

PROCEDIMIENTO PARA EL BENEFICIO INTEGRAL DE MINERALES PIRITICOS	
Título: Programa de cálculo	
Paquete núm.:	
Actividad:	
Fecha: Agosto 1984	Documento núm.: 7

Autor	Julio González Ludeña
Supervisor	
Jefe Proyecto	Federico Fernández Tornero

Distribuido a:

50087

FUNCIONES Y PARAMETROS DE LA CAMARA DE COMBUSTION
PROGRAMA CACOMB.- (HP-41)

PERDIDAS DE CALOR DE UN HORNO DE FLUOSOLIDOS
PERCAL.- (HP-41)

ENTALPIAS DE FORMACION DE UNA MEZCLA DE GASES CON CUALQUIER
NUMERO DE COMPONENTES
CALFOR.- (HP-41)

PROGRAMA PARA EL CALCULO DE PRESIONES DE VAPOR Y MASA
VAPORIZADA EN UN GAS INERTE
PREVAP.- (HP-41)

APROXIMACION DE FUNCIONES POR UN POLINOMIO DE 2º GRADO.
PROGRAMA PARA EL CALCULO DE LAS CONSTANTES POR EL METODO
DE GAUSS
GA-3.- (HP-41)

PROGRAMA PARA EL CALCULO DE ENERGIA LIBRE Y DE LA CONSTANTE
DE UNA REACCION
K-REAC (HP-41)

APROVECHAMIENTO INTEGRAL DE PIRITAS

PLAN GENERAL

PROGRAMA CACOMB.- (HP 41)

Este programa calcula los valores de las variables dependientes que se relacionan mas abajo en la forma que tambien se indica.

Corresponde a un balance material y térmico de una cámara de combustión suministrando gases calientes a un horno de fluosólidos para la destilación del azufre lábil de la pirita, utilizando como combustible fuel oil nº 1 y como gas moderador de la temperatura gas de cola de la propia instalación de condensación del azufre.

Los cálculos se hacen en función de dos variables: la temperatura del gas de recirculación t_3 y la de los gases calientes a la salida de la cámara de combustión t_4 .

Como datos fijos se han tomado:

la temp. del fuel oil	60° C
la temp. y hum. rel. del aire de comb.	80% a 20° C
el exceso de aire de comb.	e=0
las pérdidas de calor de la cam.de comb.como fracc.del P.C.I.del combustible	P= 0,0015

En resumen figuran en el programa como entradas o salidas:

t_3	temp. del gas de recirculación	° C
t_4	id. de los gases calientes	° C
H_3	Entalpia del gas de recirculación	Kcal/Kgmol
H_4	id. de los gases calientes	Kcal(Kgmol
x_0	cantidad de gas recirculado	Kgmol/Kg F.O.
$H_{(3)}$	Entalpia del gas recirculado	Kcal/Kg F.O.
$H_{(4)}$	id. de los gases calientes	Kcal/Kg F.O.
$H_{f(4)}$	Entalpia de formación del gas caliente	Kcal/Kg F.O.
$V_{(4)}$	Vol. del gas caliente a la salida	m ³ /Kg F.O.
$M_{(4)}$	Masa de los gases calientes	Kg/Kg F.O.
$P_{(4)}$	Pérdidas de la cámara de combustión	fracción del P.C.I.

Como las pérdidas de la cámara de combustión dependen de su tamaño y de la composición de sus paredes ademas de otras circunstancias imposibles de determinar en el momento actual se ha introducido en el programa el cálculo de una corrección A_p de x_0 para el caso de que las pérdidas a considerar deban ser $P \neq 0,0015$. Conocido el valor de x_0 corregido se calculan facilmente las correcciones a efectuar en las demas variables dependientes.

- - USO - -

1º Pulsar A	Pide entr. t_4
2º Entr. t_4 y pulsar R/S	Exhibe H_4 y arch.en R_{02}
3º Pulsar B	Pide entr. t_3
4º Entr. t_3 y pulsar R/S	Exh. H_3 y arch. en R_{03}
5º Pulsar C	Exh. x_0 y arch. en R_{04}
6º Pulsar R/S	Exh. $H_{(3)}$
7º Pulsar R/S	Exh. $H_{(4)}$
8º Pulsar R/S	Exh $H_{f(4)}$

AUXINI - *Investigación Aplicada*

9º Pulsar R/S
10º Pulsar R/S
11º Pulsar D
12º Entr. P y pulsar R/S

Exh. V₍₄₎
Exh. M₍₄₎
Pide entr. P
Exh. A_p

NOTA.-Si se activa la Flag O2, al pulsar despues B y entrar t₃ (paso 4º) el programa pasa a dar δ saltando la exhibición de H₃.

PROGRAMA CACOMB.- (HP 41)

```

09:51 08.00
01*LBL "CACOMB"
02 STOP
03*LBL A
04 CLR
05 "T4 ?"
06 PROMPT ----- Entr. t4
07*LBL 03
08 273.1
09 +
10 FS? 01
11 GTO 02
12 STO 05
13*LBL 02
14 STO 01
15 7.25
16 *
17 RCL 01
18 X12
19 5.63 E-4
20 *
21 +
22 RCL 01
23 3
24 Y1X
25 .6 E-7
26 *
27 +
28 26138
29 RCL 01
30 /
31 +
32 2300.527
33 -
34 FS? 01
35 GTO 01
36 STO 02 ----- Exh. y Arch. H4
37 STOP
38*LBL 01 ----- Exh. y Arch. H3
39 STO 03
40 CF 01
41 FS? 02
42 GTO C
43 STOP
44*LBL B
45 CLR
46 "T3 ?"
47 PROMPT ----- Entr. t3
48 SF 01
49 GTO 03
50*LBL C
51 FIX 3
52 9583.3
53 RCL 02
    
```

