



1  
24.

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO**

**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES  
CUAUTITLAN**

**“Análisis de Variables de Diseño, y Algoritmos de Ordenamiento de Precedencia de Sistemas de Ecuaciones y de los Cálculos de Recirculación en el Diseño de Procesos Químicos.”**

**T E S I S**

**QUE PARA OBTENER EL TITULO DE  
INGENIERO QUIMICO  
P R E S E N T A  
JOSE CARMEN BARBOZA GONZALEZ  
DIRECTOR DE TESIS  
CUAUTITLAN, IZCALLI**

**1984**



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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

# TESIS CON FALLA DE ORIGEN

- C O N T E N I D O -

- I. INTRODUCCION
- II. GENERALIDADES
- III. DETERMINACION DEL NUMERO DE GRADOS DE LIBERTAD
- IV. ALGORITMO DE SELECCION DE LAS VARIABLES DE DISEÑO Y ORDENAMIENTO DE LAS ECUACIONES.
- V. DETECCION DE CICLOS
- VI. ORDENAMIENTO DE LOS DIAGRAMAS DE FLUJO DE PROCESOS
- VII. ORDENAMIENTO DE LOS CALCULOS EN RECICLO
- VIII. METODOS DE CONVERGENCIA
- IX. EJEMPLO DE APLICACION
- X. CONCLUSIONES
- XI. BIBLIOGRAFIA.

## INTRODUCCION

## I. INTRODUCCION

La industria química se encuentra en una fase de desarrollo y día con día se proponen nuevos procesos o modificaciones a los ya existentes. Es por ello que el objetivo de esta tesis, es proporcionar al Ingeniero de Procesos una técnica moderna de obtener manualmente la solución eficiente de problemas en el diseño de sistemas de procesos químicos, y que puede ser utilizada para formular programas de computadora por un especialista en computación.

El problema que el ingeniero debe resolver en diagramas de flujo de procesos, es encontrar los valores de todas las variables involucradas en el modelo matemático, el cual está constituido por un conjunto de ecuaciones que reproducen en forma aproximada el comportamiento de un equipo, o conjunto de equipos y unidades.

Puesto que en todos los diseños, el problema involucra más variables que ecuaciones; esto es, los valores de ciertas variables no están especificados. Estas variables son libres de ajustar, ya sea que lo haga el usuario o mediante un esquema de optimización, para lograr un proceso más rentable.

El primer paso de este problema es analizar e identificar el número de las variables libres de diseño (grados de libertad económicos) para minimizar la tarea de cálculo asociada con el análisis del proceso.

El segundo paso, es la determinación de un procedimiento de solución eficiente por el cual puedan resolverse las ecuaciones que comprenden a todas las variables del modelo

matemático del proceso.

Dos puntos de vista pueden tomarse para resolver el modelo matemático, y son los siguientes:

1.- PUNTO DE VISTA DE ECUACIONES ( Tratamiento simultáneo):

Aquí el problema es derivar automáticamente, un procedimiento de solución efectivo para una serie de ecuaciones algebraicas. Este procedimiento consta de ,

- 1.a) Asignación de variables de diseño,
- 1.b) Orden de precedencia de las ecuaciones,
- 1.c) y para grupos de ecuaciones, determinación de un - efectivo esquema de solución iterativo.

2.- PUNTO DE VISTA DE SUBROUTINAS ( Secuencia de cálculo modular):

El principal punto de vista para resolver el sistema de ecuaciones tomado por la mayoría de los sistemas de simulación de procesos consiste en formar un conjunto de subrutinas, una para cada equipo ó unidad del proceso, las cuales coleccionan las ecuaciones que definen su equipo ó unidad correspondiente.

Este punto de vista, contiene no sólo las ecuaciones , sino también un procedimiento de solución. Una selección común para las variables de diseño, es considerar a éstas como las variables de las corrientes de entrada y los parámetros de diseño de equipo, mientras que las variables de las corrientes de salida son las variables de estado ó dependientes.

Resolviendo un problema de simulación usando éste pun-

to de vista se escoge un orden propio en el que el programa ejecutivo llame las subrutinas. Este procedimiento puede tener dos distintos aspectos:

El primero, ordenamiento de precedencia, que incluye encontrar una agrupación y un ordenamiento de los bloques a calcular, tal que cada grupo requiere entrada de información sólo desde grupos que ocurren anteriormente en el ordenamiento. Si un grupo comprende más que un bloque de cálculo, -- existe una información de reciclo dentro de él; entonces, el segundo aspecto, es determinar cómo ejecutar mejor los cálculos para el grupo, puesto que se requiere algún procedimiento iterativo

Después de establecida la secuencia de cálculo y las corrientes que deben suponerse para el cálculo de recirculaciones, se presenta la dificultad de cómo volver a estimar el valor de las variables de una cierta corriente para lograr que el valor calculado corresponda con el supuesto, es decir, que converja.

Al final de ésta tesis se ilustra un ejemplo de aplicación de la técnica.



**GENERALIDADES**

## II. GENERALIDADES

La solución del diseño de cualquier proceso químico es posible si el número de ecuaciones es igual al número de variables. Sea la ecuación

$$N_i = N_v - N_c \dots\dots\dots (1)$$

donde,  $N_v$  es el número de variables desconocidas envueltas en el proceso en cuestión;  $N_c$ , es el número de relaciones matemáticas independientes; y  $N_i$ , es conocido como los grados de libertad ó el número de variables de diseño. Esto es, el número de variables que el diseñador debe especificar para definir una única solución (operación) del proceso.

Las variables  $N_i$  que más le interesan al diseñador son las siguientes:

- Composiciones de las corrientes de materia
- Temperatura
- Presión
- Velocidad de flujo
- Repetición de variables,  $N_r$ .

Las primeras tres son variables intensivas; esto es, que dichas variables son independientes de la cantidad de materia presente. La cuarta variable de la lista es extensiva; o sea, que depende de la cantidad de materia presente, ya que éstas duplican su valor si el sistema se duplica, y entre ellas también se incluyen el volumen total, la entalpía total, y la masa total.

La quinta no es una variable ni intensiva ni extensiva ésta es único grado de libertad que el diseñador utiliza --

cuando él especifica cuantas veces estará repetido un elemento (equipo) en una unidad. Por ejemplo, la sección de una columna de destilación compuesta de una serie de etapas de equilibrio que cuando el diseñador especifica el número de etapas que contiene la sección, él utiliza el único grado de libertad representado por la variable de repetición ( $N_r=1$ ). Pero si la columna de destilación contiene dos secciones, - una de rectificación y una de agotamiento, debe especificar el número de etapas en cada sección y las variables de repetición como secciones haya, esto es,  $N_r = 2$ .

Las diferentes relaciones matemáticas  $N_c$ , para evitar la omisión y/o repetición de ellas, se dividen en los siguientes tipos:

- Balances de materia
- Balances de energía
- Relaciones inherentes ó identidades
- Relaciones de distribución de fase
- Relaciones de equilibrio químico

Las Ecuaciones de Balance de Materia.

Son los  $c$  balances escritos para los componentes presentes en el sistema (para mezclas no reaccionantes). Otra alternativa es escribir  $(c-1)$  balances de materia por componente y un balance de materia total.

