acordes al proceso; es importante hacer hincapié que según el autor del software CHEMSEP (<http://www.chemsep.org/program/index.html>) y algunos trabajos de investigación en los que se utilizó dicho software (Yanza Quito, C. A. y Astudillo Zúñiga, J. I. (2018)); los resultados que brinda el software CHEMSEP tiene una confiabilidad del 95% y errores no mayores a 7% en comparación a procesos experimentales. En ese entender, los resultados del software desarrollado se encaminan de la misma manera.

Análisis comparativo de error estándar con los cálculos bibliográficos: Con respecto a los resultados de error relativo porcentual obtenidos en ejemplos de proceso de cálculo por medios bibliográficos y cálculo por el software desarrollado, se tiene 0.00% para etapas y en datos de flujo y dimensiones, se tiene un mínimo 0.019% y máximo de 3.379%; es por ello que se puede considerar un valor de $\pm 4\%$.

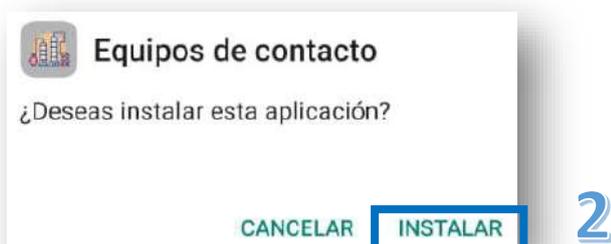
MANUAL DE USUARIO

Para el instalador en formato .apk el requisito es tener sistema operativo Android versión 7.0 o superiores; Para la instalación:

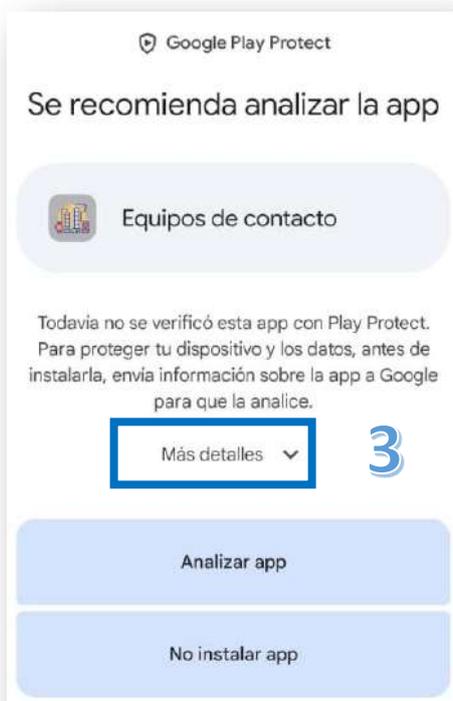
1. Copiar o descargar el archivo instalador “app-debug.apk” al dispositivo Android. (esto puede variar según la versión o configuración del dispositivo Android).



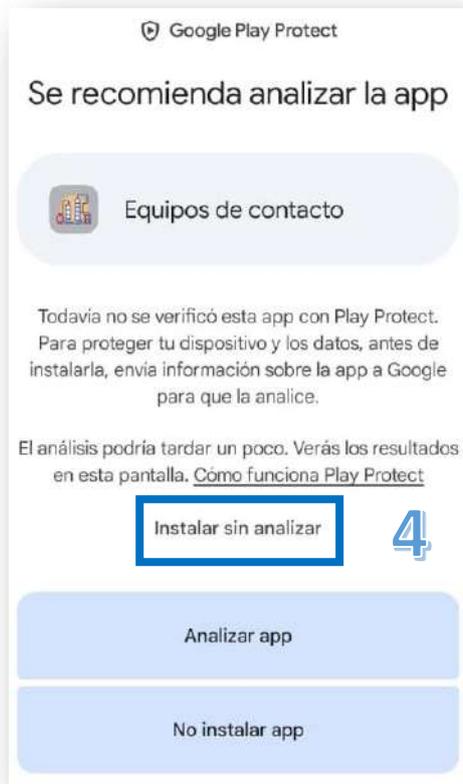
2. Seleccione el instalador y seleccione instalar.



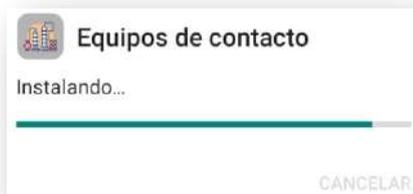
3. El dispositivo muestra un mensaje de seguridad y seleccionar “Mas detalles”.



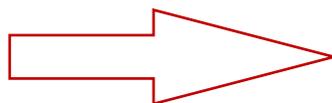
4. Seleccione “Instalas sin analizar”.



5. El dispositivo empieza la instalación y terminada la misma, se puede pulsar “Listo” o “Abrir”. Para poder entrar a la aplicación.



6. La aplicación fue instalada, y para abrirla, buscar el siguiente icono en el menú principal del dispositivo.



CONCLUSIONES

- Se desarrollo algoritmos de inteligencia artificial como KNN y Random Forest para automatizar el diseño teórico de columnas de absorción de mezclas diluidas utilizando el método McCabe-Thiele, mediante el desarrollo de un software adaptable para plataformas móviles.
- Se desarrollo algoritmos de inteligencia artificial KNN y Random Forest para automatizar el cálculo de las ecuaciones de balance de masa en el diseño de columnas de absorción y desorción utilizando el método McCabe-Thiele.
- Se implemento un procedimiento adecuado para desarrollar un software basado en Java llamado Dalvik dentro de la plataforma Android Studio 20.2.1. que aplico los algoritmos KNN y Random Forest en el diseño de columnas de absorción y desorción utilizando el método McCabe-Thiele.
- Se evaluó la precisión y efectividad del software desarrollado, mediante la comparación de sus resultados con datos de referencia y otros programas especializados en el diseño de columnas de absorción con un margen de error de 4% en comparación a resultados teóricos; haciendo una comparación a datos bibliográficos de cálculo en ingeniería para el diseño de una columna de absorción y desorción de mezclas diluidas por el método McCabe-Thiele. Cabe resaltar que el software desarrollado en el presente trabajo; en comparación a otros softwares especializados, es capaz de determinar el los valores de flujo mínimos para un proceso de absorción o desorción.
- Se concluyó el desarrollo de la aplicación con la exportación del archivo *.apk (Instalador).
- La Sistema Operativo Android cumple con los requisitos necesarios para el correcto funcionamiento que la aplicación necesita en la implementación de los algoritmos de inteligencia artificial.
- La aplicación es capaz de brindar resultados después de realizar cálculos de flujos de entrada y salida, flujos mínimos, número de etapas teóricas y dimensionamiento de columnas de absorción y desorción
- La aplicación está diseñada para ejecutarse en dispositivos móviles como Smarthphone y Tablet que dispongan de sistema operativo Android desde la versión 7.0 en adelante.

BIBLIOGRAFIA

- Cengel, Y. A. (University of Nevada, Reno) y Ghajar, A. J. (Oklahoma State University, Stillwater) (2015) *Heat and mass transfer – Fundamentals & Applications (5th. Ed.)*. Mc.Graw Hill, United States of America.
- García Hermida, E. (2018). *Diferencias divididas e interpolación oscilatoria*. Universidad de Santiago de Compostela – Escuela Matemáticas.
- Haan, A. B., Eral, B. y Schuur, B. (2020) *Industrial separation processes - fundamentals (2th. Ed.)*. Walter de Gruyter GmbH & Co KG.
- Henley, E. J. y Seader, J. D. (2000). *Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química (4th. Ed.)*. Reverté S.A.: (2000).
- Íñigo G., J., Barceló O., J. M., Cerdá A., Ll., Peig O., Abella i Fuentes, L. y Corral i Torruella, G. (2008). *Estructura de redes de computadores*. Editorial UOC – Carrera Edició S.L.
- Martínez de la Cuesta, P. J. y Rus Martínez, E. (2004). *Operaciones de separación en ingeniería química – Métodos de cálculo*. Pearson Educación, S.A., Madrid.
- McCabe, W. L., Smith, J. C. y Harriott, P. (1991). *Operaciones unitarias en ingeniería química (4th. Ed.)*. Mc.Graw Hill, Interamericana de España S.A.U.
- Ocon Garcia, J., Tojo Barreiro, G. (1970). *Problemas de ingeniería química*. Aguilar S.A. Ediciones.
- Ponce Gallegos, J. C., Torres Soto, A., Quezada Aguilera, F. S. y Silva Sprock, A. (2014). *Inteligencia artificial*. Editorial Alfa Europa.
- Rajaguru, H. y Kumar Prabhakar, S. (2017). *Knn classifier and k-means clustering for robust classification of epilepsy from eeg signals*. Anchor Academic Publishing.
- Rodriguez, L. (2022). *Algoritmos de machine learning*. Data Machine Learning Visualization.
- Seader, J. D., Henley, E. J. y Keith Roper, D. (2010). *Separation process principles – Chemical and biochemical operations (3th. Ed.)*. John Wiley & Sons, Inc.
- Seader, J. D., Henley, E. J. y Keith Roper, D. (2016). *Separation process principles – with Applications Using Process Simulators (4th. Ed.)*. John Wiley & Sons, Inc.
- Sidorov, G. (2011) *Métodos modernos de inteligencia artificial*. Mexico.
- Theodore, L. y Ricci, F. (2010). *Mass transfer operations for the practicing engineer*.

WILEY a John Wiley & son, INC.

Treybal, R. E. (1981). *Mass-transfer operations (3th. Ed.)*. Mc.Graw Hill Chemical Engineering Series – Book Company.

Vigueras Campuzano, A. (2016). *Cálculos numéricos para ingeniería*. Universidad Politécnica de Cartagena – Escuela superior de Ingeniería CRAI UPCT.

Wankat, P. C. (2012). *Separation process engineering – Includes mass transfer analysis (3th. Ed.)*. Pearson Education, Inc.

Woods, D. R. (2007). *Rules of Thumb in Engineering Practices*. WILEY-CVH Verlag GmbH & Co. KGaA.

PAGINAS WEB.

Android Studio. (16 de junio del 2023) Descripción general de herramientas, compilaciones y referencia relacionada.

<https://source.android.com/docs/setup/reference?hl=es-419>

AprendalA. (12 de junio del 2023) Sesgo y Varianza en Machine Learning.

<https://aprendeia.com/bias-y-varianza-en-machine-learning/>

IBM. (s.f.). (01 de junio del 2023) ¿Qué es un algoritmo KNN?

<https://www.ibm.com/topics/knn#Applications+of+k-NN+in+machine+learning>

Source. (04 de agosto del 2023) Android Open Source Project.

<https://source.android.com/?hl=es-419> – (Fecha de visita 04/08/2023).

Source Android Studio. (s.f.). (16 de agosto del 2023) Descripción general de la

arquitectura. <https://source.android.com/docs/core/architecture/hal?hl=es-419>

OTROS.

Agapito Francia, T. (1996) *Factores de conversión – Serie Ingeniería*. Isabel. Ediciones.

Convert measurement units. (2023-2024) Conversiones generales.