PROGRAMA CACOMB.- (HP 41)

```
54 .52911
55 *
56 -
57 RCL 02
58 RCL 03
59 -
60 /
61 STO 04 ----- Exh. y Arch. r
62 STOP
63 FIX 1
64 RCL 03
65 * ----- Exh.H(3)
66 STOP
67 RCL 04
68 RCL 02
69 * ----- Exh.H(4)
70 STOP
71 FIX 0
72 RCL 04
73 20497
74 *
75 10847
76 +
77 CHS ----- Exh.Hf(4)
78 STOP
79 FIX 3
80 .002
81 RCL 04
82 *
83 .04339
84 +
85 RCL 05
86 * ----- Exh.V(4)
87 STOP
88 28.8635
89 RCL 04
90 *
91 15.2719
92 + ----- Exh.M(4)
93+LBL I
94 CLA
95 -P ?-
96 PROMPT ----- Entr. P
97 9600
98 *
99 CHS
100 14.4
101 +
102 RCL 02 ----- Exh. Ap
103 RCL 03
104 -
105 /
106 .END.
```

APROVECHAMIENTO INTEGRAL DE PIRITAS
PLAN GENERAL

PROGRAMA PERCAL.-(HP 41)

Con este programa se calculan las pérdidas de calor de un horno de fluosólidos cuyas dimensiones vienen determinadas por sus capacidades total y específica. Las siguientes variables o parámetros figuran en el programa como entradas o salidas o en el presente texto:

M_p	Capacidad total. Peso de pirita a la entrada	Kg/hr.
J	id. específica	Kg/hr.m ²
D	Diámetro del lecho	m.
E	Espesor total de la pared	m.
E_r	id. de la capa de refractario	m.
E_a	id. de la de aislante refractario	m.
E_c	id. de la de ladrillo común	m.
a, b, c	constantes en expresiones de la forma: $\lambda = a + b.t + c.t^2$	
	que representan conductibilidades térmicas de los materiales empleados en función de la temperatura.	
λ_r	conductibilidad term. del refractario	Kcal/m ² .hr.(°C/m)
λ_a	id. id. aislante-refract.	id.
λ_c	id. id. ladr. común	id.
t_i	temp. interior del horno que se supone = temp. de la superficie interior de la capa de refract.	
t_a	temperatura ambiente	°C
t_1	temp. de la superf. de contacto entre refract. y aislante-refractario	°C
t_2	id. del contacto aislante-común	°C
t_3	id. de la superficie exterior del horno	°C
S_i	superficie interior del horno	m ²
S_e	id. exterior	m ²
S_m	id. id. media logarítmica	m ²
ϵ_{max}	error max. admitido	°C
Q	pérdida de calor referida a S_m	Kcal/m ² .hr
Q_t	id. total	Kcal/hr.
Q_m	id. referida a 1 ton de pirita	Kcal/ton.
L	altura interior de la cámara de expansión	m.

El programa calcula el diámetro del lecho en función de las capacidades M_p y J de acuerdo con:

$$D = \sqrt{\frac{4 \cdot M_p}{\pi \cdot J}}$$

Todas las dimensiones interiores del horno pueden ponerse en función del diámetro una vez elegido un diseño. Se ha adoptado aquí el que Pire ha adoptado en su trabajo de 28 de Enero del año en curso según datos de Municio y COMESSA. La altura del cuerpo cilíndrico de la cámara de expansión con su misión de retener finos en el horno dependerá de la carga específica J . Tomando como base el diseño citado en el cual se adopta una altura de 4 m. para una carga específica de $833,3 \text{ Kg/m}^2$ esto fija para la altura de dicha cámara la dependencia:

$$L = 0,0048 \cdot J$$

Las superficies interior y exterior de los hornos adaptados al citado diseño serían:

$$S_i = \pi (1,347 D^2 + 2 \cdot D + 0,75 \sqrt{9,242 + D^2} + 0,0096 \cdot D \cdot J)$$

$$S_e = \pi \sqrt{0,1045 D^2 + 0,455 D \cdot E + 0,5 E^2} (D + 2 \cdot E) + 2 \cdot \pi \cdot (D + 2 \cdot E) + \frac{1}{4} \cdot \pi \sqrt{9,242 + D^2} (3 \cdot D + 4 \cdot E) + \pi \cdot (D + E) (0,0096 \cdot J + 0,44 \cdot D) + \pi \sqrt{1,048 \cdot D^2 + 2 \cdot D \cdot E + E^2} (D + E)$$

La pared del horno se supone compuesta de 3 capas: refractario, aislante-refractario y ladrillo común de espesores a determinar de forma que sean:

$$E = E_r + E_a + E_c$$

No se consideran ni revestimiento interno resistente a la abrasión en el lecho el cual será probablemente de alta conductibilidad y no afectará a estos cálculos ni aislamiento exterior.

Siendo variable la superficie de transmisión de calor en el sentido del flujo se ha tomado la media logarítmica de las superficies interna y externa como superficie efectiva. Esta es una simplificación válida en un estudio que no tiene miras constructivas sino solamente de cálculo de pérdidas de calor con cierta exactitud para un balance térmico.

El programa calcula la resistencia total de la pared:

$$\frac{E}{\lambda_r} + \frac{E}{\lambda_a} + \frac{E}{\lambda_c} = \Sigma \frac{E \cdot x}{\lambda_x}$$

y el coeficiente total de transmisión mediante:

$$k = \frac{1}{\Sigma + \frac{1}{14,5}}$$

Esta es la expresión analítica que hemos encontrado para una representación gráfica publicada por un fabricante de materiales refractarios especiales para hornos. Incorpora las pérdidas desde la pared exterior por radiación y convección a aire en reposo, excepto las corrientes de convección provocadas por el contacto con la pared caliente.