De acuerdo a la ley de conservación de materia, y al sistema estacionario con  $S$  corrientes de materia, de una sola fase, mostrado en la figura (1), se tienen,

$$\sum_{i=1}^S F_i x_{ij} = 0 \dots\dots\dots (2)$$

o sea,  $c$  balances de materia por componente;

Un balance de materia total:

$$\sum_{i=1}^S F_i = 0 \dots\dots\dots (3)$$

y  $S$  sumatorias de composición:

$$\sum_{j=1}^c x_{ij} = 1.0 \dots\dots\dots (4)$$

donde,  $i=1,2,\dots,S$  corrientes de materia  
 $j=1,2,\dots,c$  componentes

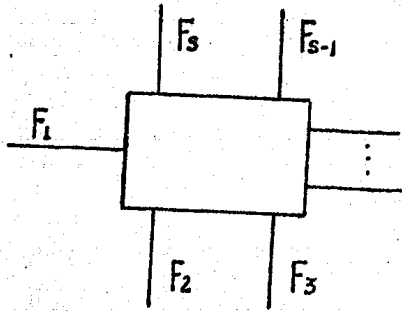


Fig. 1. Sistema en estado estacionario con  $S$  corrientes de materia.

Las ecuaciones de Balance de Energía.

De acuerdo a la ley de conservación de la energía, para un sistema dado un balance de energía es aplicado sumando todas las energías asociadas con las corrientes de materia de salida y substrayendo de éstas, las energías asociadas con las corrientes de materia de entrada, y ecuacionando éstas con la energía abastecida al sistema desde sus alrededores. La ley de conservación de la energía es resumida en la forma siguiente:

$$\sum_{i=1}^S F_i (H + Zg/s_c + V^2/2g_c + s)_i = Q - W + \epsilon \dots\dots\dots(5)$$

Los efectos de posición, movimiento, superficie específica, y eléctrico de las unidades son consideradas constantes. Por lo que la ecuación (5) se reduce básicamente a la siguiente

$$\sum_{i=1}^S F_i H_i = Q - W \dots\dots\dots(6)$$

Las Relaciones Inherentes ó Identidades.

Son usualmente el resultado de definiciones y toman la forma de identidades entre dos o más variables que ayudan a definir los balances de materia y de energía. Entre las más comunes se encuentran las de,

S<sub>T</sub> corrientes de materia con temperaturas iguales, que producen (S<sub>T</sub>-1) igualdades de temperaturas;

S<sub>P</sub> corrientes de materia con presiones iguales, produciendo (S<sub>P</sub>-1) igualdades de presiones;

S<sub>F</sub> corrientes con flujo de materia idéntico, que producen (S<sub>F</sub>-1) igualdades;

Y, S<sub>X</sub>(c-1) corrientes de materia con composiciones iguales,

que producen  $(S_x - 1)(c - 1)$  igualdades o ecuaciones.

Las Relaciones de Distribución de Fase.

En general, si todos los componentes existen en todas las fases, el número de ecuaciones independientes debido a los fenómenos de distribución, será  $c(\phi - 1)$ . Donde  $\phi$ , es el número de fases.

Relaciones de Equilibrio Químico.

En sistemas reactivos químicamente, los diferentes reactivos químicos están relacionados por ecuaciones de equilibrio químico. El número de tales relaciones es igual al número mínimo de ecuaciones estequiométricas ( $x$ ) que deben escribirse para formar todas las especies químicas asumidas presentes de los componentes independientes selectos.

De acuerdo a la diferencia de variables y ecuaciones que se obtenga, se puede caer en cualquiera de los tres casos siguientes:

CASO I :  $N_v < N_c$

Cuando hay mas ecuaciones de diseño que variables independientes, el diseño del problema no está bien formulado, y generalmente no es posible encontrar los valores para todas las variables las cuales satisfacen las ecuaciones de diseño. La formulación matemática, la naturaleza física, o ambas, son dudosas.

CASO II :  $N_v = N_c$

El sistema está completamente definido, y sólo una solución es posible.

### CASO III : $N_v > N_c$

Cuando el problema de diseño bien formulado contiene más variables que ecuaciones de diseño, existen variables en el diseño cuyos valores no están especificados. Estas variables pueden asumir un número de valores, ofreciendo así, alternativas condiciones de operación. La existencia de tales alternativas es el distintivo esencial de un problema de optimización.

En un problema práctico, los grados de libertad son asumidos en dos formas:

1.- Ciertas variables son asignadas con valores definidos que permiten una conexión entre el proceso y sus alrededores; por ejemplo, la temperatura del enfriamiento requerido por un proceso, deberá ser fijado en base a la temperatura disponible del agua de enfriamiento.

2.- Los grados de libertad restantes, son asumidos en la selección de variables que maximicen la rentabilidad del proceso, mediante algoritmos disponibles en éste trabajo.

**DETERMINACION DEL NUMERO DE GRADOS DE LIBERTAD**



### III. DETERMINACION DEL NUMERO DE GRADOS DE LIBERTAD

Un elemento es definido como una parte de una unidad más compleja. La unidad puede ser toda o parte del proceso completo. En éste capítulo, la estrategia consiste en analizar los elementos y unidades típicas, y determinar el número de grados de libertad asociados con cada uno, y en un proceso químico también.

#### ANALISIS DE ELEMENTOS

Corriente de materia homogénea simple. Es el elemento más simple que el Ingeniero de procesos debe diseñar. Definiendo una corriente de materia como el flujo de materia entre dos elementos en un diagrama de flujo. Aunque las variables normalmente asociadas con una corriente son su temperatura, presión, flujo total, fracciones mol, fracciones de fase, entalpía total, entalpías de fase, etc., las variables necesarias para fijar completamente la corriente si se considera que existe equilibrio químico y de fases, sin contar las ecuaciones y variables, son las siguientes: (figura 2)

#### Variables independientes

composiciones independientes .....	c-1
Temperatura .....	1
Presión .....	1
Flujo total .....	1

obteniendose un total de  $c+2$  variables.0 en su defecto,

Variables independientes:

Temperatura .....	1
Presión .....	1
Flujos individuales de los componentes ....	c
<hr/>	
TOTAL=	c+2

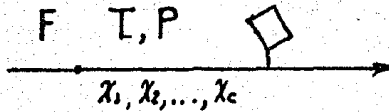


Fig. 2. Una corriente de materia.

Debe notarse que si se toman en cuenta las  $c$  composiciones, y no las  $c-1$  como se efectuó, entonces se tiene que incluir una ecuación independiente adicional:

$$\sum_{j=1}^c x_j = 1.0$$

Una vez que se han especificado éstas  $c+2$  variables, - la corriente está totalmente definida.

Puesto que cada corriente de materia , ya sea que contenga una  $\delta$  más de una fase,  $\delta$  que provenga después de una

reacción química, contribuye con  $c+2$  variables al elemento analizado. Se asume que las corrientes de cualquier elemento están a la misma presión y temperatura de tal elemento; esto es, antes de que exista la oportunidad de que ocurran cambios de presión y/o temperatura. Y las corrientes de entrada de materia generalmente son independientes de las condiciones del elemento, o sea, tales corrientes son especificadas antes de entrar a los elementos.

Por otra parte, una corriente de energía, ya sea calorífica, mecánica, etc., contribuye con una sola variable (parámetro de diseño), que se considera también especificada antes de entrara un elemento determinado.

En la tabla 1, se da el análisis del número de grados de libertad de los elementos típicos.

ANALISIS DE UNIDADES Y SISTEMAS:

Una unidad es definida como una combinación de elementos. Por definición,

$$N_v = N_i + N_r \dots\dots\dots(7)$$

$$N_i = N_v - N_c \dots\dots\dots(8)$$

la ecuación (7) describe el número total de variables independientes de los elementos que componen la unidad, más  $N_r$  que describe la libertad de escoger el número de veces que algún elemento puede repetirse. La variable  $N_r$  no es igual al número de tales repeticiones, sino que, representa el único grado de libertad con el cual el número de tales re-

peticiones puede escogerse. Aquí, el superíndice  $u$  se refiere a la unidad, y el superíndice  $e$  se refiere al elemento.