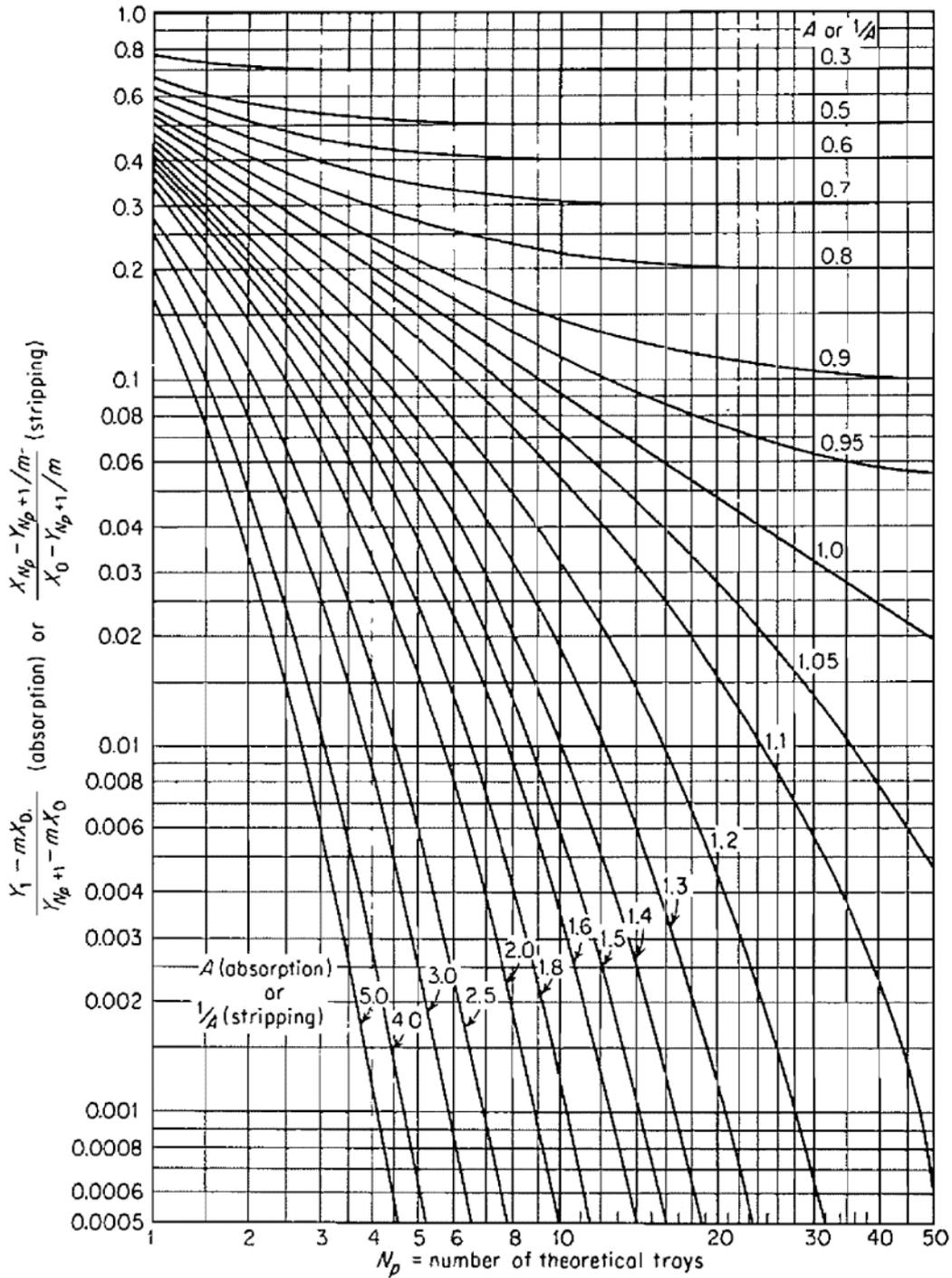
<https://www.convert-measurement-units.com/>

Yanza Quito, C. A. y Astudillo Zúñiga, J. I. (2018) *Aplicación del simulador CHEMSEP para la separación de la mezcla etanol-agua en la unidad de destilación discontinua del laboratorio tecnológico de la universidad de cuenca* [Tesis de pregrado, Universidad de Cuenca – Ecuador].

<https://dspace.ucuenca.edu.ec/bitstream/123456789/29318/1/Trabajo%20de%20titulaci%C3%B3n.pdf>

ANEXOS Y APÉNDICES

ANEXO I – Diagrama de determinación de número de etapas.



Número de etapas teóricas para cascadas a contracorriente, con el equilibrio de la Ley de Henry y factores de absorción o desorción constantes. [Por Hachmuth y Vance, *chem. Eng. Progr.*, 48, 523, 570, 617 (1952)].

(Fuente: (Treybal, R. E., 1981), pp. 142).

APENDICE IA - Subrutina para el cálculo de la determinación de Relación XY y grafico de Curva de equilibrio (Datos experimentales – Absorción).

```

public void calcularRelacionesXYAbsorcion (View v){
    if (rbmasa.isChecked()){
        float inerte =
Float.parseFloat(txtRCabsorbente.getText().toString());
        float pmi =
Float.parseFloat(txtPMabsorbente.getText().toString());
        float pmx =
Float.parseFloat(txtPMsoluta.getText().toString());
        float nx = Float.parseFloat(txtRCsoluta.getText().toString());
        float x1 = Float.parseFloat(txtc1.getText().toString());
        ...
        float x20 = Float.parseFloat(txtc20.getText().toString());
        //Hallamos la fraccion molar x
        dx1 = ((nx*x1)/pmx)/(((nx*x1)/pmx)+(inerte/pmi));
        ...
        dx20 = ((nx*x20)/pmx)/(((nx*x20)/pmx)+(inerte/pmi));
        //Hallamos el valor de y
        dy1 =
Float.parseFloat(txtpp1.getText().toString())/Float.parseFloat(txtPT.g
etText().toString());
        ...
        dy20 =
Float.parseFloat(txtpp20.getText().toString())/Float.parseFloat(txtPT.
getText().toString());
        //Hallamos la relacion X
        X1 = dx1/(1-dx1);
        ...
        X20 = dx20/(1-dx20);
        //Hallamos la relacion Y
        Y1 = dy1/(1-dy1);
        ...
        Y20 = dy20/(1-dy20);
        //Colocamos los resultados X y Y
        lblX1.setText(String.valueOf(X1));
        ...
        lblX20.setText(String.valueOf(X20));
        lblY1.setText(String.valueOf(Y1));
        ...
        lblY20.setText(String.valueOf(Y20));
    } else {
        if (rbvolumen.isChecked()){
            //Hallamos el volumen total
            float inerte =
Float.parseFloat(txtRCabsorbente.getText().toString());
            float nx =
Float.parseFloat(txtRCsoluta.getText().toString());
            float x1 = Float.parseFloat(txtc1.getText().toString());
            ...
            float x20 = Float.parseFloat(txtc20.getText().toString());
            //Hallamos la fraccion molar x
            dx1 = x1/((nx*x1)+inerte);
            ...
            dx20 = x20/((nx*x1)+inerte);
            //Hallamos el valor de y
            dy1 =
Float.parseFloat(txtpp1.getText().toString())/Float.parseFloat(txtPT.g
etText().toString());
            ...

```

```

        dy20 =
Float.parseFloat(txtpp20.getText().toString())/Float.parseFloat(txtPT.
getText().toString());
        //Hallamos la relacion X
        X1 = dx1/(1-dx1);
        ...
        X20 = dx20/(1-dx20);
        //Hallamos la relacion Y
        Y1 = dy1/(1-dy1);
        ...
        Y20 = dy20/(1-dy20);
        //Colocamos los resultados X y Y
        lblX1.setText(String.valueOf(X1));
        ...
        lblX20.setText(String.valueOf(X20));
        lblY1.setText(String.valueOf(Y1));
        ...
        lblY20.setText(String.valueOf(Y20));}}

```

APENDICE IIA - Subrutina para el cálculo de la determinación de Relación XY y grafico de Curva de equilibrio (Ley de Raoult o Ley de Henry – Absorción).

```

public void calcularRelacionesXYAbsorcion (View v){
    if (rbhenry.isChecked()){
        float amp =
Float.parseFloat(txtamplitud.getText().toString()*1000;
        float hen = Float.parseFloat(txthenry.getText().toString());
        //Hallamos la fraccion molar x & el valor de y
        dx1 = 0;
        dy1 = dx1*hen;
        lblc1.setText(String.valueOf(dx1));
        lblpp1.setText(String.valueOf(dy1));
        dx2 = (1*amp)/1000;
        dy2 = dx2*hen;
        lblc2.setText(String.valueOf(dx2));
        lblpp2.setText(String.valueOf(dy2));
        ...
        dx20 = (19*amp)/1000;
        dy20 = dx20*hen;
        lblc20.setText(String.valueOf(dx20));
        lblpp20.setText(String.valueOf(dy20));
        //Hallamos la relacion X
        X1 = dx1/(1-dx1);
        ...
        X20 = dx20/(1-dx20);
        //Hallamos la relacion Y
        Y1 = dy1/(1-dy1);
        ...
        Y20 = dy20/(1-dy20);
        //Colocamos los resultados X y Y
        lblX1.setText(String.valueOf(X1));
        ...
        lblX20.setText(String.valueOf(X20));
        lblY1.setText(String.valueOf(Y1));
        ...
        lblY20.setText(String.valueOf(Y20));
    } else {
        if (rbraoult.isChecked()){
            float amp =
Float.parseFloat(txtamplitud.getText().toString()*1000;
            float pt = Float.parseFloat(txtPT.getText().toString());
            float ten =
Float.parseFloat(txtraoult.getText().toString());
            float rao = ten/pt;
            //Hallamos la fraccion molar x & el valor de y
            dx1 = 0;
            dy1 = dx1*rao;
            lblc1.setText(String.valueOf(dx1));
            lblpp1.setText(String.valueOf(dy1));
            dx2 = (1*amp)/1000;
            dy2 = dx2*rao;
            lblc2.setText(String.valueOf(dx2));
            lblpp2.setText(String.valueOf(dy2));
            ...
            dx20 = (19*amp)/1000;
            dy20 = dx20*rao;
            lblc20.setText(String.valueOf(dx20));
            lblpp20.setText(String.valueOf(dy20));
            //Hallamos la relacion X
            X1 = dx1/(1-dx1);

```

```
...
X20 = dx20/(1-dx20);
//Hallamos la relacion Y
Y1 = dy1/(1-dy1);
...
Y20 = dy20/(1-dy20);
//Colocamos los resultados X y Y
lblX1.setText(String.valueOf(X1));
...
lblX20.setText(String.valueOf(X20));
lblY1.setText(String.valueOf(Y1));
...
lblY20.setText(String.valueOf(Y20));}}}
```

APENDICE IIIA - Subrutina para el cálculo de la determinación de Relación XY y grafico de Curva de equilibrio (Datos experimentales – Desorción).

```

public void calcularRelacionesXYDesorcion (View v){
    if (rbmasa.isChecked()){
        float inerte =
Float.parseFloat(txtRCdesorbente.getText().toString());
        float pmi =
Float.parseFloat(txtPMdesorbente.getText().toString());
        float pmx =
Float.parseFloat(txtPMsoluta.getText().toString());
        float nx = Float.parseFloat(txtRCsoluta.getText().toString());
        float x1 = Float.parseFloat(txtc1.getText().toString());
        ...
        float x20 = Float.parseFloat(txtc20.getText().toString());
        //Hallamos la fraccion molar x
        dx1 = ((nx*x1)/pmx)/(((nx*x1)/pmx)+(inerte/pmi));
        ...
        dx20 = ((nx*x20)/pmx)/(((nx*x20)/pmx)+(inerte/pmi));
        //Hallamos el valor de y
        dy1 =
Float.parseFloat(txtpp1.getText().toString())/Float.parseFloat(txtPT.g
etText().toString());
        ...
        dy20 =
Float.parseFloat(txtpp20.getText().toString())/Float.parseFloat(txtPT.
getText().toString());
        //Hallamos la relacion X
        X1 = dx1/(1-dx1);
        ...
        X20 = dx20/(1-dx20);
        //Hallamos la relacion Y
        Y1 = dy1/(1-dy1);
        ...
        Y20 = dy20/(1-dy20);
        //Colocamos los resultados X y Y
        lblX1.setText(String.valueOf(X1));
        ...
        lblX20.setText(String.valueOf(X20));
        lblY1.setText(String.valueOf(Y1));
        ...
        lblY20.setText(String.valueOf(Y20));
    } else {
        if (rbvolumen.isChecked()){
            //Hallamos el volumen total
            float inerte =
Float.parseFloat(txtRCdesorbente.getText().toString());
            float nx =
Float.parseFloat(txtRCsoluta.getText().toString());
            float x1 = Float.parseFloat(txtc1.getText().toString());
            ...
            float x20 = Float.parseFloat(txtc20.getText().toString());
            //Hallamos la fraccion molar x
            dx1 = x1/((nx*x1)+inerte);
            ...
            dx20 = x20/((nx*x1)+inerte);
            //Hallamos el valor de y
            dy1 =
Float.parseFloat(txtpp1.getText().toString())/Float.parseFloat(txtPT.g
etText().toString());
            ...