Las conductibilidades térmicas de los tres materiales considerados las calcula el programa mediante la expresión citada anteriormente. Los valores de las constantes a, b y c para cada uno de ellos los va pidiendo el programa en su ejecución. Para los cálculos concretos que se efectuaron para el balance se utilizaron:

$$\text{Refractario: } a = 0,591 \quad b = 4,169 \cdot 10^{-4} \quad c = -2,289 \cdot 10^{-9}$$

AUXINI - *Investigación Aplicada*

Aislante-Refractario: $a = 0,152$ $b = 5 \cdot 10^{-5}$ $c = 1,25 \cdot 10^{-7}$

Ladrillo común: $a = 0,425$ $b = 4,477 \cdot 10^{-4}$ $c = - 8,929 \cdot 10^{-9}$

El programa actua iterativamente comparando despues de cada ciclo las temperaturas obtenidas para los contactos de las capas: t_1 y t_2 y para la superficie exterior t_3 en cada iteración con los obtenidos en la anterior y con las diferencias calcula:

$$\sqrt{\Delta t_1^2 + \Delta t_2^2 + \Delta t_3^2} < \epsilon_{\max}$$

y se considera un resultado satisfactorio cuando se cumple la anterior desigualdad que corresponderia a las temperaturas que se tendrian en régimen estacionario de

flujo de calor. El error máximo admisible lo pide el programa al ejecutarse y tiene como se vé las dimensiones de una temperatura. En las pruebas hechas con $\epsilon < 10$ se alcanza una precisión suficiente. Apenas hay diferencia si en lugar de 10 se especifica $\epsilon < 5$.

Alcanzado esto el programa exhibe: Q, Q_t, Q_m y las temperaturas t_1, t_2 y t_3 . Es importante tomar notas de estas últimas para cerciorarse de que no se han alcanzado o rebasado las temperaturas toleradas por los materiales empleados especialmente el aislante refractario y el ladrillo comun.

- - USD - -

Admite los cuatro usos siguientes:

Pulsando A : Ejecuta el programa completo pidiendo en su transcurso todos los datos necesarios para tal ejecución completa.

Pulsando B : Ejecuta el programa como en A pero con los mismos materiales que componen la pared del horno. Solo pide por tanto los datos operativos como capacidades y temperaturas aunque tambien pide los espesores de las capas que componen la pared. No pide los datos relativos a las conductibilidades de los materiales.

Pulsando C : Ejecuta para las mismas capacidades y temperaturas interior y ambiente pero distintos espesores de las capas de materiales empleados.

Pulsando D : Efectua los cálculos para los mismos datos que la vez anterior que se hubiese ejecutado pero variando solo la temperaturas interior y ambiente.

NOTA.-Por supuesto es preciso que la primera vez que se ejecute en cada tanda de cálculos se haga con el programa A pues de otro modo faltarían datos o bien usaria los que la calculadora tuviese almacenados dando por tanto resultados erroneos.

AUXINI - *Investigación Aplicada* APROVECHAMIENTO INTEGRAL DE PIRITAS
PLAN GENERAL

```

12:58 19.00          PROGRAMA PERCAL.--(HP 41)
01*LBL *PERCAL*
02 STOP
03*LBL A
04 CF 00
05 CF 01
06 CF 02
07 CF 03
08 GTO 11
09*LBL B
10 CF 00
11 SF 01
12 CF 02
13 CF 03
14 GTO 11
15*LBL C
16 CF 00
17 CF 01
18 SF 02
19 CF 03
20 GTO 12
21*LBL D
22 CF 00
23 CF 01
24 CF 02
25 SF 03
26 GTO 14
27*LBL 11
28 AON
29 *CAP.??
30 XEQ 05 ----- Entr. Mp
31 STO 06
32 AON
33 *CAP. ESP.??
34 XEQ 05 ----- Entr. J
35 STO 07
36 AON
37 *GR. PARED??
38 XEQ 05 ----- Entr E
39 STO 08
40*LBL 12
41 AON
42 *GR. L. R.??
43 XEQ 05 ----- Entr. Er
44 STO 09
45 AON
46 *GR. L. A.??
47 XEQ 05 ----- Entr. Ea
48 STO 10
49 +
50 RCL 08
51 -
52 CHS
53 STO 11
54 FS? 01
55 GTO 14 14
56 FS? 02
57 GTO 13
58 3
59 STO 00

```

AUXINI - *Investigación Aplicada*

```

60 11
61 STO 04
62 AON
63 "RFR."
64 ASTO 01
65*LBL 01
66 1
67 ST+ 04
68 "A?="
69 XEQ 16 ----- Entr. de "a" de  $\lambda_r, \lambda_a$  y  $\lambda_c$ 
70 "B?="
71 XEQ 16 ----- Entr. de "b" de  $\lambda_r, \lambda_a$  y  $\lambda_c$ 
72 "C?="
73 ARCL 01
74 XEQ 05 ----- Entr. de "c" de  $\lambda_r, \lambda_a$  y  $\lambda_c$ 
75 STO IND 04
76 DSE 00
77 GTO 02
78*LBL 14
79 AON
80 "TEMP. INT.?"
81 XEQ 05 ----- Entr. de  $t_i$ 
82 STO 24
83 AON
84 "TEMP. AMB.?"
85 XEQ 05 ----- Entr. de  $t_a$ 
86 STO 28
87*LBL 13
88 50
89 STO 27
90 RCL 24
91 -
92 CHS
93 RCL 08
94 /
95 STO 04
96 RCL 24
97 RCL 04
98 RCL 09
99 *
100 -
101 STO 25
102 RCL 04
103 RCL 10
104 *
105 -
106 STO 26
107 GTO 06
108*LBL 16
109 ARCL 01
110 XEQ 05
111 STO IND 04
112 1
113 ST+ 04
114 AON
115 RTN
116*LBL 05
117 AOFF
118 PROMPT
119 RTN
    
```