$N_c$  se refiere a las nuevas relaciones de diseño que surgen cuando los elementos se combinan; esto es,  $N_c^u$  no incluye alguna de las ecuaciones de diseño consideradas en el cálculo de las  $N_i^e$ 's para los diferentes elementos. Estas nuevas ecuaciones,  $N_c^u$ , son las identidades de las corrientes que existen entre dos elementos interconectados por tales corrientes. Puesto que las  $(c+2)$  variables de las intercorrientes fueron contadas en cada uno de los elementos cuando su respectivo  $N_i^e$  fué calculado. Por consiguiente,  $(c+2)$  nuevas ecuaciones deben considerarse para cada intercorriente en la combinación de los elementos para evitar redundancia de variables.

Para ilustrar el procedimiento considere la columna -- de absorción (ó extracción), mostrada en la figura 18, que -- consiste de una serie de etapas simples de equilibrio.

En una columna de  $n$  platos ideales se tiene la libertad de escoger el número de platos, más los grados de libertad de cada plato, menos los grados de libertad de las intercorrientes de entre los platos.

La especificación de  $n$  comprende un sólo grado de libertad, y  $N_r = 1$ .

El número total de variables calculado por la ecuación (7), es

$$N_V^u = n(2c+6)+1$$

puesto que  $N_i^e = 2c+6$ , para una etapa de equilibrio simple. Puesto que hay  $2(n-1)$  intercorrientes, por lo tanto,

$$N_c^u = 2(n-1)(c+2)$$

nuevas identidades (no contadas previamente) entran en exis

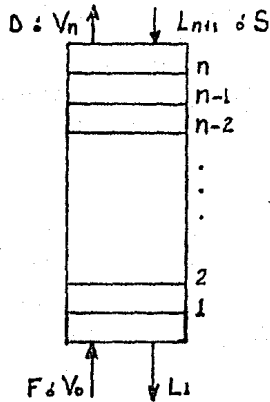


Fig. 18. Unidad simple de absorción ó extracción.

tencia cuando se combinan estas  $n$  etapas simples de equilibrio.

Así, los grados de libertad disponibles al diseñador, -- calculados por la ecuación (8), son :

$$N_i = (n(2c+6)+1) - (2(n-1)(c+2)) = 2c+2n+5$$

Especificaciones:

Presión en cada etapa .....	$n$
Fuga de calor en cada etapa .....	$n$
$V_o$ ó $F$ .....	$c+2$
$L_{n+1}$ ó $S$ .....	$c+2$
Número de etapas .....	$1$

---

Total=  $2n+2c+5$

Para una columna de destilación convencional, como la mostrada en la figura 19, es deseable definir precisamente los elementos que componen a la unidad, las intercorrientes entre los elementos, y las corrientes que entran y salen del sistema como un todo.

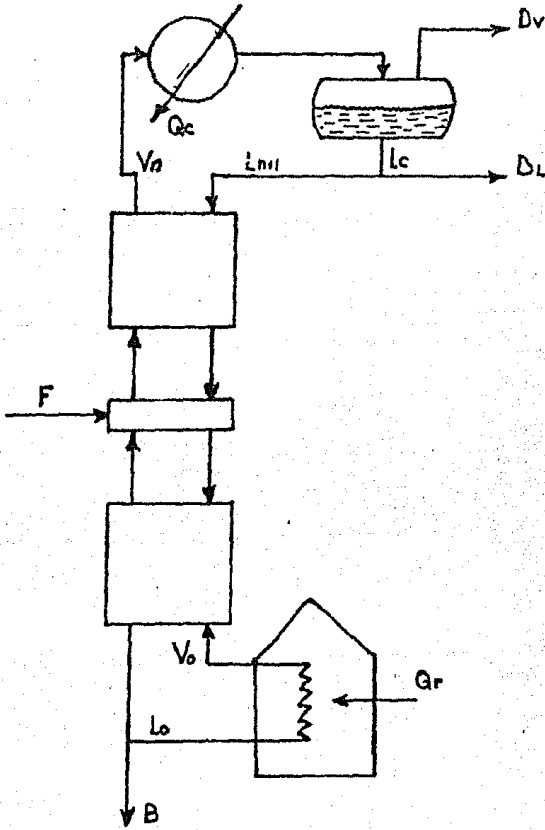


Fig. 19. Columna de destilación con alimentación intermedia.

La presente unidad puede descomponerse en los siguientes elementos:

Elemento	Ni <sup>o</sup>
1 plato de alimentación .....	3c+8
2 divisores de corriente .....	2(c+5)
2 contactores múltiples .....	(2n <sub>1</sub> +2c+5)+(2n <sub>2</sub> +2c+5)
1 condensador parcial .....	c+4
1 rehervidor total .....	c+4

---

$$Ni^o = 2(n_1+n_2) + 11c + 36$$

Puesto que se tienen 10 intercorrientes,

$$Nc^u = 10(c+2) = 10c+20 \text{ ,y}$$

$$Nr = 0$$

$$\text{así, } Ni^u = Nv^u - Nc^u = 2(n_1+n_2) + c + 16$$

En la tabla 2 se da el análisis de algunas unidades de separación de procesos.

Tabla 1.

ELEMENTO		Mezclador	Divisor	Separador flash	Plato teórico	Plato de alimentación
Número de corrientes	1 fase	3	3	2	4	5
	2 fases	0	0	1	0	0
Número de variables	1 fase	$3(c+2)$	$3(c+2)$	$2(c+2)$	$4(c+2)$	$5(c+2)$
	2 fases	0	0	$c+2$	0	0
	Q	1	1	0	1	1
$N_V^o$		$3c+7$	$3c+7$	$3c+6$	$4c+9$	$5c+11$
Balances de materia		c	c	c	c	c
Balance de calor		1	1	1	1	1
Relaciones de equilibrio		—	—	c	c	c
Ecuaciones inherentes		—	$(c+1)$	2	2	2
$N_C^o$		$c+1$	$2c+2$	$2c+3$	$2c+3$	$2c+3$
$N_I^o = N_V^o - N_C^o$		$2c+6$	$c+5$	$c+3$	$2c+6$	$2c+7$



Tabla 1. Continuación.

ELEMENTO		Plato con salida -- lateral	Condensador y rehervidor total	Condensador y rehervidor parcial	Reactor químico
Número de corrientes	1 fase	5	2	3	2
	2 fases	0	0	0	0
Número de variables	1 fase	$5(c+2)$	$2(c+2)$	$3(c+2)$	$2(c+2)$
	2 fases	0	0	0	0
	Q	1	1	1	1
	P	--	--	--	1
	$NV^e$	$5c+11$	$2c+5$	$3c+7$	$2c+6+r$
Balances de materia		c	c	c	c
Balance de calor		1	1	1	1
Relaciones de equilibrio		c	--	0	--
Ecuaciones inherentes		$c+3$	--	2	1
$NC^g$		$3c+4$	$c+1$	$2c+3$	$c+2$
$Ni^e = NV^e - NC^g$		$2c+7$	$c+4$	$c+4$	$c+r+4$

Tabla 1. Continuación.