```

```

        dy20 =
Float.parseFloat(txtpp20.getText().toString())/Float.parseFloat(txtPT.
getText().toString());
        //Hallamos la relacion X
        X1 = dx1/(1-dx1);
        ...
        X20 = dx20/(1-dx20);
        //Hallamos la relacion Y
        Y1 = dy1/(1-dy1);
        ...
        Y20 = dy20/(1-dy20);
        //Colocamos los resultados X y Y
        lblX1.setText(String.valueOf(X1));
        ...
        lblX20.setText(String.valueOf(X20));
        lblY1.setText(String.valueOf(Y1));
        ...
        lblY20.setText(String.valueOf(Y20));}}

```

APENDICE IVA - Subrutina para el cálculo de la determinación de Relación XY y grafico de Curva de equilibrio (Ley de Raoult o Ley de Henry – Desorción).

```

public void calcularRelacionesXYDesorcion(View v) {
    if (rbhenry.isChecked()) {
        float amp =
Float.parseFloat(txtamplitud.getText().toString())*1000;
        float hen = Float.parseFloat(txthenry.getText().toString());
        //Hallamos la fraccion molar x & el valor de y
        dx1 = 0;
        dy1 = dx1*hen;
        lblc1.setText(String.valueOf(dx1));
        lblpp1.setText(String.valueOf(dy1));
        dx2 = (1*amp)/1000;
        dy2 = dx2*hen;
        lblc2.setText(String.valueOf(dx2));
        lblpp2.setText(String.valueOf(dy2));
        ...
        dx20 = (19*amp)/1000;
        dy20 = dx20*hen;
        lblc20.setText(String.valueOf(dx20));
        lblpp20.setText(String.valueOf(dy20));
        //Hallamos la relacion X
        X1 = dx1/(1-dx1);
        ...
        X20 = dx20/(1-dx20);
        //Hallamos la relacion Y
        Y1 = dy1/(1-dy1);
        ...
        Y20 = dy20/(1-dy20);
        //Colocamos los resultados X y Y
        lblX1.setText(String.valueOf(X1));
        ...
        lblX20.setText(String.valueOf(X20));
        lblY1.setText(String.valueOf(Y1));
        ...
        lblY20.setText(String.valueOf(Y20));
    } else {
        if (rbraoult.isChecked()) {
            float amp =
Float.parseFloat(txtamplitud.getText().toString())*1000;
            float pt = Float.parseFloat(txtPT.getText().toString());
            float ten =
Float.parseFloat(txttraoult.getText().toString());
            float rao = ten/pt;
            //Hallamos la fraccion molar x & el valor de y
            dx1 = 0;
            dy1 = dx1*rao;
            lblc1.setText(String.valueOf(dx1));
            lblpp1.setText(String.valueOf(dy1));
            dx2 = (1*amp)/1000;
            dy2 = dx2*rao;
            lblc2.setText(String.valueOf(dx2));
            lblpp2.setText(String.valueOf(dy2));
            ...
            dx20 = (19*amp)/1000;
            dy20 = dx20*rao;
            lblc20.setText(String.valueOf(dx20));
            lblpp20.setText(String.valueOf(dy20));
            //Hallamos la relacion X
            X1 = dx1/(1-dx1);

```

```
...
X20 = dx20/(1-dx20);
//Hallamos la relacion Y
Y1 = dy1/(1-dy1);
...
Y20 = dy20/(1-dy20);
//Colocamos los resultados X y Y
lblX1.setText(String.valueOf(X1));
...
lblX20.setText(String.valueOf(X20));
lblY1.setText(String.valueOf(Y1));
...
lblY20.setText(String.valueOf(Y20));}}}
```

APENDICE VA - Subrutina para el cálculo de algoritmos de inteligencia artificial para curva tendencia y ecuación de curva de tendencia. (Datos experimentales para Absorción y Desorción).

```

public void pruebasIA(View v) {
    //Curva de equilibrio
    float[] dX= new
float[] {X1, X2, X3, X4, X5, X6, X7, X8, X9, X10, X11, X12, X13, X14, X15, X16, X17, X18
, X19, X20};
    float[] dY= new
float[] {Y1, Y2, Y3, Y4, Y5, Y6, Y7, Y8, Y9, Y10, Y11, Y12, Y13, Y14, Y15, Y16, Y17, Y18
, Y19, Y20};
    float tope = Float.parseFloat(txtX1.getText().toString());
    float limite=0;
    for(int i = 0; i<dY.length;i++){
        if (dX[i]!=0){
            if (dX[i]>0 && dX[i]<tope){
                limite = i+2;}}
    float iax1 = 0;
    float iax2 = 0;
    float iax3 = 0;
    float iay1 = 0;
    float iay2 = 0;
    float iay3 = 0;
    Toast.makeText(getApplicationContext(), "Los datos graficados
son:"+ limite, Toast.LENGTH_LONG).show();
    if (limite==0){
        Toast.makeText(getApplicationContext(), "Ingresa los datos y
calcula las relaciones XY", Toast.LENGTH_LONG).show();
    } else {
        if (limite==1){
            iax1 = Float.parseFloat(lblX1.getText().toString());
            iax2 = Float.parseFloat(lblX2.getText().toString());
            iax3 = Float.parseFloat(lblX3.getText().toString());
            iay1 = Float.parseFloat(lblY1.getText().toString());
            iay2 = Float.parseFloat(lblY2.getText().toString());
            iay3 = Float.parseFloat(lblY3.getText().toString());
        } else {
            ...
        if (limite==20){
            iax1 = Float.parseFloat(lblX1.getText().toString());
            iax2 = Float.parseFloat(lblX10.getText().toString());
            iax3 = Float.parseFloat(lblX20.getText().toString());
            iay1 = Float.parseFloat(lblY1.getText().toString());
            iay2 = Float.parseFloat(lblY10.getText().toString());
            iay3 = Float.parseFloat(lblY20.getText().toString());
        //Pruebas de IA
            float m1 = (iay2-iay1)/(iax2-iax1);
            float m2 = (iay3-iay1)/(iax3-iax1);
            if (m2<=m1){
                cbReajusteTendencia.setChecked(false);
            } else {
                cbReajusteTendencia.setChecked(true);}}
public void calculoTendenciaXY(View v) {
    if (lblX1.getText().toString().isEmpty()){
        lblX1.setText("0");}
    if (lblX2.getText().toString().isEmpty()){
        lblX2.setText("0");}
    if (lblX3.getText().toString().isEmpty()){
        lblX3.setText("0");}
}

```



```

lblEcb.setText(String.valueOf(b));
c = ca0 - (ca1*cx0) + (ca2*cx0*cx1);
lblEcc.setText(String.valueOf(c));
float X2 = Float.parseFloat(txtX2.getText().toString());
float Y2 = Float.parseFloat(txtY2.getText().toString());
float v1 = (X2 * X2) + ((b * X2) + c - Y2) / a;
float X01 = (float) (X2 + (Math.sqrt(v1)));
float X02 = (float) (X2 - (Math.sqrt(v1)));
float X0;
if (X01 > 0) {X0 = X01;} else {X0 = X02;}
float Y0 = (a*X0*X0) + (b*X0) + c;
lblX0.setText(String.valueOf(X0));
lblY0.setText(String.valueOf(Y0));
float m0 = (Y0 - Y2) / (X0 - X2);
float b0 = Y2 - (m0*X2);
X = 0;
float xa = Float.parseFloat(txtX1.getText().toString());
if (xa < 0 ) {
    Toast.makeText(getApplicationContext(), "La fraccion molar
debe ser positiva", Toast.LENGTH_LONG).show();
}else{
    if (xa == 0 ) {
        Toast.makeText(getApplicationContext(), "¿Esta seguro que
el proceso es de desorción?", Toast.LENGTH_LONG).show();
    }else{X = xa;}}
float Y = (m0*X) + b0;
txtY1.setText(String.valueOf(Y));
float y = Y / (1 + Y);
txty1.setText(String.valueOf(y));
txtRLsGsMax.setText("");}

public class graficas extends AppCompatActivity {
    private CombinedChart cChart;
    private float
X1, X2, X3, X4, X5, X6, X7, X8, X9, X10, X11, X12, X13, X14, X15, X16, X17, X18, X19, X20
, Y1, Y2, Y3, Y4, Y5, Y6, Y7, Y8, Y9, Y10, Y11, Y12, Y13, Y14, Y15, Y16, Y17, Y18, Y19, Y2
0;
    private float mX1, mX2, mY1, mY2, eca, ecb, ecc, lim;
    private int vtipo;
    public static float cont, contAnt, limX, Ecy;
    public static int ic, icAnt;
    @Override
    protected void onCreate(Bundle savedInstanceState) {
        super.onCreate(savedInstanceState);
        setContentView(R.layout.activity_graficas);
        TextView lblRec;
        lblRec = (TextView) findViewById(R.id.lblRec);
        //Recibimos los datos para graficar
        String rX1 = getIntent().getStringExtra("keyX1");
        ...
        String rX20 = getIntent().getStringExtra("keyX20");
        String rY1 = getIntent().getStringExtra("keyY1");
        ...
        String rY20 = getIntent().getStringExtra("keyY20");
        String minX1 = getIntent().getStringExtra("minX1");
        String minX2 = getIntent().getStringExtra("minX2");
        String minY1 = getIntent().getStringExtra("minY1");
        String minY2 = getIntent().getStringExtra("minY2");
        String Vtipo = getIntent().getStringExtra("Vtipo");
        X1 = Float.parseFloat(rX1);
        ...

```

```

X20 = Float.parseFloat(rX20);
Y1 = Float.parseFloat(rY1);
...
Y20 = Float.parseFloat(rY20);
//Puntos para LoMin
mX1 = Float.parseFloat(minX1);
mX2 = Float.parseFloat(minX2);
mY1 = Float.parseFloat(minY1);
mY2 = Float.parseFloat(minY2);
//Datos de la ecuacion
eca = Float.parseFloat(Eca);
ecb = Float.parseFloat(Ecb);
ecc = Float.parseFloat(Ecc);
ecd = Float.parseFloat(Ecd);
ece = Float.parseFloat(Ece);
ecf = Float.parseFloat(Ecf);
//Tipo de proceso
vtipo = Integer.parseInt(Vtipo);
lblRec.setText("Los datos recuperados son: "+X1+" , "+X2+" ,
"+X3+" , "+X4+" , "+X5+" , "+X6+" , "+X7+" , "+X8+" , "+X9+" , "+X10
      +", "+X11+" , "+X12+" , "+X13+" , "+X14+" , "+X15+" ,
"+X16+" , "+X17+" , "+X18+" , "+X19+" , "+X20
      +", "+Y1+" , "+Y2+" , "+Y3+" , "+Y4+" , "+Y5+" ,
"+Y6+" , "+Y7+" , "+Y8+" , "+Y9+" , "+Y10
      +", "+Y11+" , "+Y12+" , "+Y13+" , "+Y14+" , "+Y15+" ,
"+Y16+" , "+Y17+" , "+Y18+" , "+Y19+" , "+Y20
      +", "+mX1+" , "+mY1+" , "+mX2+" , "+mY2+" , "+Eca+" ,
"+Ecb+" , "+Ecc+" , "+Vtipo);
//Declaramos el combinechart
cChart = (CombinedChart) findViewById(R.id.combChart);
//Grafico combinado
// draw bars behind lines
cChart.setDrawOrder(new CombinedChart.DrawOrder[]{
    CombinedChart.DrawOrder.LINE,
    CombinedChart.DrawOrder.SCATTER});
Legend l = cChart.getLegend();
l.setWordWrapEnabled(true);
l.setVerticalAlignment(Legend.LegendVerticalAlignment.BOTTOM);
l.setHorizontalAlignment(Legend.LegendHorizontalAlignment.CENTER);
l.setOrientation(Legend.LegendOrientation.HORIZONTAL);
l.setDrawInside(false);
CombinedData cdata = new CombinedData();
cdata.setData(generateLineData());
cdata.setData(generateScatterData());
cChart.setData(cdata);
cChart.invalidate();
cChart.animateXY(5000, 5000);}

private LineData generateLineData(){
float[]dX= new
float[]{X1,X2,X3,X4,X5,X6,X7,X8,X9,X10,X11,X12,X13,X14,X15,X16,X17,X18
,X19,X20};
float[]dY= new
float[]{Y1,Y2,Y3,Y4,Y5,Y6,Y7,Y8,Y9,Y10,Y11,Y12,Y13,Y14,Y15,Y16,Y17,Y18
,Y19,Y20};
lim = mY2+(mY2/4);
ArrayList<Entry> cEntries = new ArrayList<>();
cEntries.add(new Entry(X1, Y1, 0));
for(int i = 1; i<dX.length;i++){
    if (dY[i]!=0){
        if (dY[i]>0 && dY[i]<lim){