120*LBL 02
121 RCL 00
122 2
123 X=Y?
124 GTO 03
125 CLX
126 1
127 X=Y?
128 GTO 04
129*LBL 03
130 AON
131 "AISL."
132 ASTO 01
133 GTO 01
134*LBL 04
135 AON
136 "COMUN?"
137 ASTO 01
138 GTO 01
139*LBL 06
140 AON
141 "ERR. MAX.?"
142 XEQ 05 $\frac{1}{2}$ ----- Entr. de ϵ_{max} .
143 STO 32
144 FS? 02
145 GTO 08
146 FS? 03
147 GTO 08
148 RCL 06
149 RCL 07
150 /
151 4
152 *
153 PI
154 /
155 SQRT
156 STO 05 ----- Arch. D
157 X \uparrow 2
158 STO 01
159 1.347
160 *
161 RCL 05
162 2
163 *
164 +
165 RCL 01
166 9.242
167 +
168 SQRT
169 STO 00
170 .75
171 *
172 +
173 .0096
174 RCL 07
175 *
176 STO 02
177 RCL 05
178 *

AUXINI - *Investigación Aplicada*

179 +
180 PI
181 *
182 STO 03 ----- Arch. S_i
183 RCL 00
184 RCL 05
185 +
186 STO 04
187 RCL 02
188 RCL 05
189 .44
190 *
191 +
192 *
193 STO 02
194 RCL 01
195 1.048
196 *
197 RCL 05
198 RCL 08
199 *
200 2
201 *
202 +
203 RCL 08
204 X+2
205 +-
206 SQRT
207 RCL 04
208 *
209 ST+ 02
210 RCL 04
211 RCL 08
212 +
213 STO 04
214 2
215 *
216 ST+ 02
217 RCL 00
218 4
219 /
220 RCL 05
221 3
222 *
223 RCL 08
224 4
225 *
226 +
227 *
228 ST+ 02
229 RCL 01
230 .1045
231 *
232 RCL 05
233 RCL 08
234 *
235 .455
236 *
237 +

AUXINI - *Investigación Aplicada*

```

238 RCL 08
239 X↑2
240 .5
241 *
242 +
243 SQRT
244 RCL 04
245 *
246 ST+ 02
247 RCL 02
248 PI
249 *
250 STO 02 ----- Arch. Se
251 RCL 03
252 -
253 RCL 02
254 RCL 03
255 /
256 LN
257 /
258 STO 33 ----- Arch. Sm
259+LBL 08
260 RCL 24
261 RCL 25
262 XEQ 15
263 14
264 STO 04
265 XEQ 07
266 RCL 09
267 X<>Y
268 /
269 STO 29
270 STO 23
271 RCL 25
272 RCL 26
273 XEQ 15
274 17
275 STO 04
276 XEQ 07
277 RCL 10
278 X<>Y
279 /
280 STO 30
281 ST+ 23
282 RCL 26
283 RCL 27
284 XEQ 15
285 20
286 STO 04
287 XEQ 07
288 RCL 11
289 X<>Y
290 /
291 STO 31
292 ST+ 23
293 GTO 09
294+LBL 15
295 +
296 2
297 /
298 STO 00
299 RTN