ELEMENTO		Intercambiador de calor	Condensador- Rehervidor	Condensador total con producto de dos fases	Bomba, válvula, calentador, y enfriador.
Número de 1 fase		4	4	1	2
corrientes 2 fases		0	0	1	0
Número de variables	1 fase	$4(c+2)$	$4(c+2)$	$c+2$	$2(c+2)$
	2 fases	0	0	$c+2$	0
	Q	1	1	1	1
	W ó P	0	0	0	1
	$N_V^o$	$4c+9$	$4c+9$	$2c+5$	$2c+5$
Balances de materia		2c	2c	c	c
Balance de calor		1	1	1	1
Relaciones inherentes		—	2	—	—
$N_c^o$		$2c+1$	$2c+3$	$c+1$	$c+1$
$N_i^o = N_V^o - N_c^o$		$2c+8$	$2c+6$	$c+4$	$c+4$

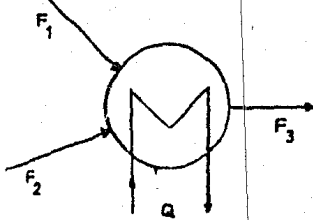


Fig. 3 Mezclador de corrientes.

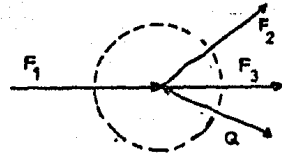


Fig. 4 Divisor de corriente.

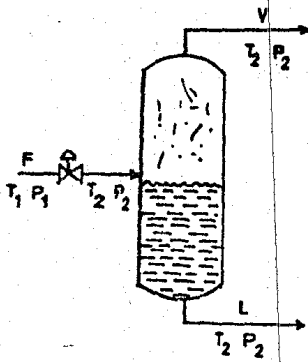


Fig. 5. Separador flash.

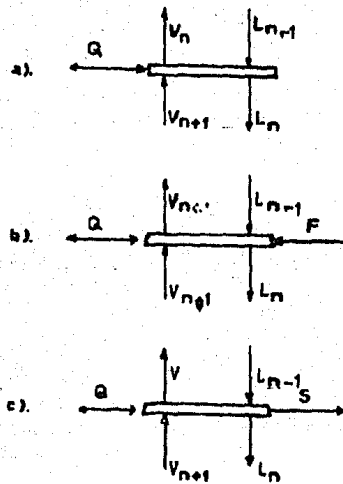


Fig. 6. a). Plato teórico.  
 b). Plato de alimentación.  
 c). Plato con corriente de salida lateral.

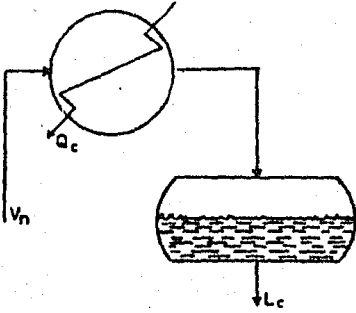


Fig 7 Condensador total

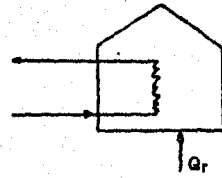


Fig 8. Rehervidor total

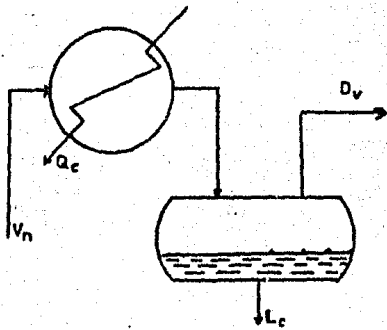


Fig.9. Condensador parcial.

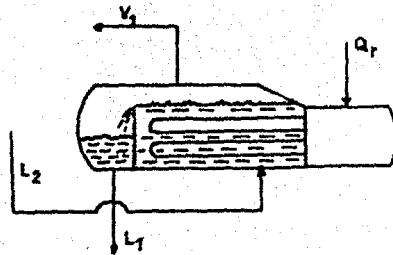


Fig.10. Rehervidor parcial.

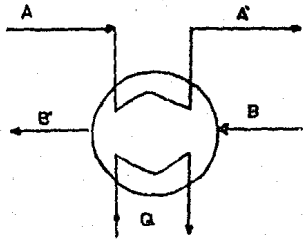


Fig. 11. Intercambiador de calor

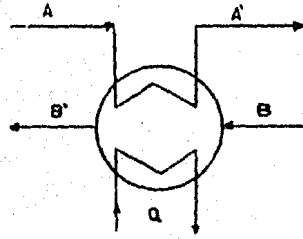


Fig. 12. Condensador- Rehervidor.

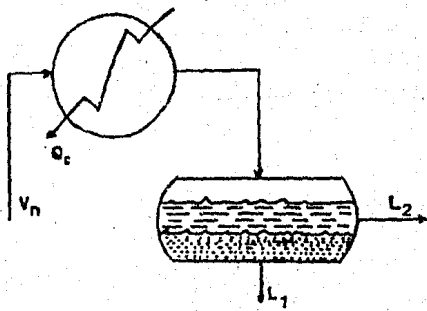


Fig. 13. Condensador total con producto de dos fases.

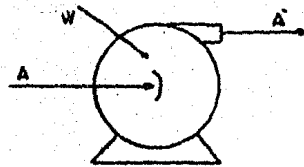


Fig. 14. Bomba.

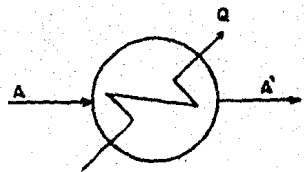


Fig. 15. Calentador

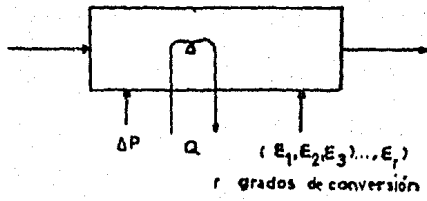


Fig. 16. Reactor químico.

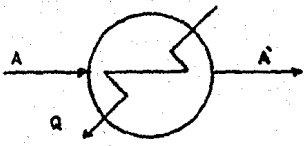


Fig. 17. Enfriador.

Tabla 2.

Tipo de unidad	$N_I^H = N_V^H - N_C^H$	$N_V^H = N_I^C + N_r$	$N_C^H$
Unidad simple de extracción ó absorción	$2n+2c+5$	$n(2c+6)+1$	$2(n-1)(c+2)$
Unidad de extracción con dos alimentaciones	$2n+3c+8$	$2n+7c+16$	$4(c+2)$
Unidad de destilación con una alimentación, un condensador total, y un rehervidor parcial	$2n+c+9$	$2n+10c+27$	$9(c+2)$
Unidad de destilación con una alimentación, un condensador parcial, y un rehervidor total	$2n+c+14$	$2n+11c+34$	$10(c+2)$
Columna de destilación con una alimentación, una corriente lateral de salida, condensador total, y rehervidor parcial	$2n+c+11$	$2n+14c+37$	$13(c+2)$
Columnas de destilación en serie	$2(n_1+n_2+n_3+n_4)+c+30$	$2(n_1+n_2+n_3+n_4)+2c+32$	$c+2$

Tabla 2 . Continuación .