```

```

        cEntries.add(new Entry(dX[i], dY[i], i-1));}}
LineDataSet cset = new LineDataSet(cEntries, "Curva de equilibrio");
cset.setColor(Color.WHITE);
cset.setColor(Color.rgb(240, 238, 70));
cset.setLineWidth(1f);
cset.setCircleColor(Color.BLUE);
cset.setCircleRadius(1f);
cset.setFillColor(Color.BLUE);
cset.setMode(LineDataSet.Mode.CUBIC_BEZIER); // para que sea curva?
cset.setDrawValues(true);
cset.setValueTextSize(10f);
cset.setValueTextColor(Color.BLACK);
    //Determinamos el valor de la base
    float k = 0;
    if(X2*1>=1){
        k = 1;
        Toast.makeText(getApplicationContext(), "El valor de k es:
"+ k, Toast.LENGTH_LONG).show();
    } else {
        if(X2*10>=1){
            k = 10;
            Toast.makeText(getApplicationContext(), "El valor de k
es: "+ k, Toast.LENGTH_LONG).show();
        } else {
            if(X2*100>=1){
                k = 100;
                Toast.makeText(getApplicationContext(), "El valor
de k es: "+ k, Toast.LENGTH_LONG).show();
            } else {
                if(X2*1000>=1){
                    k = 1000;
                    Toast.makeText(getApplicationContext(), "El
valor de k es: "+ k, Toast.LENGTH_LONG).show();
                } else {
                    if(X2*10000>=1){
                        k = 10000;
                        Toast.makeText(getApplicationContext(),
"El valor de k es: "+ k, Toast.LENGTH_LONG).show();
                    } else {if(X2*100000>=1){
                        k = 100000;
                        Toast.makeText(getApplicationContext(),
"El valor de k es: "+ k, Toast.LENGTH_LONG).show();
                    } else {if(X2*1000000>=1){k = 1000000;
                        Toast.makeText(getApplicationContext(), "El valor de k es: "+ k,
Toast.LENGTH_LONG).show();} else {if(X2*10000000>=1){k = 10000000;
                        Toast.makeText(getApplicationContext(), "El valor de k es: "+ k,
Toast.LENGTH_LONG).show();} else {if(X2*100000000>=1){k = 100000000;
                        Toast.makeText(getApplicationContext(), "El valor de k es: "+ k,
Toast.LENGTH_LONG).show();}}}}}}}}}}
    //Curva de equilibrio en funcion de la ecuacion
    ArrayList<Entry> ecEntries = new ArrayList<>();
    ecEntries.add(new Entry(X1, Y1, 0));
    if (vtipo ==1){
        float ic = 0;
        float maxEc = (float) (mY2*(1.1));
        float nic = 0;
        for(int i = 0; nic<=maxEc;i++){
            ic = X1+(i/k);
            nic = f(ic);
            ecEntries.add(new Entry(ic, f(ic), i+1));
        }
        Toast.makeText(getApplicationContext(), "Curva de
equilibrio Absorción", Toast.LENGTH_LONG).show();

```

```

} else {if (vtipo ==2){
    float ic = 0;
    float maxEc = (float) (mX1*(1.1));
    float nic = 0;
    for(int i = 0; nic<=maxEc;i++){
        ic = X1+(i/k);
        nic = ic;
        ecEntries.add(new Entry(ic, f(ic), i+1));}
    Toast.makeText(getApplicationContext(), "Curva de
equilibrio Desorción", Toast.LENGTH_LONG).show();}
float ic = 0;
//limX = mX2*12;
float maxEc = (float) (mY2*(1.1));
float nic = 0;
for(int i = 0; nic<=maxEc;i++){
    ic = X1+(i/b);
    nic = f(ic);
    ecEntries.add(new Entry(ic, f(ic), i+1));}
LineDataSet setEc = new LineDataSet(ecEntries, "Tendencia de
curva de equilibrio");
setEc.setColor(Color.RED);
setEc.setLineWidth(2.5f);
setEc.setCircleRadius(1f);
setEc.setFill(Color.BLUE);
setEc.setMode(LineDataSet.Mode.CUBIC_BEZIER);
setEc.setDrawValues(false);
setEc.setValueTextSize(10f);
setEc.setValueTextColor(Color.BLACK);
//Limite de grafico (Superior o derecho)
ArrayList<Entry> Llimite = new ArrayList<>();
if (vtipo ==1){
    float topesup = mX2+(mX2/6);
    Llimite.add(new Entry(0, mY2, 0));
    Llimite.add(new Entry(topesup, mY2, 1));
    Toast.makeText(getApplicationContext(), "Limite
Absorción", Toast.LENGTH_LONG).show();
} else {if (vtipo ==2){
    float li = f(mX1);
    float topeder = li+(li/6);
    Llimite.add(new Entry(mX1, 0, 0));
    Llimite.add(new Entry(mX1, topeder, 1));
    Toast.makeText(getApplicationContext(), "Limite
Desorción", Toast.LENGTH_LONG).show();}
LineDataSet setLim = new LineDataSet(Llimite, "Limite");
setLim.setLineWidth(2.5f);
setLim.setCircleRadius(4.5f);
setLim.setHighLightColor(Color.GRAY);
setLim.setDrawValues(false);
//Limite superior para grafico
ArrayList<Entry> LimSup = new ArrayList<>();
float topesup = mX2+(mX2/6);
LimSup.add(new Entry(0, mY2, 0));
LimSup.add(new Entry(topesup, mY2, 1));
LineDataSet setLimsup = new LineDataSet(LimSup, "Limite");
setLimsup.setLineWidth(2.5f);
setLimsup.setCircleRadius(4.5f);
setLimsup.setHighLightColor(Color.GRAY);
setLimsup.setDrawValues(false);
//Limite derecho para grafico
ArrayList<Entry> LimDer = new ArrayList<>();
float li = f(mX1);

```

```

float topeder = li+(li/6);
LimDer.add(new Entry(mX1, 0, 0));
LimDer.add(new Entry(mX1, topeder, 1));
LineDataSet setLimder = new LineDataSet(LimDer, "Limite");
setLimder.setLineWidth(2.5f);
setLimder.setCircleRadius(4.5f);
setLimder.setHighLightColor(Color.GRAY);
setLimder.setDrawValues(false);
//linea de operacion
ArrayList<Entry> cEntries2 = new ArrayList<>();
cEntries2.add(new Entry(mX1, mY1,0));
cEntries2.add(new Entry(mX2, mY2,1));
LineDataSet d2 = new LineDataSet(cEntries2, "Lo - min");
d2.setColor(Color.GREEN);
d2.setLineWidth(2.5f);
d2.setCircleRadius(4.5f);
d2.setHighLightColor(Color.rgb(244, 117, 117));
d2.setDrawValues(true);
d2.setValueTextSize(10f);
d2.setValueTextColor(Color.BLUE);
ArrayList<ILineDataSet> sets = new ArrayList<>(); //
//sets.add(cset); //Curva de equilibrio
//sets.add(setLimsup); //limite superior
//sets.add(setLimder); //limite derecho
sets.add(setLim);
sets.add(d2); //Lo
sets.add(setEc); //Linea de ec.
return new LineData(sets); }
private ScatterData generateScatterData(){
ScatterData d = new ScatterData();
float[]dX= new
float[] {X1,X2,X3,X4,X5,X6,X7,X8,X9,X10,X11,X12,X13,X14,X15,X16,X17,X18
,X19,X20};
float[]dY= new
float[] {Y1,Y2,Y3,Y4,Y5,Y6,Y7,Y8,Y9,Y10,Y11,Y12,Y13,Y14,Y15,Y16,Y17,Y18
,Y19,Y20};
ArrayList<Entry> sEntries = new ArrayList<>();
if (vtipo ==1){
float maxY = (float) (mY2*(1.1));
sEntries.add(new Entry(X1, Y1, 0));
for(int i = 1; i<dX.length;i++){
if (dY[i]!=0){
if (dY[i]>0 && dY[i]<maxY){
sEntries.add(new Entry(dX[i], dY[i], i-1));}}}
Toast.makeText(getApplicationContext(), "Limite Absorción
- Datos", Toast.LENGTH_LONG).show();
} else {if (vtipo ==2){
float maxX = (float) (mX1*(1.1));
sEntries.add(new Entry(X1, Y1, 0));
for(int i = 1; i<dX.length;i++){
if (dX[i]!=0){
if (dX[i]>0 && dX[i]<maxX){
sEntries.add(new Entry(dX[i], dY[i], i-1));}}}
Toast.makeText(getApplicationContext(), "Limite
Desorción - Datos", Toast.LENGTH_LONG).show();}}
lim = mY2+(mY2/4);
sEntries.add(new Entry(X1, Y1, 0));
for(int i = 1; i<dX.length;i++){
if (dY[i]!=0){
if (dY[i]>0 && dY[i]<lim){
sEntries.add(new Entry(dX[i], dY[i], i-1));}}}

```

```

ArrayList<Entry> sEntries = new ArrayList<>();
sEntries.add(new Entry(5/8,1/2));
sEntries.add(new Entry(1/3,1/3));
sEntries.add(new Entry(1/2,1/4));
ScatterDataSet sSet =new ScatterDataSet(sEntries,"Curva de
equilibrio (Datos)");
sSet.setColors(ColorTemplate.MATERIAL_COLORS);
sSet.setScatterShapeSize(7.5f);
sSet.setDrawValues(true);
sSet.setValueTextSize(10f);
d.addDataSet(sSet);
return d;}
public float f(float x){
//Ecuacion de la tendencia
float Ec3 = (float) (eca*(Math.pow(x, 2))) + (ecb*x) + ecc;
return Ec3;
//Ecuacion de la tendencia
float Ec4 = (float) (eca*(Math.pow(x, 3))) + (ecb*(Math.pow(x,
2)) + (ecc*x) + ecd;
return Ec4;
//Ecuacion de la tendencia
float Ec5 = (float) (eca*(Math.pow(x, 4))) + (ecb*(Math.pow(x,
3)) + (ecc*(Math.pow(x, 2)) + (ecd*x) + ece;}}

```

**APENDICE VIA - Subrutina para el cálculo de algoritmos de inteligencia artificial
para gráfico y determinación de valores mínimos – Random Forest. (Para
Absorción y Desorción).**

```

public void limite1(View v) {
float cx0, cx1, cx2, fx0, fx1, fx2, fx0x1, fx1x2, fx0x1x2, a, b, c, Y, ca0, ca1, ca2;
cx0 = Float.parseFloat(lblX1.getText().toString());
cx1 = Float.parseFloat(lblX2.getText().toString());
cx2 = Float.parseFloat(lblX3.getText().toString());
fx0 = Float.parseFloat(lblY1.getText().toString());
fx1 = Float.parseFloat(lblY2.getText().toString());
fx2 = Float.parseFloat(lblY3.getText().toString());
fx0x1 = (fx1-fx0)/(cx1-cx0); fx1x2 = (fx2-fx1)/(cx2-cx1);
fx0x1x2 = (fx1x2-fx0x1)/(cx2-cx0);
ca0 = fx0; ca1 = fx0x1; ca2 = fx0x1x2; a = ca2;
lblca.setText(String.valueOf(a)); b = ca1-(ca2*cx1)-(ca2*cx0);
lblcb.setText(String.valueOf(b)); c = ca0-(ca1*cx0)+(ca2*cx0*cx1);
lblcc.setText(String.valueOf(c)); Y = 0;
float Ya = Float.parseFloat(txtY2.getText().toString());
if (Ya < 0 ) {
Toast.makeText(getApplicationContext(), "La fraccion molar
debe ser positiva", Toast.LENGTH_LONG).show();
}else{if (Ya == 0 ) {
Toast.makeText(getApplicationContext(), "¿Esta seguro que
el proceso es de absorción?", Toast.LENGTH_LONG).show();
}else{Y = Ya;}}
float part1 = (float) ((-a*c)+(a*Y)+(0.25*b*b));
float part2 = (float) ((-b)/(2*a));
float part3 = (float) (a*a);
float part4 = (float) (Math.sqrt(part1/part3));
float part5a = (float) (part2-part4);
float part5b = (float) (part2+part4);
float X = 0;
if (cbRecalculoX.isChecked()){X = part5b;} else {X = part5a;}
txtX2.setText(String.valueOf(X));
float x = X/(1+X);
txtx2.setText(String.valueOf(x));
txtRLsGsMin.setText("");}
float cx0, cx1, cx2, fx0, fx1, fx2, fx0x1, fx1x2, fx0x1x2, a, b, c, X, ca0, ca1, ca2;
cx0 = Float.parseFloat(lblX1.getText().toString());
cx1 = Float.parseFloat(lblX2.getText().toString());
cx2 = Float.parseFloat(lblX3.getText().toString());
fx0 = Float.parseFloat(lblY1.getText().toString());
fx1 = Float.parseFloat(lblY2.getText().toString());
fx2 = Float.parseFloat(lblY3.getText().toString());
fx0x1 = (fx1-fx0)/(cx1-cx0);
fx1x2 = (fx2-fx1)/(cx2-cx1);
fx0x1x2 = (fx1x2-fx0x1)/(cx2-cx0);
ca0 = fx0; ca1 = fx0x1; ca2 = fx0x1x2; a = ca2;
lblEca.setText(String.valueOf(a));
b = ca1-(ca2*cx1)-(ca2*cx0);
lblEcb.setText(String.valueOf(b));
c = ca0-(ca1*cx0)+(ca2*cx0*cx1);
lblEcc.setText(String.valueOf(c)); X = 0;
float Xa = Float.parseFloat(txtX2.getText().toString());
if (Xa < 0 ) {
Toast.makeText(getApplicationContext(), "La fraccion molar debe
ser positiva", Toast.LENGTH_LONG).show();
}else{if (Xa == 0 ) {
Toast.makeText(getApplicationContext(), "¿Esta seguro que el