```

AUXINI - *Investigación Aplicada*

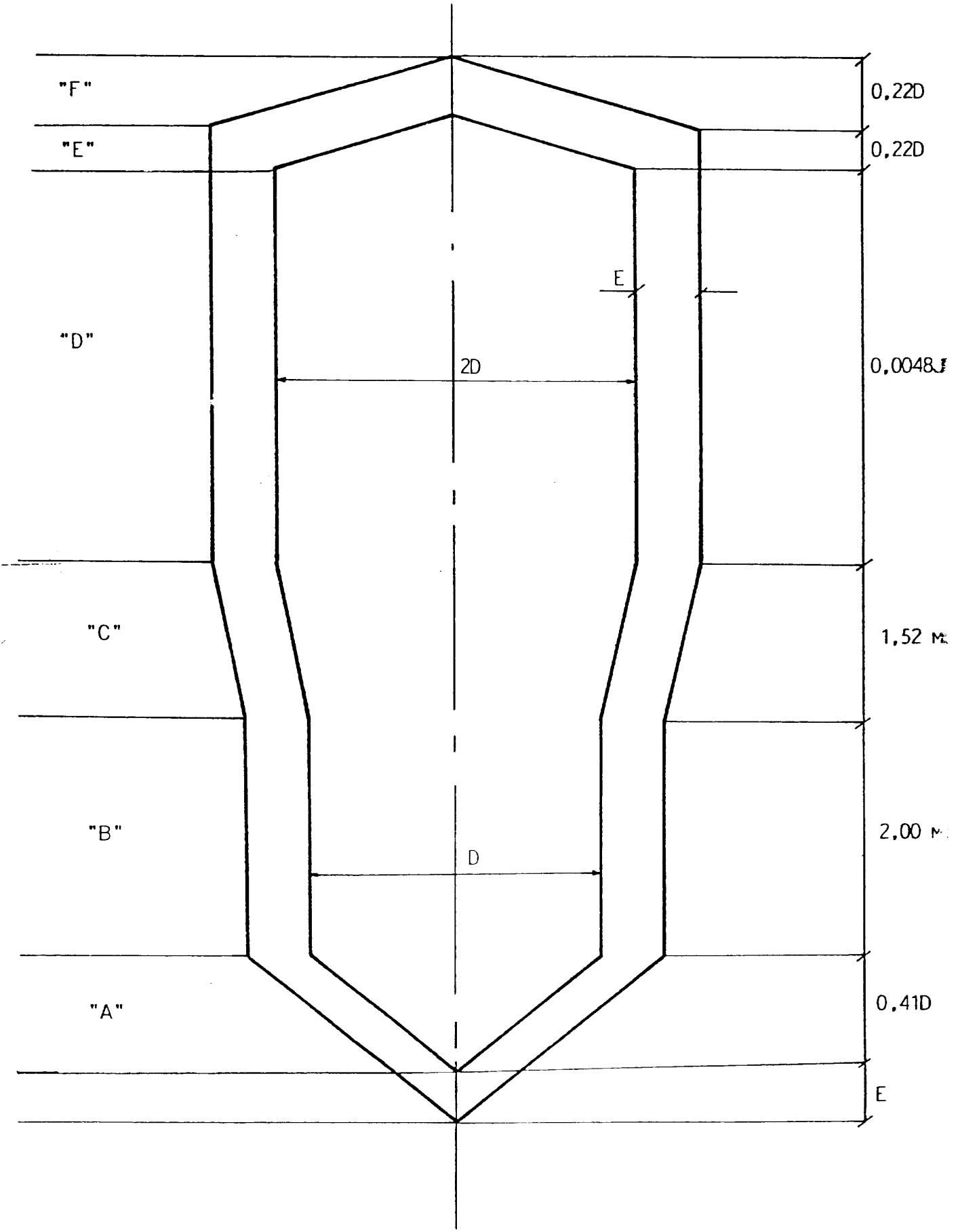
300+LBL 07
301 RDN
302 X+2
303 RCL IND 04
304 *
305 1
306 ST- 04
307 CLX
308 RCL IND 04
309 RCL 00
310 *
311 +
312 1
313 ST- 04
314 CLX
315 RCL IND 04
316 +
317 RTN
318+LBL 09
319 RCL 23
320 14.5
321 1/X
322 +
323 1/X
324 RCL 24
325 RCL 28
326 -
327 *
328 STO 01
329 RCL 29
330 *
331 CHS
332 RCL 24
333 +
334 STO 22
335 RCL 25
336 -
337 X+2
338 STO 21
339 RCL 22
340 STO 25
341 RCL 01
342 RCL 30
343 *
344 CHS
345 +
346 STO 22
347 RCL 26
348 -
349 X+2
350 ST+ 21
351 RCL 22
352 STO 26
353 RCL 01
354 RCL 31
355 *
356 CHS
357 +
358 STO 22
359 RCL 27
360 -

```

361 X+2
362 ST+ 21
363 RCL 22
364 STO 27
365 RCL 21
366 SQRT
367 RCL 32
368 X>Y?
369 GTO 10
370 GTO 08
371+LBL 10
372 FIX 1
373 BEEP
374 RCL 01
375 AON
376 "Q./M. CUA.="
377 ARCL X
378 AVIEW ----- Exh. Q
379 STOP
380 AOFF
381 FIX 0
382 RCL 33
383 *
384 AON
385 "Q. TOT.="
386 ARCL X
387 AVIEW ----- Exh. Qt
388 STOP
389 AOFF
390 RCL 06
391 /
392 1 E03
393 *
394 AON
395 "Q./TON.="
396 ARCL X
397 AVIEW ----- Exh. Qm
398 STOP
399 RCL 25
400 "T1="
401 ARCL X
402 AVIEW ----- Exh. t1
403 STOP
404 RCL 26
405 "T2="
406 ARCL X
407 AVIEW ----- Exh. t2
408 STOP
409 RCL 27
410 "T3="
411 ARCL X
412 AVIEW ----- Exh. t3
413 AOFF
414 END

```


AUXINI - *Investigación Aplicada*
SECCION AXIAL DEL HORNO DE FLUOSOLIDOS



APROVECHAMIENTO INTEGRAL DE PIRITAS
PLAN GENERAL

PROGRAMA CALFOR.- (HP 41)

Este programa calcula entalpías de formación de una mezcla de sustancias cuyas entalpías de formación se conocen.

Como entradas o salidas en el programa figuran:

N	número de comp.	s.d.
M_i	masa del comp. i	Kgmol
H_{fi}	entalp. de form. del comp. i	Kcal/Kgmol
M_m	masa de la mezcla	Kgmol
H_{fm}	entalp. de form. de la mezcla	Kcal/Kgmol
$H_{f(m)}$	id. id. id.	Kcal/ M_m Kgmol

--

- - USO - -

1º	Pulsar A	pide entr. N
2º	Entr. N y pulsar R/S	pide entr. M_1
3º	Entr. M_1 y pulsar R/S	pide entr. H_1
4º	Entr. H_1 y pulsar R/S	pide sucesiva y secuencialmente la entr. de los datos de los restantes comp.

Cuando ya ha entrado el último dato (H_{fN}) el programa comienza automáticamente el proceso de los datos y se detiene exhibiendo H_{fm} (en el visor HMD) y a continuación:

5º	Pulsar R/S	Exh. $H_{f(m)}$ (en el visor HMT)
----	------------	-----------------------------------

Quedan archivados:

M_m	en R ₀₅
H_{fm}	en R ₀₇
$H_{f(m)}$	en R ₀₆

PROGRAMA CALFOR.- (HP 41)

07:58 09.08	57 AVIEW -----Exh.H _f (HMO)
01*LBL "CALFOR"	58 STOP
02 STOP	59 FIX 0
03*LBL A	60 CLA
04 FIX 0	61 "HMT="
05 CLRG	62 ARCL 06
06 AON	63 AVIEW ----- Exh.H _f (m)(HMT)
07 CLA	64 ROFF
08 "1"	65 END
09 ASTO 02	
10 ROFF	
11 1	
12 STO 00	
13 AON	
14 "NO. COMP.?"	
15 ROFF	
16 PROMPT -----Entr. N	
17 STO 03	
18*LBL 01	
19 AON	
20 CLA	
21 "M--"	
22 ARCL 02	
23 "F?"	
24 ROFF	
25 PROMPT -----Entr. M _i	
26 STO 04	
27 ST+ 05 -----Arch. M _m	
28 AON	
29 CLX	
30 "H--"	
31 ARCL 02	
32 "F?"	
33 ROFF	
34 PROMPT -----Entr. H _f _i	
35 RCL 04	
36 *	
37 ST+ 06 ----- Arch. H _f (m)	
38 RCL 03	
39 RCL 00	
40 X=Y?	
41 GTO 02	
42 1	
43 ST+ 00	
44 RCL 00	
45 STO 02	
46 GTO 01	
47*LBL 02	
48 RCL 06	
49 RCL 05	
50 /	
51 STO 07 ----- Arch. H _f _m	
52 FIX 3	
53 AON	
54 CLA	
55 "HMO="	
56 ARCL 07	