Tipo de unidad	$N_i^u = N_V^u - N_C^u$	$N_V^u = N_i^u + N_r$	$N_C^u$
Columnas de destilación azeotrópica gemelas	$2(n_1+n_2)+c+17$	$2(n_1+n_2)+16c+47$	$15(c+2)$
Columnas de destilación azeotrópica binaria	$2(n_1+n_2)+c+13$	$2(n_1+n_2)+10c+31$	$9(c+2)$
Ciclo absorción-desorción (2 presiones; 1 temperatura)	$2(n_1+n_2)+2c+8$	$2(n_1+n_2)+5c+14$	$3(c+2)$
Ciclo absorción-desorción (2 presiones; 2 temperaturas)	$2(n_1+n_2)+2c+16$	$2(n_1+n_2)+9c+30$	$5(c+2)$
Columna de destilación batch con n platos, un condensador total, y un rehervidor total	$2n+8$	$2n+5c+18$	$5(c+2)$

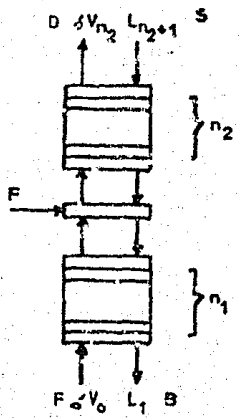


Fig.20. Unidad de absorción o extracción con dos alimentaciones.

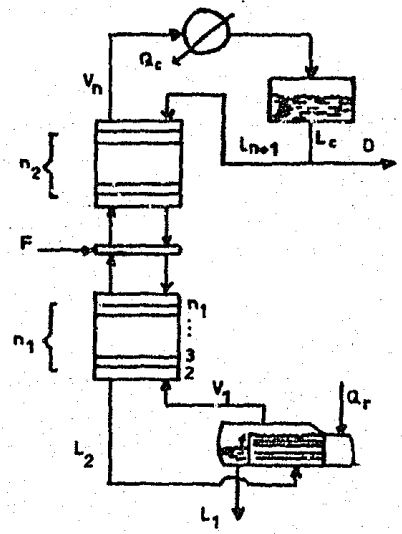


Fig.21. Columna de destilación con una alimentación un condensador total y un reboiler parcial.

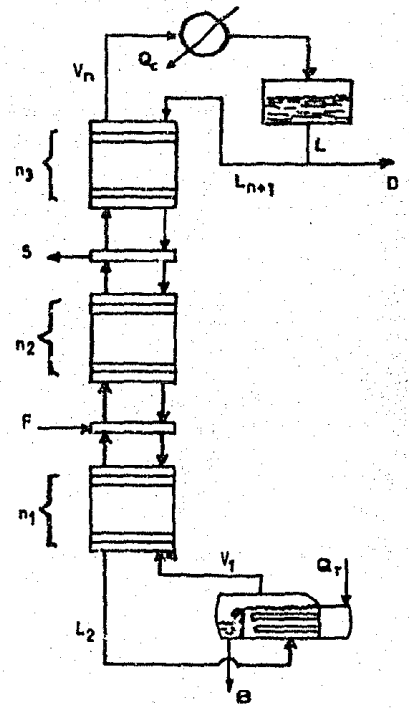


Fig. 22. Columna de destilación con una alimentación una salida lateral condensador total y reboiler parcial.



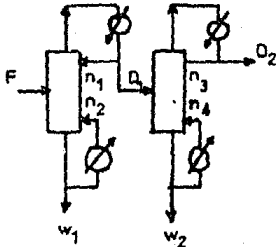


Fig. 23. Columnas de destilación en serie.

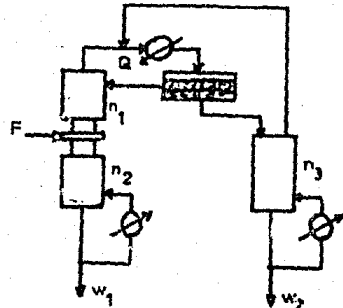


Fig. 24. Columnas de destilación azeotrópica gemelas.

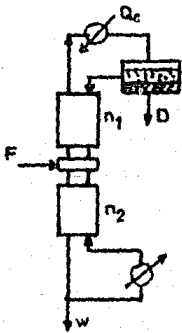


Fig. 25. Columna de destilación azeotrópica binaria

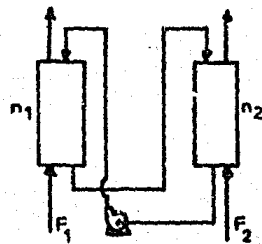


Fig. 26. Ciclo absorción-desorción (dos presiones—una temperatura).

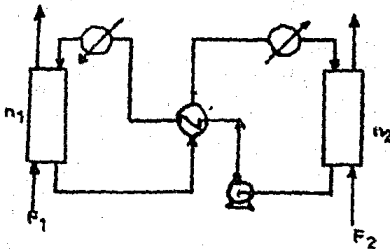


Fig. 27. Ciclo absorción-desorción (2 Presiones - 2 Temperaturas)

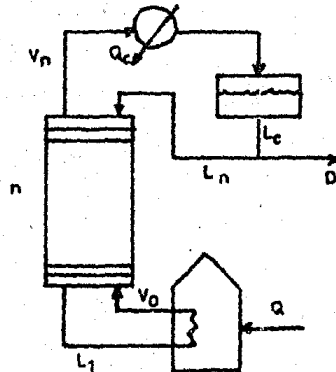


Fig. 28. Destilador batch.

ALGORITMO DE SELECCION DE LAS VARIABLES DE DISEÑO

Y ORDENAMIENTO DE PRECEDENCIA DE LAS ECUACIONES

[V. ALGORITMO DE SELECCION DE LAS VARIABLES DE DISEÑO Y ORDENAMIENTO DE PRECEDENCIA DE LAS ECUACIONES.

Después de haber definido un diagrama de flujo factible de un proceso, el Ingeniero de diseño se enfrenta con la tarea de determinar una estrategia computacional para ordenar y ejecutar los cálculos del proceso.

Es característica de todos los problemas de diseño que hay más variables desconocidas que relaciones matemáticas - que describen el modelo matemático del proceso, por lo que  $N_v - N_c$  grados de libertad deben especificarse antes de ejecutar el procedimiento de solución; esto es, antes de procurar alguna solución de la serie de ecuaciones, tal serie de ecuaciones debe reducirse a un sistema de  $N_c$  ecuaciones y  $N_c$  variables. Para esto se han desarrollado varios algoritmos, a partir de los cuales, se presenta uno sencillo y efectivo -- que facilita la selección de una serie de variables de diseño que reduce la labor de cálculo asociada con el análisis del proceso.

La serie de ecuaciones del modelo matemático que describen al proceso, pueden expresarse en la forma funcional siguiente:

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_{N_v}) = 0 \dots\dots\dots (9)$$

donde,  $i=1, 2, 3, \dots, N_c$  ecuaciones

y  $N_v \geq N_c$

Las variables se dividen en dos tipos:

Las variables de estado y las variables de diseño. Las variables de estado pueden calcularse no iterativamente -- como función de las variables de diseño. Cada variable de estado es asignada como la variable de salida de una ecuación de diseño. El valor de la variable de salida es la información que una ecuación puede comunicar a las otras ecuaciones del sistema y la serie de todas las variables asignadas a las ecuaciones como variables de salida es llamada la serie de variables de salida.

Para las ecuaciones y variables que comprenden el modelo matemático es necesario representar el flujo de información entre ellas mediante una matriz booleana, llamada matriz de ocurrencia, y está definida como sigue:

Cada hilera de tal matriz corresponde a una ecuación del sistema, y cada columna corresponde a una variable del sistema; y un elemento de la matriz,  $ij$  es:

$ij = 1$ , como la intersección de una hilera y una columna, indica que aquella ecuación  $i$  contiene aquella variable  $j$  como una incógnita.

$ij = 0$ , en la intersección de una hilera y una columna indica que esa ecuación  $i$  no contiene esa variable  $j$ , ó -- que el valor de esa variable es conocido.