```

```

proceso es de absorción?", Toast.LENGTH_LONG).show();
    }else{X = Xa;}}
float Y = ((a*X*X)+(b*X)+c);
txtY2.setText(String.valueOf(Y));
float y = Y/(1+Y);
txty2.setText(String.valueOf(y));
txtRLsGsMin.setText("");
float cx0,cx1,cx2,fx0,fx1,fx2,fx0x1,fx1x2,fx0x1x2,a,b,c,Y,ca0,ca1,ca2;
cx0 = Float.parseFloat(lblX1.getText().toString());
cx1 = Float.parseFloat(lblX2.getText().toString());
cx2 = Float.parseFloat(lblX3.getText().toString());
fx0 = Float.parseFloat(lblY1.getText().toString());
fx1 = Float.parseFloat(lblY2.getText().toString());
fx2 = Float.parseFloat(lblY3.getText().toString());
fx0x1 = (fx1-fx0)/(cx1-cx0);
fx1x2 = (fx2-fx1)/(cx2-cx1);
fx0x1x2 = (fx1x2-fx0x1)/(cx2-cx0);
ca0 = fx0;ca1 = fx0x1;ca2 = fx0x1x2;a = ca2;
lblEca.setText(String.valueOf(a));
b = ca1-(ca2*cx1)-(ca2*cx0);
lblEcb.setText(String.valueOf(b));
c = ca0-(ca1*cx0)+(ca2*cx0*cx1);
lblEcc.setText(String.valueOf(c));
float X1 = Float.parseFloat(txtX1.getText().toString());
float Y1 = Float.parseFloat(txtY1.getText().toString());
float v1 = (X1 * X1) + ((b * X1) + c - Y1) / a);
float X01 = (float) (X1+(Math.sqrt(v1)));
float X02 = (float) (X1-(Math.sqrt(v1)));
float X0;
if (X01>0){X0 = X01;} else {X0 = X02;}
float Y0 = (a*X0*X0)+(b*X0)+c;
lblX0.setText(String.valueOf(X0));
lblY0.setText(String.valueOf(Y0));
float m0 = (Y0-Y1)/(X0-X1);
float b0 = Y1-(m0*X1);
Y = 0;
float Ya = Float.parseFloat(txtY2.getText().toString());
if (Ya < 0 ) {
    Toast.makeText(getApplicationContext(), "La fraccion molar debe
ser positiva", Toast.LENGTH_LONG).show();
}else{if (Ya == 0 ){
    Toast.makeText(getApplicationContext(), "¿Esta seguro que el
proceso es de absorción?", Toast.LENGTH_LONG).show();
    }else{Y = Ya;}}
float X = (Y-b0)/m0;
txtX2.setText(String.valueOf(X));
float x = X/(1+X);
txtx2.setText(String.valueOf(x));
txtRLsGsMin.setText("");

public void calculoMinimosCuadro(View v){
    //Condicionamos el calculo de los valores minimos
    if (rbconcentrado.isChecked()){if (rby1.isChecked()){
        //Recuperamos los datos
float porsol = loat.parseFloat(txtporsoluto.getText().toString())/100;
txty2.setText(String.valueOf(porsol));
float porabs =
Float.parseFloat(txtporabsorbente.getText().toString())/100;
txtx1.setText(String.valueOf(porabs));
float congas = Float.parseFloat(txttrby1.getText().toString())/100;
txty1.setText(String.valueOf(congas));

```

```

        if (txtx2.getText().toString().isEmpty()){
            txtx2.setText("0");
        }
        float cx1 = Float.parseFloat(txtx1.getText().toString());
        float cx2 = Float.parseFloat(txtx2.getText().toString());
        float cy1 = Float.parseFloat(txy1.getText().toString());
        float cy2 = Float.parseFloat(txy2.getText().toString());
        float sum = cx1+cx2+cy1+cy2;
        if (sum==0){
            Toast.makeText(getApplicationContext(), "Debe ingresar
las fracciones molares como dato", Toast.LENGTH_LONG).show();
            float cX1 = cx1/(1-cx1);
            float cX2 = cx2/(1-cx2);
            float cY1 = cy1/(1-cy1);
            float cY2 = cy2/(1-cy2);
            txtX1.setText(String.valueOf(cX1));
            txtY1.setText(String.valueOf(cY1));
            txtX2.setText(String.valueOf(cX2));
            txtY2.setText(String.valueOf(cY2));
        } else {if (rbx2.isChecked()){
            //Recuperamos los datos
            float porsol =
            Float.parseFloat(txtporsoluto.getText().toString())/100;
            txy2.setText(String.valueOf(porsol));
            float porabs =
            Float.parseFloat(txtporabsorbente.getText().toString())/100;
            txtx1.setText(String.valueOf(porabs));
            float conliq =
            Float.parseFloat(txttrbx2.getText().toString())/100;
            txtx2.setText(String.valueOf(conliq));
            if (txty1.getText().toString().isEmpty()){
                txy1.setText("0");
            }
            float cx1 =
            Float.parseFloat(txtx1.getText().toString());
            float cx2 =
            Float.parseFloat(txtx2.getText().toString());
            float cy1 =
            Float.parseFloat(txy1.getText().toString());
            float cy2 =
            Float.parseFloat(txy2.getText().toString());
            float sum = cx1+cx2+cy1+cy2;
            if (sum==0){
                Toast.makeText(getApplicationContext(), "Debe ingresar las fracciones
molares como dato", Toast.LENGTH_LONG).show();
                float cX1 = cx1/(1-cx1);
                float cX2 = cx2/(1-cx2);
                float cY1 = cy1/(1-cy1);
                float cY2 = cy2/(1-cy2);
                txtX1.setText(String.valueOf(cX1));
                txtY1.setText(String.valueOf(cY1));
                txtX2.setText(String.valueOf(cX2));
                txtY2.setText(String.valueOf(cY2));}}}
        if (rbrecuperado.isChecked()){
            if (rbY1R.isChecked()){
                //Recuperamos los datos
                float porsol =
                Float.parseFloat(txtporsoluto.getText().toString())/100;
                txy2.setText(String.valueOf(porsol));
                float porabs =
                Float.parseFloat(txtporabsorbente.getText().toString())/100;
                txtx1.setText(String.valueOf(porabs));
                if (txtx2.getText().toString().isEmpty()){

```

```

        txtx2.setText("0");}
float cx1 = Float.parseFloat(txtx1.getText().toString());
float cy2 = Float.parseFloat(ttxy2.getText().toString());
float cx2 = Float.parseFloat(ttxx2.getText().toString());
float sum = cx1+cy2;
if (sum==0){Toast.makeText(getApplicationContext(), "Debe
ingresar las fracciones molares como dato", Toast.LENGTH_LONG).show();
float cX1 = cx1/(1-cx1);
float cY2 = cy2/(1-cy2);
float cX2 = cx2/(1-cx2);
float recliq =
float.parseFloat(ttxtrbry1.getText().toString())/100;
float cY1 = cY2*(1-recliq);
float cy1 = cY1/(1+cY1);
ttxy1.setText(String.valueOf(cy1));
ttxX1.setText(String.valueOf(cX1));
ttxY1.setText(String.valueOf(cY1));
ttxX2.setText(String.valueOf(cX2));
ttxY2.setText(String.valueOf(cY2));
} else {if (rbX2R.isChecked()){
//Recuperamos los datos
float porsol =
float.parseFloat(ttxtporsoluto.getText().toString())/100;
ttxy2.setText(String.valueOf(porsol));
float porabs =
float.parseFloat(ttxtporabsorbente.getText().toString())/100;
ttxx1.setText(String.valueOf(porabs));
if (ttxy1.getText().toString().isEmpty()){ttxy1.setText("0");}
float cx1 = Float.parseFloat(ttxx1.getText().toString());
float cy2 = Float.parseFloat(ttxy2.getText().toString());
float cy1 = Float.parseFloat(ttxy1.getText().toString());
float sum = cx1+cy2;
if (sum==0){Toast.makeText(getApplicationContext(), "Debe ingresar las
fracciones molares como dato", Toast.LENGTH_LONG).show();
float cX1 = cx1/(1-cx1);
float cY2 = cy2/(1-cy2);
float cY1 = cy1/(1-cy1);
float recgas =
float.parseFloat(ttxtrbrx2.getText().toString())/100;
float cX2 = cY2*(1-recgas);
float cx2 = cX2/(1+cX2);
ttxx2.setText(String.valueOf(cx2));
ttxX1.setText(String.valueOf(cX1));
ttxY1.setText(String.valueOf(cY1));
ttxX2.setText(String.valueOf(cX2));
ttxY2.setText(String.valueOf(cY2));}}}}

```

**APENDICE VIIA - Subrutina para el cálculo de algoritmos de inteligencia artificial
para determinación de número de etapas. (Absorción y Desorción).**

```

public void calcuetapas(View v){
    //Datos de la linea de operación
    float cX1 = Float.parseFloat(lblX1.getText().toString());
    float cY1 = Float.parseFloat(lblY1.getText().toString());
    float mX1 = Float.parseFloat(txtX1.getText().toString());
    float mY1 = Float.parseFloat(txtY1.getText().toString());
    float mX2 = Float.parseFloat(txtX2.getText().toString());
    float mY2 = Float.parseFloat(txtY2.getText().toString());
    float m = (mY2-mY1)/(mX2-mX1); //Pendiente
    float ib = mY1-m*mX1; //interseccion en el eje
    //Datos de la ecuación
    float a = Float.parseFloat(lblEca.getText().toString());
    float b = Float.parseFloat(lblEcb.getText().toString());
    float c = Float.parseFloat(lblEcc.getText().toString());
    //Verificamos para IA el limite de grafica de etapas & Calculamos
    las etapas
    int etapas = 0;
    float x = 0;
    float y = 0;
    float etx1,etx2,etx3,ety1,ety2,ety3;
    int ic=0;
    if (mX1 >= cX1){cbReajusteEtapas.setEnabled(true);
        if (cbReajusteEtapas.isChecked()){
            etx1 = mX2;
            ety1 = mY2;
            etx2 = etx1;
            ety2 = a*etx2*etx2+b*etx2+c;
            ety3 = ety2;
            etx3 = (ety3-ib)/m;
            x = etx3;
            y = ety3;
            for(int i = 1; x>=mX1;i++){
                if ((i % 2)==0){etapas = (i+2)/2;
                    x = (y-ib)/m;
                    ic=i;
                } else {etapas = (i+3)/2;
                    y = a*x*x+b*x+c;
                    ic=i;}}
            lblI.setText(String.valueOf(ic));
            lblX1.setText(String.valueOf(x));
            lblY1.setText(String.valueOf(y));
            lblEtX1.setText(String.valueOf(etx1));
            lblEtY1.setText(String.valueOf(ety1));
            lblEtX2.setText(String.valueOf(etx2));
            lblEtY2.setText(String.valueOf(ety2));
            lblEtX3.setText(String.valueOf(etx3));
            lblEtY3.setText(String.valueOf(ety3));
            lbl_sentido_etapas.setText("1");//Arriba --> Abajo
        } else {
            etx1 = mX1; ety1 = mY1; ety2 = ety1;
            etx2 = (float) (((-b)/(2*a))+(Math.sqrt(((a*c)+(a*ety2)+(0.25*b*b))/(a*a)))));
            etx3 = etx2; ety3 = etx3*m+ib; x = etx3; y = ety3;
            float prueba = (float) ((-a*c)+(a*y)+(0.25*b*b));
            if (prueba>=0){
                for(int i = 1; y<=mY2;i++){
                    if ((i % 2)==0){
                        etapas = (i+2)/2;