APROVECHAMIENTO INTEGRAL DE PIRITAS
PLAN GENERAL

PROGRAMA PREVAP.--(HP 41)

Este programa calcula presiones de vapor de una sustancia conociendo las constantes de la ecuación:

$$\log p = A.T^{-1} + B \log T + C.T + D$$

cuyos valores suelen aparecer en diversas publicaciones (p.ej. Kubaschewski p.358). En una primera parte se introducen los valores de las constantes que el programa va pidiendo sucesivamente. En la segunda parte se calculan presiones de vapor para una determinada temperatura y en la tercera se calcula la masa de la sustancia en cuestión volatilizada cuando ella entra en contacto con una masa de gas inerte a la temperatura correspondiente a la presión de vapor calculada siendo la presión total 760 mm de Hg.

Las siguientes variables o parámetros figuran en como entradas o salidas en el programa:

A,B,C,D	constantes de la ec. citada	
T	temperatura absoluta	°K
t	id. Celsius	°C
p	presión de vapor	mm Hg
M _I	masa de gas inerte	mol
m	masa de sustancia evaporada	mol

- - USO - -

1º	Pulsar A	pide suces. los val. de A,B,C y D
2º	Pulsar B	Avisa "0" si temp.abs.
3º	Pulsar 0 si procede y a cont. R/S	Pide temp.
4º	ingresar T o t y pulsar R/S	Exh. p y arch en R ₀₂

Para calcular m:

1º	Pulsar C	Pide M _I
2º	Entr. M _I y pulsar R/S	Exh. m

Como queda dicho se pueden introducir temp. absolutas o Celsius para calcular presiones de vapor pero es necesario pulsar 0 cuando el programa lo indica si se van a usar temperaturas absolutas.

Tanto al calcular "p" como "m" no es necesario volver a pulsar B o C respectivamente si se desea hacer otro calculo con otros valores homogeneos con los anteriormente usados. Basta pulsar R/S para volver a los pasos 3º de B o 1º de C. Unicamente si se desea cambiar de escala de temperatura es necesario volver a pulsar B.

PROGRAMA PREVAP.-(HP 41)

```

16:02 21.00
01+LBL "PREVAP"
02 STOP
03+LBL A
04 CF 01
05 AON
06 "A-?"
07 AOFF
08 PROMPT ----- Entr. A
09 STO 01
10 AON
11 "B-?"
12 AOFF
13 PROMPT ----- Entr. B
14 STO 02
15 AON
16 "C-?"
17 AOFF
18 PROMPT ----- Entr. C
19 STO 03
20 AON
21 "D-?"
22 AOFF
23 PROMPT ----- Entr. D
24 STO 04
25 STOP
26+LBL B
27 1
28 AON
29 "0 SI T. ABS."
30 AOFF
31 PROMPT ----- Entr 0 si se van a usar temp. abs.
32 X=0?
33 SF 01
34+LBL 02
35 AON
36 "TEMP?"
37 AOFF
38 PROMPT ----- Entr T 6 t
39 FS? 01
40 GT0 01
41 273.1
42 +
43+LBL 01
44 STO 05
45 1/X
46 RCL 01
47 *
48 RCL 05
49 LOG
50 RCL 02
51 *
52 +
53 RCL 05
54 RCL 03
55 *
56 +
57 RCL 04
    
```

```
58 +  
59 101X  
60 STO 06 ----- Exh. p  
61 STOP  
62 GTO 02  
63+LBL C  
64 RDN  
65 "M.I.?"  
66 AOFF  
67 PROMPT ----- Entr. MI  
68 RCL 06  
69 *  
70 760  
71 RCL 06  
72 -  
73 / ----- Exh. m  
74 STOP  
75 GTO C  
76 END
```

AUXINI - *Investigación Aplicada*
 APROXIMACION DE FUNCIONES POR UN POLINOMIO DE 2º GRADO.
 DETERMINACION DE LAS CONSTANTES POR EL METODO DE GAUSS=

PROGRAMA GA-3.-(HP-41)

Calcula los valores de las constantes A,B,C en la ecuación:

$$y = A + B \cdot x + C \cdot x^2$$

a partir de una serie de N pares de valores de x,y conocidos,por el método de Gauss.

Figuran en el programa:

N	num. de puntos (x,y) conocidos	s.d.
x_i	valor de x para el punto i	cualquiera dim.
y_i	id. y id.	id.
A,B,C	las constantes indicadas	

- - USO - -

1º	Pulsar A	Pide N
2º	Entr. N y pulsar R/S	Pide x_1, y_1
3º	Pulsar y_1 ENTER x_1	Pide sucesiv.la entrada de los restantes puntos.

Cuando ya ha entrado el último (x_N, y_N) comienza automáticamente el proceso y se detiene exhibiendo A. Quedan almacenados:

A	en	R ₀₆
B	en	R ₀₇
C	en	R ₀₈

En la 2ª parte del programa se calculan los valores de y correspondientes a los de x que se especifiquen:

1º	Pulsar B	Pide x
2º	Entr. x y pulsar R/S	Exh. y

Para calcular otros valores de y basta pulsar R/S para volver al paso 1º sin pulsar de nuevo B.