El número de variables desconocidas apareciendo en una ecuación  $f_i$  define  $f(f_i)$  como el grado local ó frecuencia de esa ecuación, y es igual a la suma de elementos, diferentes de cero, en su hilera respectiva. Similarmente, el grado local ó frecuencia de cada variable  $x_j$ ,  $f(x_j)$ , es la suma de

sus elementos distintos de cero en su columna respectiva.

Así, en la determinación de la secuencia de cálculo cuando el grado local de alguna ecuación es igual a 1, la variable de esta ecuación y la ecuación constituyen un par, variable-ecuación, de la serie total producida. Los grados locales de las variables, son usados para determinar iteración implícita ó explícita durante el desarrollo de la secuencia de cálculo y también para determinar cuales variables se prefieren para constituir una posible serie de variables iterativas y de diseño durante el procedimiento de eliminación.

#### ALGORITMO I

Los propósitos de este algoritmo son:

a). Determinar que variables deben especificarse, variables de diseño, en orden para minimizar el número de variables iterativas necesarias para resolver el sistema de ecuaciones algebraicas.

b). Identificar diferentes niveles de cálculos iterativos que puedan usarse para determinar una secuencia de cálculo tal que minimice el número de cálculos iterativos.

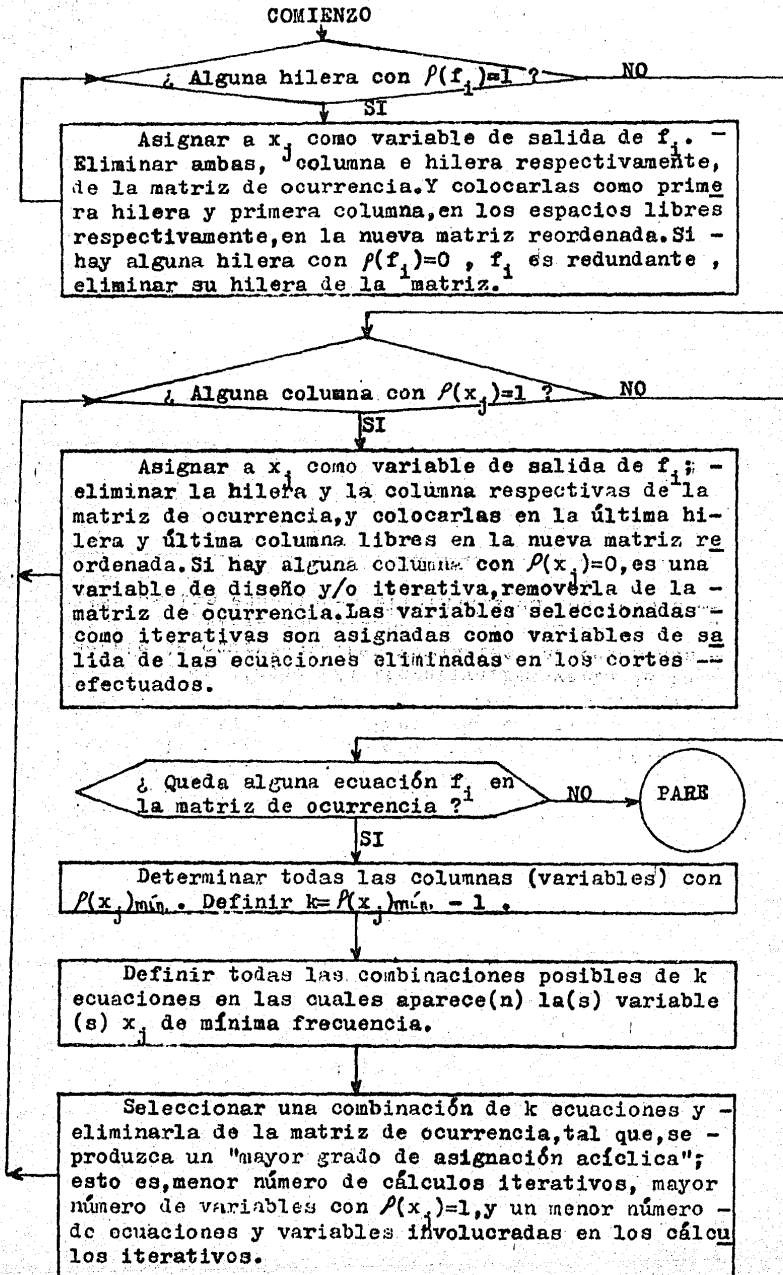
c). Proponer el orden de precedencia (secuencia de cálculo) en el que deben resolverse las ecuaciones.

Por razones puramente prácticas el Ingeniero puede tener preferencia sobre el control de ciertas variables, y fijarlas como variables de diseño sin hacer caso de la estructura del problema. Por ejemplo, si alguna restricción de control de calidad es impuesta sobre la concentración del pro-

ducto, el Ingeniero puede seleccionar a la concentración como un grado de libertad. Esta variable preferida (asignada antes de aplicar el Algoritmo I ) produce una matriz de ocurrencia más fácil de reducir por tal algoritmo.

El diagrama de flujo del Algoritmo I se representa en la figura 29.

Fig. 29 .Diagrama de flujo de información del Algoritmo I



DETECCION DE CICLOS



## V. DETECCION DE CICLOS

El flujo de información entre el sistema de ecuaciones se representa por diagramas de flujo de información en forma análoga a la representación de los diagramas de flujo de materia de procesos. Asociadas con las gráficas de flujo de información están las matrices booleanas, las cuales tienen una correspondencia de uno a uno con la estructura de la gráfica y que pueden cargarse fácilmente en una computadora digital para su análisis.

### GRAFICAS Y MATRICES BOOLEANAS

Una gráfica es una colección de nodos (puntos, elementos ó subsistemas) y líneas uniendo tales nodos, llamadas líneas de enlace (flujos de información ó quizás de materia, ó corrientes). Una gráfica dirigida es aquella en la que sus líneas de enlace están dirigidas.

La matriz booleana, la matriz adyacente, matriz estructural ó matriz de ocurrencia, contiene tantas columnas e hileras como la gráfica contiene tantos nodos (el número de columnas e hileras corresponde al número de los nodos). Un elemento  $a_{ij} = 1$  si existe una línea de enlace que va desde el nodo  $i$  hasta el nodo  $j$ ; de otro modo  $a_{ij} = 0$ . Siendo ésta la correspondencia uno a uno entre la gráfica y su matriz estructural asociada.

La figura 30 ilustra una gráfica dirigida con su matriz adyacente. En la matriz adyacente, las hileras de la matriz -

corresponden a los nodos desde los cuales los flujos están dirigidos, mientras que las columnas corresponden a los nodos hacia los cuales se dirigen los flujos.

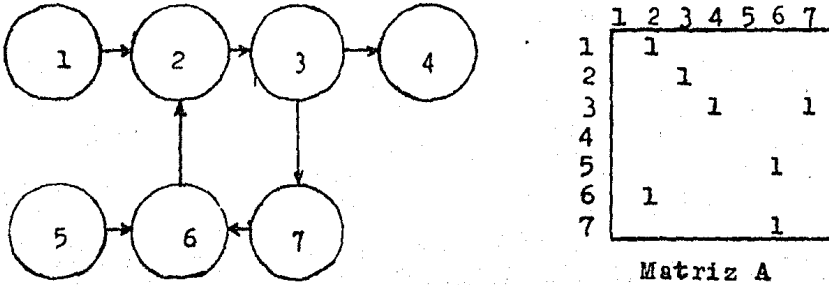


Fig.30. Correspondencia entre una gráfica y su matriz adyacente (A).