```

```

        y = m*x+ib;
        ic=i;
    } else {etapas = (i+3)/2;
        x = (float) (((-b)/(2*a))-(Math.sqrt(((a*c)+(a*y)+(0.25*b*b))/(a*a)))));
        ic=i;}}
    } else {etx1 = mX1;
        ety1 = mY1;
        ety2 = ety1;
        etx2 = (float) (((-b)/(2*a))-(Math.sqrt(((a*c)+(a*ety2)+(0.25*b*b))/(a*a)))));
        etx3 = etx2;
        ety3 = etx3*m+ib;
        x = etx3;
        y = ety3;
        for(int i = 1; y<=mY2;i++){
            if ((i % 2)==0){etapas = (i+2)/2;
                y = m*x+ib;
                ic=i;
            } else {etapas = (i+3)/2;
                x = (float) (((-b)/(2*a))-(Math.sqrt(((a*c)+(a*y)+(0.25*b*b))/(a*a)))));
                ic=i;}}}
        lbl1.setText(String.valueOf(ic));
        lblxi.setText(String.valueOf(x));
        lblyi.setText(String.valueOf(y));
        lblx1i.setText(String.valueOf(etx1));
        lbly1i.setText(String.valueOf(ety1));
        lblx2i.setText(String.valueOf(etx2));
        lbly2i.setText(String.valueOf(ety2));
        lblx3i.setText(String.valueOf(etx3));
        lbly3i.setText(String.valueOf(ety3));
        lbl_sentido_etapas.setText("0");//Abajo --> Arriba}
    } else {cbReajusteEtapas.setEnabled(false);
        cbReajusteEtapas.setChecked(false);
        lbl_sentido_etapas.setText("0");
        ety1 = cY1;
        etx1 = (ety1-ib)/m;
        ety2 = ety1;
        etx2 = (float) (((-b)/(2*a))+(Math.sqrt(((a*c)+(a*ety2)+(0.25*b*b))/(a*a)))));
        etx3 = etx2;
        ety3 = etx3*m+ib;
        x = etx3;
        y = ety3;
        for(int i = 1; y<=mY2;i++){
            if ((i % 2)==0){ etapas = (i+2)/2;
                y = m*x+ib;
            } else {etapas = (i+3)/2;
                x = (float) (((-b)/(2*a))-(Math.sqrt(((a*c)+(a*y)+(0.25*b*b))/(a*a)))));}}
        lbl etapas.setText(String.valueOf(etapas));
        Toast.makeText(getApplicationContext(), "x= "+x,
        Toast.LENGTH_LONG).show();
        Toast.makeText(getApplicationContext(), "y= "+y,
        Toast.LENGTH_LONG).show();
        Toast.makeText(getApplicationContext(), "se tiene "+etapas+"
        etapas", Toast.LENGTH_LONG).show();}

```

**APENDICE VIII A - Subrutina para el cálculo de dimensionamiento de equipo
(Absorción y Desorción).**

```

public void calculodimensionamiento (View v){
    float FF = Float.parseFloat(txtespuma.getText().toString());
    float f = Float.parseFloat(txtinundacion.getText().toString());
    float g = Float.parseFloat(txttssuperficial.getText().toString());
    float dl = Float.parseFloat(txtdensiAbs.getText().toString());
    float d = 0;
    float p = 0;
    float e = 0;
    int itemT = spntiempo.getSelectedItemPosition();
    if (cbAhAa.isChecked()){
        if (validarAhAa()){
            d = Float.parseFloat(txtDiaPerforacion.getText().toString());
            p = Float.parseFloat(txtDisPaso.getText().toString());
            e = Float.parseFloat(txtEspesor.getText().toString());
        }else {d = (float) (0.5); //Estandar
            txtDiaPerforacion.setText(String.valueOf(d));
            p = (float) (1.5); //Estandar
            txtDisPaso.setText(String.valueOf(p));
            e = (float) (0.3); //Estandar
            txtEspesor.setText(String.valueOf(e));
        }
    }
    float s= (float) (3.6);
    float m= (float) (0.06);
    float h= (float) (0.001);
    float L=0;
    float V=0;
    if (itemT==0){
        L = Float.parseFloat(txtL1.getText().toString())*s;
        V = Float.parseFloat(txtG2.getText().toString())*s;
    }else {if (itemT==1){
        L = Float.parseFloat(txtL1.getText().toString())*m;
        V = Float.parseFloat(txtG2.getText().toString())*m;
    }else {if (itemT==2){
        L = Float.parseFloat(txtL1.getText().toString())*h;
        V = Float.parseFloat(txtG2.getText().toString())*h;}}}
    float PMsto = Float.parseFloat(txtPMsoluta.getText().toString());
    float porSto =
    Float.parseFloat(txtporsoluta.getText().toString())/100;
    float PMPor =
    Float.parseFloat(txtPMportador.getText().toString()); //txtPMportador
    float R=6234/100; //Constante universal de los gases
    float P = Float.parseFloat(txtPT.getText().toString()); //presión
    if (rbAtm.isChecked()){
        P = P*760;}
    float T = Float.parseFloat(txtTT.getText().toString());
    if (rbC.isChecked()){
        T = T+(27315/100);}
    float etapas = Float.parseFloat(lbletapas.getText().toString());
    float M1 = Float.parseFloat(txtPMabsorbente.getText().toString());
    float Mv, dv, flv;
    Mv = PMsto*porSto+PMPor*(1-porSto);
    dv = (P*Mv)/(R*(T));
    flv = (float) (((L*M1)/(V*Mv))* (Math.sqrt(dv/dl)));
    int itemE = spnEspaciado.getSelectedItemPosition();
    float E, Cf;
    Cf = 0;
    E = 0;
    if (itemE==1){E = 36;
        if (flv < 1){Cf = (float) (-0.3699*(Math.pow(flv, 3)) +

```

```

0.9614*(Math.pow(flv,2)) - 0.9584*flv + 0.5168);
    } else {Cf = (float) (-0.113*(Math.log(flv)) + 0.1513);}
} else {if (itemE==2){E = 24;
    if (flv < 1){
        Cf = (float) (0.2071*(Math.pow(flv,4)) -
0.843*(Math.pow(flv,3)) + 1.1836*(Math.pow(flv,2)) - 0.8174*flv+
0.3947);
    } else {
        Cf = (float) (-0.091*(Math.log(flv)) + 0.1263);}
} else {if (itemE==3){
    E = 18;
    if (flv < 1){
        Cf = (float) (-0.0665*(Math.pow(flv,3)) +
0.2732*(Math.pow(flv,2)) - 0.3985*flv + 0.2909);
    } else {
        Cf = (float) (-0.066*(Math.log(flv)) + 0.0997);}
} else {if (itemE==4){
    E = 12;
    if (flv < 1){
        Cf = (float) (-0.0594*(Math.pow(flv,3)) +
0.2354*(Math.pow(flv,2)) - 0.3248*flv + 0.2278);
    } else {
        Cf = (float) (-0.054*(Math.log(flv)) + 0.081);}
}} else {if (itemE==5){
    E = 9;
    Cf = (float) (-0.0184*(Math.pow(flv,3)) +
0.0955*(Math.pow(flv,2)) - 0.187*flv + 0.1804);
} else {if (itemE==6){
    E = 6;
    Cf = (float) (-0.0216*(Math.pow(flv,3)) +
0.0978*(Math.pow(flv,2)) - 0.1685*flv + 0.1563);}}}}}}
float Fst = (float) Math.pow((g/20),0.2);
float AdA = 0;
if (flv<=0.1){AdA = (float) (0.1);
} else {if (flv<=1) {
    AdA = (float) (0.1+((flv-1)/9));
} else {AdA = (float) (0.2);}}
float AhAa = (float) (0.907*(Math.pow((d/p),2)));
float FHA = 0;
if (AhAa<=0.1){FHA = (float) (5*AhAa+0.5);
} else {FHA = 1;}
float C = Fst*FF*FHA*Cf;
float uf = (float) (C*(Math.pow(((dl-dv)/dv),0.5)));
float dt1 = (4*(V/3600)*Mv);
float dt2 = (float) (f*(uf/3.28)*3.1416*(1-AdA)*dv);
float Dt=0;
Dt = (float) (dt1/dt2);
float DT=0;
DT = (float) (Math.pow(Dt,0.5));
E = (float) (E*2.54);
Toast.makeText(getApplicationContext(), "Espaciado: "+E+" cm",
Toast.LENGTH_LONG).show();
float A = (float) (etapas*e+etapas*E+14*30.48);
A = A/100;
//Escribe el diametro en metros
lbl diametro.setText(String.valueOf(DT)+" metros");
//Escribe la altura de la columna en metros
lbl altura.setText(String.valueOf(A)+" metros");}

```

APENDICE IXA - Subrutina para uso de k-NN.

```
public static void main(String[] args) {

    ArrayList<Attribute> atts = new ArrayList<>();
    ArrayList<String> classVal = new ArrayList<>();
    classVal.add("X1");
    classVal.add("X2");
    classVal.add("X3");
    classVal.add("X4");
    classVal.add("X5");
    classVal.add("X6");... "X20"

    atts.add(new Attribute("content", (ArrayList<String>) null));
    atts.add(new Attribute("@@class@@", classVal));
    Instances dataRaw = new Instances("TestInstancesDatos", atts, 0);
    double[] instanceValue1 = new double[dataRaw.numAttributes()];
    instanceValue1[0] = dataRaw.attribute(0).addStringValue("X");
    instanceValue1[1] = 0;
    dataRaw.add(new DenseInstance(1.0, instanceValue1));

    double[] instanceValue2 = new double[dataRaw.numAttributes()];

    instanceValue2[0] = dataRaw.attribute(0).addStringValue("Y");
    instanceValue2[1] = 1;
    dataRaw.add(new DenseInstance(1.0, instanceValue2));
    double[] instanceValue3 = new double[dataRaw.numAttributes()];
    instanceValue3[0] = dataRaw.attribute(0).addStringValue("X");
    instanceValue3[1] = 2;
    dataRaw.add(new DenseInstance(1.0, instanceValue3));
    double[] instanceValue4 = new double[dataRaw.numAttributes()];
    instanceValue4[0] = dataRaw.attribute(0).addStringValue("Y");
    instanceValue4[1] = 3;
    dataRaw.add(new DenseInstance(1.0, instanceValue4));
    double[] instanceValue5 = new double[dataRaw.numAttributes()];
    instanceValue5[0] = dataRaw.attribute(0).addStringValue("X");
    instanceValue5[1] = 4;

    dataRaw.add(new DenseInstance(1.0, instanceValue5));
    System.out.println("datos experimentales");
    weka.core.neighboursearch.LinearNNSearch knn = new
LinearNNSearch(dataRaw);
    try {
        // Este método recibe la instancia objetivo que desea conocer,
sus vecinos y N
        Instances nearestInstances =
knn.kNearestNeighbours(dataRaw.get(0), 1);

        System.out.println(nearestInstances);
    } catch (Exception e) {
        e.printStackTrace();
    }
}
```