AUXINI - *Investigación Aplicada*
APROXIMACIÓN DE FUNCIONES POR UN POLINOMIO DE 2º GRADO
DETERMINACION DE LAS CONSTANTES POR EL METODO DE GAUSS

PROGRAMA GA-3.-(HP-41)

```
21:34 10.08
01*LBL "GA-3"
02 STOP
03*LBL A
04 CLRG
05 FIX 0
06 RDN
07 CLA
08 "1"
09 ASTO 02
10 AOFF
11 1
12 STO 00
13 RDN
14 "NO. PUNT.?"
15 AOFF
16 PROMPT ----- Entr. N
17 STO 12
18*LBL 01
19 RDN
20 CLA
21 "PUNT."
22 ARCL 02
23 "1?"
24 AOFF
25 PROMPT ----- Entr. Yi, Xi
26 STO 04
27 ST+ 13
28 ENTER↑
29 *
30 ST+ 14
31 X<>Y
32 STO 05
33 ST+ 11
34 *
35 ST+ 17
36 RCL 04
37 3
38 Y↑X
39 ST+ 16
40 RCL 04
41 *
42 ST+ 10
43 RCL 04
44 RCL 05
45 *
46 ST+ 15
47 RCL 12
48 RCL 00
49 X=Y?
50 GTO 02
51 1
52 ST+ 00
53 RCL 00
54 STO 02
55 GTO 01
56*LBL 02
```


AUXINI - *Investigación Aplicada*

57 RCL 14
58 RCL 18
59 *
60 RCL 16
61 X+2
62 -
63 STO 06
64 RCL 12
65 *
66 RCL 13
67 RCL 18
68 *
69 RCL 14
70 RCL 16
71 *
72 -
73 STO 07
74 RCL 13
75 *
76 -
77 RCL 13
78 RCL 16
79 *
80 RCL 14
81 X+2
82 -
83 STO 08
84 RCL 14
85 *
86 +
87 STO 09
88 RCL 06
89 RCL 11
90 *
91 RCL 07
92 RCL 15
93 *
94 -
95 RCL 08
96 RCL 17
97 *
98 +
99 STO 03
100 RCL 15
101 RCL 18
102 *
103 RCL 16
104 RCL 17
105 *
106 -
107 RCL 12
108 *
109 RCL 11
110 RCL 18
111 *
112 RCL 14
113 RCL 17
114 *

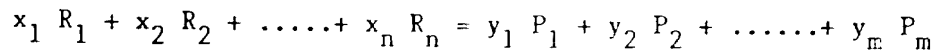
AUXINI - *Investigación Aplicada*

115 -	
116 RCL 13	
117 *	
118 -	
119 RCL 11	
120 RCL 16	
121 *	
122 RCL 14	
123 RCL 15	
124 *	
125 -	
126 RCL 14	
127 *	
128 +	
129 STO 10	
130 RCL 14	
131 RCL 17	
132 *	
133 RCL 15	
134 RCL 16	
135 *	
136 -	
137 RCL 12	
138 *	
139 RCL 13	
140 RCL 17	
141 *	
142 RCL 11	
143 RCL 16	
144 *	
145 -	
146 RCL 13	
147 *	
148 -	
149 RCL 13	
150 RCL 15	
151 *	
152 RCL 11	
153 RCL 14	
154 *	
155 -	
156 RCL 14	
157 *	
158 +	
159 RCL 09	
160 /	
161 STO 08 ----- Arch. C	
162 RCL 10	
163 RCL 09	
164 /	
165 STO 07 ----- Arch. B	
166 RCL 03	
167 RCL 09	
168 /	
169 STO 06 ----- Arch. A	
170 FIX 6	
171 STOP	
172+LBL B	
173 AON	
174 "X?"	
175 AOFF	
176 PROMPT ----- Entr. X	
177 STO 01	
178 X+2	
179 RCL 08	
180 *	
181 RCL 01	
182 RCL 07	
183 *	
184 +	
185 RCL 06	
186 +	
187 STOP ----- Exh. Y	
188 GTO B	
189 END	

APROVECHAMIENTO INTEGRAL DE PIRITAS
PLAN GENERAL

PROGRAMA K-REAC(HP 41)

Con este programa se calcula la energía libre y la constante de la reacción:



Si el calor molar del reactante o producto i es:

$$C_{p_i} = A_i + B_i T + C_i T^{-2} + D_i T^2$$

quedan definidos:

$$\Delta\Gamma_0 = \sum_1^m A_j y_j - \sum_1^n A_i x_i$$

$$\Delta\Gamma_1 = \sum_1^m B_j y_j - \sum_1^n B_i x_i$$

$$\Delta\Gamma_2 = \sum_1^m C_j y_j - \sum_1^n C_i x_i$$

$$\Delta\Gamma_3 = \sum_1^m D_j y_j - \sum_1^n D_i x_i$$

Por otra parte si el calor y la entropía de formación son respectivamente Hf_i y Sf_i para el reactante o producto i también quedan definidos:

$$\Delta H_{298,1} = \sum_1^m Hf_j y_j - \sum_1^n Hf_i x_i$$

$$\Delta S_{298,1} = \sum_1^m Sf_j y_j - \sum_1^n Sf_i x_i$$

Siendo además:

$$\Delta H_T = \Delta H_{298,1} + \Delta(H_T - H_{298,1})$$

$$\Delta S_T = \Delta S_{298,1} + \Delta(S_T - S_{298,1})$$

$$y \quad \Delta G = \Delta H_T - T \Delta S_T = -RT \ln K$$

quedan definidas también las constantes de la ecuación:

$$\Delta G = A + BT \ln T + CT + DT^2 + ET^{-1} + FT^3$$

y el valor de la constante:

$$K = e^{-\frac{\Delta G}{RT}}$$

Pulsando A.-

Calcula las constantes de la ecuación de ΔG . El programa pide primeramente el número de sustancias reactantes "n". Introducido este y pulsando R/S va pidiendo sucesivamente la entrada de los moles del reactante i (del 1 al n) seguido de las constantes A_i, B_i, C_i y D_i de la ecuación de calores molares y de las entalpías y entropías de formación siempre pulsando R/S después de cada entrada. Cuando han entrado todos los datos de todos los reactantes repite el ciclo refiriéndose a los productos y cuando todos estos han sido introducidos inicia automáticamente el cálculo de las constantes de la ecuación de ΔG , almacenaéndolas:

A en R_{10} , B en R_{11} , C en R_{12} , D en R_{13} , E en R_{14} y F en R_{15}

Pulsando B.-

Pide primeramente se decida si serán temperaturas Celsius o absolutas las que van a introducirse seguidamente, pulsando un 0 si van a ser absolutas. A continuación pide la temperatura y comienza el cálculo de ΔG que termina exhibiéndolo al mismo tiempo que lo almacena en R_{16} . Pulsando R/S a continuación exhibe el valor de K. Si se pulsa R/S a continuación vuelve a pedir temperatura (de la misma escala). Si se cambia de escala es necesario volver a pulsar B. De esta manera puede calcularse una serie de valores para K a diversas temperaturas con mas comodidad y brevedad.