Sobre esta matriz se efectuarán las operaciones de suma y multiplicación booleanas, que se definen a continuación:

$x+y+z+\dots =$  al mayor de  $(x,y,z,\dots)$  .....(10)

$x*y*z*\dots =$  al menor de  $(x,y,z,\dots)$  .....(11)

por ejemplo,

para la suma:

$0+1=1$

$1+1=1$

$0+0=0$

para la multiplicación:

$0*1=0$

$1*1=1$

$0*0=0$

La multiplicación y suma booleanas son distributivas con respecto a la suma y multiplicación, respectivamente:

$x*(y+z) = (x*y) + (x*z)$  .....(12)

$x+(y*z) = (x+y)*(x+z)$  .....(13)

La multiplicación de matrices booleanas se efectúa de acuerdo a las reglas usuales de las matrices.

La multiplicación de matrices no es conmutativa, pero -  
 sí asociativa:

$$A \times B \neq B \times A \quad \dots\dots\dots(14)$$

$$(A \times B) \times C = A \times (B \times C) \quad \dots\dots\dots(15)$$

Sean las matrices A y B,

$$A = \begin{matrix} & \begin{matrix} 1 & 2 & \dots & n_k \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ \vdots \\ n_i \end{matrix} & \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \dots & a_{ik} \end{bmatrix} \end{matrix}$$

$$A^{\lambda-1} \times B = \begin{matrix} & \begin{matrix} 1 & 2 & \dots & n_j \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ \vdots \\ n_k \end{matrix} & \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1j} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2j} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{k1} & b_{k2} & \dots & b_{kj} \end{bmatrix} \end{matrix}$$

desde el nodo i hasta el  $\uparrow$   
 nodo k  $\downarrow$

desde el nodo k hasta el  $\uparrow$   
 nodo j  $\downarrow$

entonces , los elementos  $c_{ij}$  de la matriz  $C = A \times B = A^\lambda$ , son en-  
 contrados por:

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^n (a_{ik} \times b_{kj}) \quad \dots\dots\dots(16)$$

donde, n= orden de las matrices A,B y C

$\lambda$ = potencia de la matriz A

Así,

$$A^\lambda = C = \begin{matrix} & \begin{matrix} 1 & 2 & \dots & n_j \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ \vdots \\ n_i \end{matrix} & \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \dots & c_{1j} \\ c_{21} & c_{22} & \dots & c_{2j} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{i1} & c_{i2} & \dots & c_{ij} \end{bmatrix} \end{matrix}$$

Desde el nodo i hasta el  $\uparrow$   
 nodo j  $\downarrow$

Por ejemplo, el producto de la matriz A, de la figura 30, por sí misma, para obtener tres de sus potencias sucesivas:

$$A^2 = A * A =$$

	1	2	3	4	5	6	7
1			1				
2				1			1
3						1	
4							
5		1					
6			1				
7		1					

$$A^3 = A^2 * A =$$

	1	2	3	4	5	6	7
1				1			1
2						1	
3		1					
4							
5			1				
6				1			1
7		1					

$$A^4 = A^3 * A =$$

	1	2	3	4	5	6	7
1							1
2		1					
3			1				
4							
5				1			1
6					1		
7		1				1	1

TEOREMA:

Si  $A$  es la matriz asociada con una gráfica dirigida, entonces el coeficiente  $c_{ij}$  de la matriz  $C = A^\lambda$  es igual al número de las distintas rutas envolviendo  $(\lambda + 1)$  nodos que van desde  $i$  hasta  $j$ . El teorema se cumple para  $\lambda > 0$ .

Para la matriz  $B = A^{\lambda-1}$ ,  $b_{kj}$  indica las rutas de  $\lambda$  nodos que van desde  $k$  hasta  $j$ , entonces el producto  $(a_{ik} \times b_{kj})$  indica las rutas desde  $i$  hasta  $j$ . Por ejemplo, de las nuevas formas de las potencias sucesivas de la matriz  $A$ :

En  $A^2$ , el elemento con  $i=1$  y  $j=3$ , es un uno. Esto indica una ruta con tres nodos que va desde el nodo 1 hasta el nodo 3.

$A^3$  contiene información acerca de todas las rutas de -- cuatro nodos en la gráfica;  $A^4$  contiene información de todas las rutas que comprenden cinco nodos. Hay elementos 1 en la diagonal mayor de  $A^4$  en las posiciones 2, 3, 6, y 7; esto indica que las rutas de cinco nodos van desde cada uno de los nodos indicados hacia sí mismos (un ciclo). Cada elemento de la diagonal de  $A^4$  es un miembro del ciclo mostrado en la red de la figura 30 .

El orden  $\lambda$  de un circuito en una gráfica es definido como el número de  $\lambda$  nodos cada uno de los cuales está conectado con los otros nodos del circuito por una ruta cerrada (ciclo). El máximo circuito de orden  $\lambda$ ,  $H$ , de una gráfica, es definido como una serie de  $\lambda$  nodos conectados por una ruta cerrada (ciclo) tal que cada uno de los otros ciclos en la gráfica ya sea que esté contenido en  $H$  ó que no tenga nodos en común con  $H$ .

Un método para localizar estos máximos circuitos es -- calcular la matriz de alcance  $A^*$ , la cual es la suma booleana elemento por elemento de todas las potencias de la matriz adyacente hasta la  $n$ -ésima, donde  $n$  es el número de hileras de  $A$ . Un elemento de la matriz de alcance es definido por

$$a_{ij}^* = \sum_{\lambda=1}^n a_{ij}^\lambda, \quad \lambda=1,2,3,\dots,n \quad \dots\dots\dots(17)$$

donde  $(a_{ij}^\lambda)$  es el elemento de la  $i$ -ésima hilera y la  $j$ -ésima columna de la  $\lambda$ -ésima potencia de la matriz adyacente. La matriz de alcance indica todos los caminos de longitud  $n$  ó menor entre los nodos. Conforme  $\lambda$  se incrementa, la suma de las matrices llega a ser una matriz tal que para un incremento en  $\lambda$  la matriz permanece invariante; esto sucede cuando la matriz de potencia  $(\lambda+1)$  es idéntica a alguna de las anteriores.

La figura 31 muestra la matriz de alcance para la gráfica de la figura 30 .