APENDICE IXA - Subrutina para uso de k-means.

```
public class KMeans {
    public KMeansResultado calcular(List<Punto> puntos, Integer k) {
        List<Cluster> clusters = elegirCentroides(puntos, k);

        while (!finalizo(clusters)) {
            prepararClusters(clusters);
            asignarPuntos(puntos, clusters);
            recalcularCentroides(clusters);
        }
        Double o = calcularFuncionObjetivo(clusters);

        return new KMeansResultado(clusters, o);
    }
    private void recalcularCentroides(List<Cluster> clusters) {
        for (Cluster c : clusters) {
            if (c.getPuntos().isEmpty()) {
                c.setTermino(true);
                continue;
            }
            Float[] d = new Float[c.getPuntos().get(0).getGrado()];
            Arrays.fill(d, 0f);
            for (Punto p : c.getPuntos()) {
                for (int i = 0; i < p.getGrado(); i++) {
                    d[i] += (p.get(i) / c.getPuntos().size());
                }
            }
            Punto nuevoCentroide = new Punto(d);

            if (nuevoCentroide.equals(c.getCentroide())) {
                c.setTermino(true);
            } else {
                c.setCentroide(nuevoCentroide);
            }
        }
    }
    private void asignarPuntos(List<Punto> puntos, List<Cluster>
clusters) {
        for (Punto punto : puntos) {
            Cluster masCercano = clusters.get(0);
            Double distanciaMinima = Double.MAX_VALUE;
            for (Cluster cluster : clusters) {
                Double distancia = punto.distanciaEuclideana(cluster
                    .getCentroide());
                if (distanciaMinima > distancia) {
                    distanciaMinima = distancia;
                    masCercano = cluster;
                }
            }
            masCercano.getPuntos().add(punto);
        }
    }
    private void prepararClusters(List<Cluster> clusters) {
        for (Cluster c : clusters) {
            c.limpiarPuntos();
        }
    }
    private Double calcularFuncionObjetivo(List<Cluster> clusters) {
        Double ofv = 0d;

        for (Cluster cluster : clusters) {
            for (Punto punto : cluster.getPuntos()) {
                ofv +=
                punto.distanciaEuclideana(cluster.getCentroide());
            }
        }
        return ofv;
    }
    private boolean finalizo(List<Cluster> clusters) {
        for (Cluster cluster : clusters) {
            if (!cluster.isTermino()) {
                return false;
            }
        }
        return true;
    }
}
```

```

private List<Cluster> elegirCentroides(List<Punto> puntos, Integer
k) {
    List<Cluster> centroides = new ArrayList<Cluster>();

    List<Float> maximos = new ArrayList<Float>();
    List<Float> minimos = new ArrayList<Float>();

    for (int i = 0; i < puntos.get(0).getGrado(); i++) {
        Float min = Float.POSITIVE_INFINITY, max =
Float.NEGATIVE_INFINITY;

        for (Punto punto : puntos) {
            min = min > punto.get(i) ? punto.get(i) : min;
            max = max < punto.get(i) ? punto.get(i) : max;
            maximos.add(max);
            minimos.add(min); }

        Random random = new Random();

        for (int i = 0; i < k; i++) {
            Float[] data = new Float[puntos.get(0).getGrado()];
            Arrays.fill(data, 0f);
            for (int d = 0; d < puntos.get(0).getGrado(); d++) {
                data[d] = random.nextFloat()
                    * (maximos.get(d) - minimos.get(d)) +
minimos.get(d); }
            Cluster c = new Cluster();
            Punto centroide = new Punto(data);
            c.setCentroide(centroide);
            centroides.add(c);}
return centroides;}}

```

APENDICE XA - Resultados ChemSep - P1.

Stream	Feed1	Feed3	Top	Bottom
Stage	1	10	1	10
Pressure (atm)	1.07000	1.07000	1.07000	1.07000
Vapour fraction (-)	0.000000	1.00000	1.00000	0.000000
Temperature (C)	30.0000	30.0000	34.7140	34.9289
Enthalpy (J/kmol)	-8.632E+07	377731	737234	-7.320E+07
Entropy (J/kmol/K)	-149659	1254.31	1804.88	-125509
Total molar flow (mol/s)	1.84611	10.9049	10.5242	2.22676
Total mass flow (kg/s)	0.468196	0.488281	0.465194	0.491283
Vapour std.vol.flow (m3/s)		0.258344	0.249327	
Liquid std.vol.flow (m3/s)	5.9808E-04			6.3149E-04
Mole flows (mol/s)				
Benzene	0.00923000	0.218098	0.0328225	0.194505
N-octadecane	1.83688	0.000000	2.0611E-06	1.83688
Propane	0.000000	10.6868	10.4914	0.195381
Mole fractions (-)				
Benzene	0.00499970	0.0200000	0.00311875	0.0873489
N-octadecane	0.995000	0.000000	1.9584E-07	0.824909
Propane	0.000000	0.980000	0.996881	0.0877422
Mass flows (kg/s)				
Benzene	7.2097E-04	0.0170361	0.00256383	0.0151932
N-octadecane	0.467475	0.000000	5.2453E-07	0.467474
Propane	0.000000	0.471245	0.462630	0.00861553
Mass fractions (-)				
Benzene	0.00153990	0.0348899	0.00551132	0.0309256
N-octadecane	0.998460	0.000000	1.1275E-06	0.951538
Propane	0.000000	0.965110	0.994487	0.0175368
Combined stream fractions (
Total molar	0.144782	0.855219	0.825366	0.174634
Total mass	0.489500	0.510500	0.486362	0.513638
Component molar				
Benzene	0.0406021	0.959398	0.144384	0.855616
N-octadecane	1.00000	0.000000	1.1220E-06	0.999999
Propane	0.000000	1.00000	0.981718	0.0182825
Vapour:				
Mole weight (kg/kmol)		44.7759	44.2017	
Density (kg/m3)		1.92603	1.87222	
Std.density (kg/m3)		1.89004	1.86580	
Viscosity (N/m2.s)		8.3869E-06	8.5166E-06	
Heat capacity (J/kmol/K)		76062.9	76886.8	
Thermal cond. (J/s/m/K)		0.0184183	0.0190720	
Liquid:				
Mole weight (kg/kmol)	253.612			220.627
Density (kg/m3)	753.504			750.164
Std.density (kg/m3)	782.831			777.964
Viscosity (N/m2.s)	0.00384127			0.00304661
Heat capacity (J/kmol/K)	563633			492243
Thermal cond. (J/s/m/K)	0.143902			0.137913
Surface tension (N/m)	0.0275207			0.0252061

APENDICE XIA - Resultados ChemSep – P2.

Stream	Liq Abs	Gas Ric	V.Gas Ric	L.Gas Ric	Top	Bottom
Stage	1	6	6	6	1	6
Pressure (atm)	10.8572	10.8572	10.8572	10.8572	10.8572	10.8572
Vapour fraction (-)	0.000000	0.985640	1.000000	0.000000	1.000000	0.000000
Temperature (C)	30.0000	30.0000	30.0000	30.0000	31.1284	32.0181
Enthalpy (J/kmol)	-4.360E+07	-330398			224401	-3.694E+07
Entropy (J/kmol/K)	-121789	-21196.3			-19894.6	-108561
Total molar flow (mol/s)	47.1074	50.0000	49.2820	0.717981	40.8050	56.3024
Total mass flow (kg/s)	0.848640	2.20251	2.16966	0.0328482	1.79187	1.25928
Vapour std.vol.flow (m ³ /s)		*	*	*	*	*
Liquid std.vol.flow (m ³ /s)	*	*				*
Mole flows (mol/s)						
Ethanol	0.000000	1.00000	0.392628	0.607372	2.0053E-11	1.00000
Water	47.1074	0.000000	0.000000	0.000000	0.150776	46.9566
Carbon dioxide	0.000000	49.0000	48.8894	0.110609	40.6542	8.34576
Mole fractions (-)						
Ethanol	0.000000	0.0200000	0.00796696	0.845944	4.9145E-13	0.0177612
Water	1.00000	0.000000	0.000000	0.000000	0.00369503	0.834008
Carbon dioxide	0.000000	0.980000	0.992033	0.154056	0.996305	0.148231
Mass flows (kg/s)						
Ethanol	0.000000	0.0460680	0.0180876	0.0279804	9.2384E-13	0.0460680
Water	0.848640	0.000000	0.000000	0.000000	0.00271623	0.845924
Carbon dioxide	0.000000	2.15644	2.15157	0.00486780	1.78915	0.367289
Mass fractions (-)						
Ethanol	0.000000	0.0209161	0.00833660	0.851809	5.1557E-13	0.0365828
Water	1.00000	0.000000	0.000000	0.000000	0.00151586	0.671752
Carbon dioxide	0.000000	0.979084	0.991663	0.148191	0.998484	0.291665
Combined stream fractions (
Total molar	0.485106	0.514894	0.514894	0.514894	0.420205	0.579795
Total mass	0.278138	0.721862	0.721456	0.749731	0.587277	0.412723
Component molar						
Ethanol	0.000000	1.000000	0.392628	0.607372	2.0053E-11	1.00000
Water	1.00000	0.000000	0.000000	0.000000	0.00320068	0.996799
Carbon dioxide	0.000000	1.00000	0.997743	0.00225733	0.829678	0.170322
Vapour:						
Mole weight (kg/kmol)		44.0259	44.0259		43.9134	
Density (kg/m ³)		19.2159	19.2159		19.0958	
Std.density (kg/m ³)		*	*		*	
Viscosity (N/m ² .s)		1.5185E-05	1.5185E-05		1.5293E-05	
Heat capacity (J/kmol/K)		37425.9	37425.9		37232.2	
Thermal cond. (J/s/m/K)		0.0177987	0.0177987		0.0178956	
Liquid:						
Mole weight (kg/kmol)	18.0153	45.7512		45.7512		22.3667
Density (kg/m ³)	1003.48	840.148		840.148		1005.36
Std.density (kg/m ³)	*	*		*		*
Viscosity (N/m ² .s)	8.0193E-04	6.4402E-04		6.4402E-04		3.5834E-04
Heat capacity (J/kmol/K)	75543.9	132752		132752		70572.9
Thermal cond. (J/s/m/K)	0.617531	0.150228		0.150228		0.523467
Surface tension (N/m)	0.0712685	0.0183502		0.0183502		0.0595513

APENDICE XIIA - Resultados ChemSep – P3.

Stream	Liq.Abs	Gas Ric	V.Gas Ric	L.Gas Ric	Top	Bottom
Stage	1	10	10	10	1	10
Pressure (atm)	1.08560	1.08560	1.08560	1.08560	1.08560	1.08560
Vapour fraction (-)	0.000000	0.00751586	1.00000	0.000000	1.00000	0.000000
Temperature (C)	30.0000	30.0000	30.0000	30.0000	30.8120	30.3840
Enthalpy (J/kmol)	-4.360E+07	-4.103E+07			214446	-4.206E+07
Entropy (J/kmol/K)	-112967	-85025.2			1767.04	-85701.7
Total molar flow (mol/s)	40.6260	50.0000	0.375793	49.6242	0.000000	90.8910
Total mass flow (kg/s)	0.731877	2.30134	0.0166287	2.28471	0.000000	3.04449
Vapour std.vol.flow (m3/s)		*	*		*	
Liquid std.vol.flow (m3/s)	*	*		*		*
Mole flows (mol/s)						
Carbon dioxide	0.000000	1.00000	0.331879	0.668120	0.000000	1.24983
Water	40.6260	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	40.6412
Ethanol	0.000000	49.0000	0.0439140	48.9561	0.000000	49.0000
Mole fractions (-)						
Carbon dioxide	0.000000	0.0200000	0.883143	0.0134636	0.942813	0.0137509
Water	1.00000	0.000000	0.000000	0.000000	0.0571868	0.447142
Ethanol	0.000000	0.980000	0.116857	0.986536	0.000000	0.539107
Mass flows (kg/s)						
Carbon dioxide	0.000000	0.0440090	0.0146057	0.0294033	0.000000	0.0550039
Water	0.731877	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.732151
Ethanol	0.000000	2.25733	0.00202303	2.25531	0.000000	2.25733
Mass fractions (-)						
Carbon dioxide	0.000000	0.0191232	0.878341	0.0128696	0.975772	0.0180667
Water	1.00000	0.000000	0.000000	0.000000	0.0242277	0.240484
Ethanol	0.000000	0.980877	0.121659	0.987130	0.000000	0.741449
Combined stream fractions (
Total molar	0.448282	0.551718	0.551718	0.551718	0.000000	1.00292
Total mass	0.241287	0.758713	0.729417	0.758934	0.000000	1.00371
Component molar						
Carbon dioxide	0.000000	1.000000	0.331879	0.668120	0.000000	1.24983
Water	1.00000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	1.00037
Ethanol	0.000000	1.00000	8.9620E-04	0.999103	0.000000	1.000000
Vapour:						
Mole weight (kg/kmol)		44.2501	44.2501		42.5230	
Density (kg/m3)		1.94678	1.94678		1.86229	
Std.density (kg/m3)		*	*		*	
Viscosity (N/m2.s)		1.4406E-05	1.4406E-05		1.5197E-05	
Heat capacity (J/kmol/K)		40569.3	40569.3		37022.2	
Thermal cond. (J/s/m/K)		0.0168967	0.0168967		0.0171937	
Liquid:						
Mole weight (kg/kmol)	18.0153	46.0407		46.0407		33.4964
Density (kg/m3)	1003.44	830.284		830.284		849.238
Std.density (kg/m3)	*	*		*		*
Viscosity (N/m2.s)	8.0193E-04	9.4578E-04		9.4578E-04		8.8126E-04
Heat capacity (J/kmol/K)	75543.9	115718		115718		98630.9
Thermal cond. (J/s/m/K)	0.617531	0.162662		0.162662		0.360169
Surface tension (N/m)	0.0712685	0.0213999		0.0213999		0.0435169

APENDICE XIII A - Resultados ChemSep – P4.