PROGRAMA K-REAC(HP 41)

```
20:49 26.00
01*LBL "K-REAC"
02 STOP
03*LBL A ----- Inicia el cálculo de las const. de la ec. de  $\Delta G$ .
04 CLRG
05 CF 02
06 FIX 0
07 SF 01
08*LBL 03
09 1
10 STO 00
11 AON
12 FS? 01 ---
13 GTO 04
14 "NO. PROD.?"
15 GTO 05
16*LBL 04
17 "NO. REACT.?"
18*LBL 05
19 AOFF
20 PROMPT ----- Entr. de n ó m
21 STO 02
22*LBL 01
23 AON
24 CLA
25 FS? 01
26 GTO 04
27 "MOL. PROD."
28 GTO 05
29*LBL 04
30 "MOL. REACT."
31*LBL 05
32 APCL 00
33 "F?"
34 AOFF
35 PROMPT ----- Entr. de  $x_i$  ó  $y_j$ 
36 STO 03
37 AON
38 CLA
39 "A. -"
40 APCL 00
41 "F?"
42 AOFF
43 PROMPT ----- Entr. de  $A_i$  ó  $A_j$ 
44 *
45 FS? 01
46 CHS
47 ST+ 04
48 AON
49 CLA
50 "B. -"
51 APCL 00
52 "F?"
```

```

53 AOFF
54 PROMPT ----- Entr. de Bi ó Bj
55 RCL 03
56 *
57 FS? 01
58 CHS
59 ST+ 05
60 AON
61 CLA
62 "C.-"
63 ARCL 00
64 "F?"
65 AOFF
66 PROMPT ----- Entr. de Ci ó Cj
67 RCL 03
68 *
69 FS? 01
70 CHS
71 ST+ 06
72 AON
73 CLA
74 "D.-"
75 ARCL 00
76 "F?"
77 AOFF
78 PROMPT ----- Entr. de Di ó Dj
79 RCL 03
80 *
81 FS? 01
82 CHS
83 ST+ 07
84 AON
85 "HF-"
86 ARCL 00
87 "F?"
88 AOFF
89 PROMPT ----- Entr. de Hfi ó Hfj
90 RCL 03
91 *
92 FS? 01
93 CHS
94 ST+ 08
95 AON
96 "SF-"
97 ARCL 00
98 "F?"
99 AOFF
100 PROMPT ----- Entr. de Sfi ó Sfj
101 RCL 03
102 *
103 FS? 01
104 CHS
105 ST+ 09
106 DSE 02
107 GTO 06
108 FS?C 02
109 GTO 07
110 CF 01
111 SF 02
112 GTO 03
113+LBL 06
114 1

```

115 ST+ 00
116 GT0 01
117+LBL 07
118 RCL 00
119 RCL 04
120 290.1
121 *
122 -
123 290.1
124 X12
125 2
126 /
127 RCL 05
128 *
129 -
130 RCL 06
131 290.1
132 /
133 +
134 290.1
135 3
136 Y1X
137 3
138 /
139 RCL 07
140 *
141 -
142 STO 10
143 RCL 04
144 CHS
145 STO 11
146 RCL 09
147 CHS
148 RCL 04
149 +
150 RCL 04
151 290.1
152 LN
153 *
154 +
155 RCL 05
156 290.1
157 *
158 +
159 RCL 06
160 290.1
161 X12
162 1/X
163 2
164 /
165 *
166 -
167 RCL 07
168 290.1
169 X12
170 *
171 2
172 /
173 +
174 STO 12
175 RCL 05
176 2
177 /

AUXINI - *Investigación Aplicada*

```

178 RCL 05
179 -
180 STO 13
181 RCL 06
182 2
183 /
184 RCL 06
185 -
186 STO 14
187 RCL 07
188 3
189 /
190 RCL 07
191 2
192 /
193 -
194 STO 15
195 STOP
196*LBL B ----- Inicia el cálculo de ΔG y K
197 1
198 FIX 3
199 AON
200 CLA
201 *0 SI TEMP. ABS.*
202 AOFF
203 PROMPT ----- Entr. "0" si se usan temp abs. °K
204 X=0?
205 SF 01
206*LBL A9
207 AON
208 CLA
209 *TEMP.?"
210 AOFF
211 PROMPT ----- Entr T ó t
212 FS? 01
213 GTO 06
214 273.1
215 +
216*LBL 08
217 STO 00
218 3
219 Y1X
220 RCL 15
221 *
222 RCL 14
223 RCL 00
224 /
225 +
226 RCL 00
227 X12
228 RCL 13
229 *
230 +
231 RCL 00
232 RCL 12
233 *
234 +
235 RCL 00
236 RCL 11
237 *
238 RCL 00
239 LN
240 *

```



```
241 +
242 RCL 10
243 +
244 STO 16
245 RDN
246 *DG=
247 RCCL X
248 RVIEW ----- Exh. ΔG
249 STOP
250 RCL 00
251 /
252 1.9872
253 /
254 CHS
255 ETX
256 RDN
257 *K=
258 RCCL X
259 RVIEW ----- Exh. K
260 STOP
261 ROFF
262 GTO 09
263 END
⋮
```