Stream	L. Abs	Gas Ric	Top	Bottom
Stage	1	8	1	8
Pressure (atm)	1.05658	1.05658	1.05658	1.05658
Vapour fraction (-)	0.000000	1.00000	1.00000	0.000000
Temperature (C)	26.0000	26.0000	30.6522	31.5022
Enthalpy (J/kmol)	-9.095E+07	75132.4	426578	-7.609E+07
Entropy (J/kmol/K)	-152282	349.849	846.631	-125965
Total molar flow (mol/s)	1.80397	10.7681	10.3682	2.20378
Total mass flow (kg/s)	0.468659	0.482154	0.457988	0.492824
Vapour std.vol.flow (m3/s)		0.255103	0.245631	
Liquid std.vol.flow (m3/s)	5.9702E-04			6.3212E-04
Mole flows (mol/s)				
Benzene	0.00901983	0.215362	0.0232235	0.201158
Propane	0.000000	10.5527	10.3450	0.207678
N-octadecane	1.00000	0.000000	6.3270E-07	0.999999
N-nonadecane	0.794947	0.000000	2.0200E-07	0.794947
Mole fractions (-)				
Benzene	0.00500000	0.0200001	0.00223987	0.0912787
Propane	0.000000	0.980000	0.997760	0.0942369
N-octadecane	0.554334	0.000000	6.1023E-08	0.453765
N-nonadecane	0.440666	0.000000	1.9482E-08	0.360719
Mass flows (kg/s)				
Benzene	7.0455E-04	0.0168224	0.00181404	0.0157129
Propane	0.000000	0.465332	0.456174	0.00915776
N-octadecane	0.254494	0.000000	1.6101E-07	0.254494
N-nonadecane	0.213460	0.000000	5.4242E-08	0.213460
Mass fractions (-)				
Benzene	0.00150335	0.0348900	0.00396088	0.0318833
Propane	0.000000	0.965110	0.996039	0.0185822
N-octadecane	0.543027	0.000000	3.5157E-07	0.516399
N-nonadecane	0.455470	0.000000	1.1843E-07	0.433136
Combined stream fractions (
Total molar	0.143491	0.856510	0.824708	0.175292
Total mass	0.492903	0.507097	0.481681	0.518319
Component molar				
Benzene	0.0401986	0.959801	0.103500	0.896500
Propane	0.000000	1.00000	0.980320	0.0196801
N-octadecane	1.000000	0.000000	6.3270E-07	0.999999
N-nonadecane	1.00000	0.000000	2.5410E-07	1.000000
Vapour:				
Mole weight (kg/kmol)		44.7759	44.1718	
Density (kg/m3)		1.92730	1.87218	
Std.density (kg/m3)		1.89004	1.86454	
Viscosity (N/m2.s)		8.2871E-06	8.4161E-06	
Heat capacity (J/kmol/K)		75235.9	76049.7	
Thermal cond. (J/s/m/K)		0.0179749	0.0186205	
Liquid:				
Mole weight (kg/kmol)	259.793			223.627
Density (kg/m3)	755.443			751.955
Std.density (kg/m3)	784.989			779.635
Viscosity (N/m2.s)	0.00450994			0.00348292
Heat capacity (J/kmol/K)	572838			493534
Thermal cond. (J/s/m/K)	0.145510			0.138970
surface tension (N/m)	0.0279771			0.0254772

APENDICE XIVA - Resultados ChemSep – P5.

Stream	Liq. Abs	Gas Ric	Top	Bottom
Stage	1	5	1	5
Pressure (atm)	2.00000	2.00000	2.00000	2.00000
Vapour fraction (-)	0.000000	1.00000	1.00000	0.000000
Temperature (C)	25.0000	25.0000	25.0273	24.9532
Enthalpy (J/kmol)	-4.397E+07	3.9650E-10	795.186	-4.385E+07
Entropy (J/kmol/K)	-123125	-5799.49	-5105.02	-122734
Total molar flow (mol/s)	37234.4	277.808	178.671	37333.5
Total mass flow (kg/s)	670.778	8.04782	5.14181	673.684
Vapour std.vol.flow (m3/s)		6.58140	4.23280	
Liquid std.vol.flow (m3/s)	0.672488			0.675799
Mole flows (mol/s)				
Chloroform	0.000000	0.0277780	0.000000	0.0277780
Water	37234.4	0.000000	2.96987	37231.4
Air	0.000000	277.780	175.701	102.079
Mole fractions (-)				
Chloroform	0.000000	9.9990E-05	0.000000	7.4405E-07
Water	1.00000	0.000000	0.0166220	0.997265
Air	0.000000	0.999900	0.983378	0.00273424
Mass flows (kg/s)				
Chloroform	0.000000	0.00331608	0.000000	0.00331608
Water	670.778	0.000000	0.0535022	670.724
Air	0.000000	8.04451	5.08831	2.95620
Mass fractions (-)				
Chloroform	0.000000	4.1204E-04	0.000000	4.9223E-06
Water	1.00000	0.000000	0.0104053	0.995607
Air	0.000000	0.999588	0.989595	0.00438812
Combined stream fractions (
Total molar	0.992594	0.00740580	0.00476301	0.995237
Total mass	0.988144	0.0118555	0.00757457	0.992425
Component molar				
Chloroform	0.000000	1.00000	0.000000	1.00000
Water	1.00000	0.000000	7.9761E-05	0.999920
Air	0.000000	1.000000	0.632519	0.367481
Vapour:				
Mole weight (kg/kmol)		28.9690	28.7781	
Density (kg/m3)		2.36821	2.35238	
Std.density (kg/m3)		1.22281	1.21475	
Viscosity (N/m2.s)		1.8457E-05	1.8412E-05	
Heat capacity (J/kmol/K)		29004.9	29076.8	
Thermal cond. (J/s/m/K)		0.0257963	0.0256786	
Liquid:				
Mole weight (kg/kmol)	18.0153			18.0453
Density (kg/m3)	1007.22			1005.63
Std.density (kg/m3)	997.457			996.870
Viscosity (N/m2.s)	8.9743E-04			8.8321E-04
Heat capacity (J/kmol/K)	75542.0			75414.7
Thermal cond. (J/s/m/K)	0.610248			0.596646
Surface tension (N/m)	0.0720649			0.0718753

APENDICE XVA - Resultados ChemSep – P7.

Stream	Liq Absorb	Gas Rico	Top	Bottom
Stage	1	8	1	8
Pressure (atm)	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
Vapour fraction (-)	0.000000	1.00000	1.00000	0.000000
Temperature (C)	30.0000	30.0000	15.5416	9.91223
Enthalpy (J/kmol)	-4.360E+07	146045	-276760	-4.491E+07
Entropy (J/kmol/K)	-121775	1582.93	865.141	-126666
Total molar flow (mol/s)	0.449700	1.67620	1.70528	0.420621
Total mass flow (kg/s)	0.00810135	0.0479427	0.0484617	0.00758240
Vapour std.vol.flow (m3/s)		0.0397100	0.0403989	
Liquid std.vol.flow (m3/s)	8.1220E-06			7.6261E-06
Mole flows (mol/s)				
Ammonia	0.000000	0.0503000	0.0482315	0.00206852
Air	0.000000	1.62590	1.62526	6.3515E-04
Water	0.449700	0.000000	0.0317828	0.417917
Mole fractions (-)				
Ammonia	0.000000	0.0300084	0.0282836	0.00491779
Air	0.000000	0.969992	0.953078	0.00151003
Water	1.00000	0.000000	0.0186379	0.993572
Mass flows (kg/s)				
Ammonia	0.000000	8.5665E-04	8.2143E-04	3.5229E-05
Air	0.000000	0.0470861	0.0470677	1.8393E-05
Water	0.00810135	0.000000	5.7256E-04	0.00752878
Mass fractions (-)				
Ammonia	0.000000	0.0178684	0.0169501	0.00464616
Air	0.000000	0.982132	0.971235	0.00242587
Water	1.00000	0.000000	0.0118149	0.992928
Combined stream fractions (
Total molar	0.211534	0.788466	0.802145	0.197855
Total mass	0.144553	0.855447	0.864707	0.135294
Component molar				
Ammonia	0.000000	1.00000	0.958876	0.0411237
Air	0.000000	1.00000	0.999609	3.9064E-04
Water	1.00000	0.000000	0.0706757	0.929324
Vapour:				
Mole weight (kg/kmol)		28.6020	28.4186	
Density (kg/m3)		1.14982	1.19966	
Std.density (kg/m3)		1.20732	1.19958	
Viscosity (N/m2.s)		1.8518E-05	1.7776E-05	
Heat capacity (J/kmol/K)		29216.7	29247.1	
Thermal cond. (J/s/m/K)		0.0260703	0.0248650	
Liquid:				
Mole weight (kg/kmol)	18.0153			18.0270
Density (kg/m3)	1003.44			1014.96
Std.density (kg/m3)	997.457			994.269
Viscosity (N/m2.s)	8.0193E-04			0.00128977
Heat capacity (J/kmol/K)	75543.9			75494.2
Thermal cond. (J/s/m/K)	0.617531			0.573061
Surface tension (N/m)	0.0712685			0.0740834

APENDICE XVIA - Resultados ChemSep – P8.

Stream	Liq Rico	Gas Desorb	Top	Bottom
Stage	1	6	1	6
Pressure (atm)	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
Vapour fraction (-)	1.00000	0.000000	1.00000	0.000000
Temperature (C)	122.000	122.000	122.000	122.000
Enthalpy (J/kmol)	3.9450E+06	-3.279E+07	3.9450E+06	0.000000
Entropy (J/kmol/K)	14146.9	7495.32	14146.9	*
Total molar flow (mol/s)	2.00900	23.0573	2.00900	23.0573
Total mass flow (kg/s)	0.0491731	6.03006	0.0491731	0.000000
Vapour std.vol.flow (m3/s)	*		*	
Liquid std.vol.flow (m3/s)		*		
Mole flows (mol/s)				
Benzene	0.216000	0.000000	0.216000	0.000000
Water	1.79300	0.000000	1.79300	0.000000
N-octadecane	0.000000	11.5000	0.000000	0.000000
N-nonadecane	0.000000	11.5573	0.000000	0.000000
Mole fractions (-)				
Benzene	0.107516	0.000000	0.107516	0.000000
Water	0.892484	0.000000	0.892484	0.000000
N-octadecane	0.000000	0.498757	0.000000	0.000000
N-nonadecane	0.000000	0.501243	0.000000	0.000000
Mass flows (kg/s)				
Benzene	0.0168722	0.000000	0.0168722	0.000000
Water	0.0323009	0.000000	0.0323009	0.000000
N-octadecane	0.000000	2.92668	0.000000	0.000000
N-nonadecane	0.000000	3.10338	0.000000	0.000000
Mass fractions (-)				
Benzene	0.343118	0.000000	0.343118	0.000000
Water	0.656882	0.000000	0.656882	0.000000
N-octadecane	0.000000	0.485349	0.000000	0.000000
N-nonadecane	0.000000	0.514651	0.000000	0.000000
Combined stream fractions (
Total molar	0.0801474	0.919853	0.0801474	0.919853
Total mass	0.00808870	0.991911	0.00808870	0.000000
Component molar				
Benzene	1.00000	0.000000	1.00000	0.000000
Water	1.00000	0.000000	1.00000	0.000000
N-octadecane	0.000000	1.000000	0.000000	0.000000
N-nonadecane	0.000000	1.00000	0.000000	0.000000
Vapour:				
Mole weight (kg/kmol)	24.4766		24.4766	
Density (kg/m3)	0.754885		0.754885	
Std.density (kg/m3)	*		*	
Viscosity (N/m2.s)	1.3214E-05		1.3214E-05	
Heat capacity (J/kmol/K)	42527.0		42527.0	
Thermal cond. (J/s/m/K)	0.0254574		0.0254574	
Liquid:				
Mole weight (kg/kmol)		261.525		
Density (kg/m3)		690.848		
Std.density (kg/m3)		*		
Viscosity (N/m2.s)		9.1361E-04		
Heat capacity (J/kmol/K)		655693		
Thermal cond. (J/s/m/K)		0.129130		
surface tension (N/m)		0.0200467		