$A^* = A^1 + A^2 + A^3 + A^4$ , puesto que  $A^5 = A$  y por consiguiente  $A^6$  y  $A^7$  serán matrices idénticas a algunas de las anteriores, la matriz de alcance  $A^*$  permanece invariante si se adicionan  $A^5, A^6$  y  $A^7$ . Así,

$A^* =$	<table style="border-collapse: collapse; text-align: center;"> <tr> <td></td> <td>1</td> <td>2</td> <td>3</td> <td>4</td> <td>5</td> <td>6</td> <td>7</td> </tr> <tr> <td style="border-right: 1px solid black; padding-right: 5px;">1</td> <td></td> <td>1</td> <td>1</td> <td>1</td> <td></td> <td>1</td> <td>1</td> </tr> <tr> <td style="border-right: 1px solid black; padding-right: 5px;">2</td> <td></td> <td>1</td> <td>1</td> <td>1</td> <td></td> <td>1</td> <td>1</td> </tr> <tr> <td style="border-right: 1px solid black; padding-right: 5px;">3</td> <td></td> <td>1</td> <td>1</td> <td>1</td> <td></td> <td>1</td> <td>1</td> </tr> <tr> <td style="border-right: 1px solid black; padding-right: 5px;">4</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td style="border-right: 1px solid black; padding-right: 5px;">5</td> <td></td> <td>1</td> <td>1</td> <td>1</td> <td></td> <td>1</td> <td>1</td> </tr> <tr> <td style="border-right: 1px solid black; padding-right: 5px;">6</td> <td></td> <td>1</td> <td>1</td> <td>1</td> <td></td> <td>1</td> <td>1</td> </tr> <tr> <td style="border-right: 1px solid black; padding-right: 5px;">7</td> <td></td> <td>1</td> <td>1</td> <td>1</td> <td></td> <td>1</td> <td>1</td> </tr> </table>		1	2	3	4	5	6	7	1		1	1	1		1	1	2		1	1	1		1	1	3		1	1	1		1	1	4								5		1	1	1		1	1	6		1	1	1		1	1	7		1	1	1		1	1
	1	2	3	4	5	6	7																																																										
1		1	1	1		1	1																																																										
2		1	1	1		1	1																																																										
3		1	1	1		1	1																																																										
4																																																																	
5		1	1	1		1	1																																																										
6		1	1	1		1	1																																																										
7		1	1	1		1	1																																																										

Fig.31. Matriz de alcance de la figura 30 .

## REDES DE MULTIPLES CICLOS

Cuando un ciclo ha sido localizado, éste puede reemplazarse por un pseudonodo. Puesto que interesa más la relación del ciclo como un sólo nodo (pseudonodo) con el resto de la red; así, se cambia la matriz básica A removiendo todos los miembros individuales del ciclo. En lugar de las hileras y columnas correspondientes a estos nodos, se inserta una columna y una hilera correspondiente al pseudonodo del ciclo y en estos lugares toda la información que concierne a las conexiones entre los nodos externos al ciclo y los nodos en el ciclo.

Si no se efectúa esta modificación en las redes de varios circuitos, los circuitos obtenidos tendrán un mayor número de nodos.

Puesto que hay un número finito de nodos en la red, este proceso terminará con una matriz cero cuando todos los ciclos han sido removidos y  $(\lambda - 1)$  es igual al número de nodos en la ruta más larga en la red que quede.

Varios ciclos del mismo tamaño pueden existir en una red. Esto ocurrirá durante el procedimiento si y sólo si la suma de los elementos de la diagonal de la matriz  $A^\lambda$  es mayor que la potencia  $\lambda$  (de hecho, la suma será un múltiplo de  $\lambda$ ).

El procedimiento usado para separar los ciclos es como se muestra en seguida:

La matriz base  $A_0$  es examinada para un  $a_{ij}=1$  tal que la matriz  $A_0^\lambda$  tenga elementos iguales a 1 en las posiciones  $i$  y  $j$  sobre la diagonal principal.

La matriz  $A_1$  se construye idénticamente a la matriz  $A_0$  pero con sus elementos  $a_{ij}=0$  sobre la diagonal. Se calculan las potencias sucesivas de la matriz  $A_1$ , o sea,  $A_1^\lambda$ , y los elementos son sustraídos como en  $A_0^\lambda$ . Este procedimiento se repite hasta que se hayan identificado todos los ciclos. Este procedimiento se ilustra con el diagrama de flujo de la figura 32.

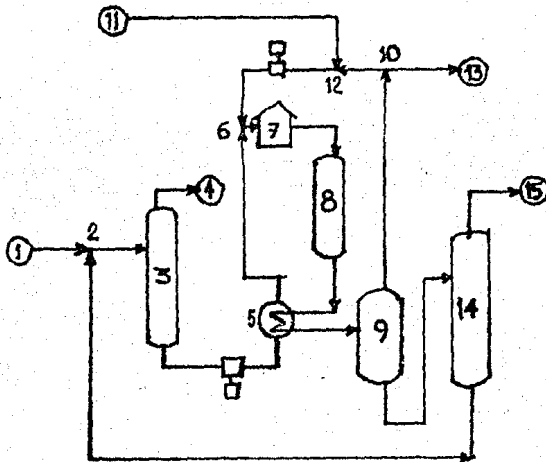
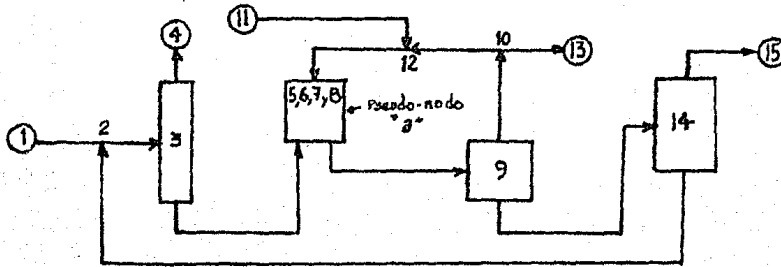


Fig. 32. Un diagrama de flujo simplificado.





De  $A_0^4$ , un ciclo consistiendo de los nodos 5, 6, 7, y 8 es localizado.  $A_0^4$  es dividida como lo muestra la cruz punteada y modificada para producir la matriz  $A_1$  de la figura 35, en donde el ciclo encontrado ha sido sustituido por el pseudo-nodo "a".



	1	2	3	4	9	10	11	12	13	14	15	a
1	1											
2		1										
3			1									
4				1								
9					1					1		
10						1	1					
11							1					
12								1				
13									1			
14			1							1		
15											1	
a				1								

Fig. 35 Diagrama de flujo reducido y su matriz base  $A_1$

Las operaciones son continuadas hasta  $A_1^4$  cuando otro ciclo es localizado consistente de los nodos 9,10,12, y el pseudo-nodo a. Entonces la matriz  $A_1$  se modifica para producir la siguiente matriz  $A_2$ . El nuevo ciclo es ahora el pseudo-nodo "b" como se muestra en la figura 36.

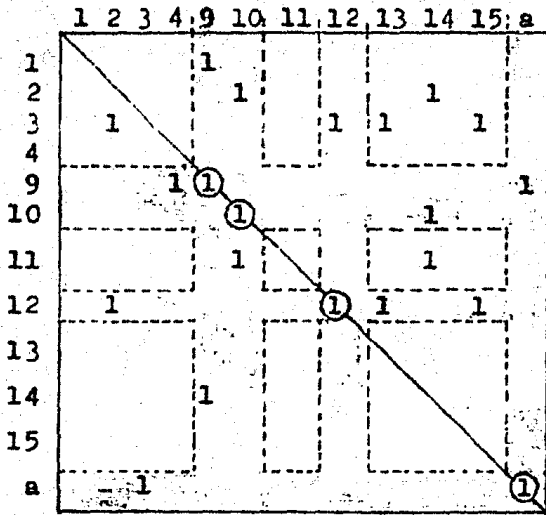


Fig. 36. Matriz  $A_1^4$ .

Siendo el diagrama de flujo reducido el siguiente:

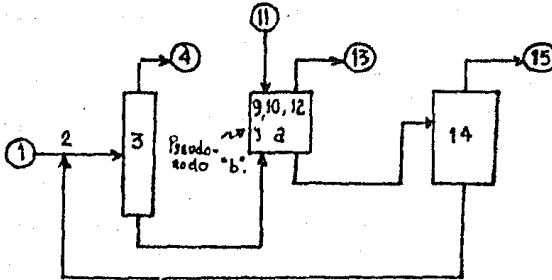


Fig. 37. Diagrama de flujo reducido de la figura 32.

	1	2	3	4	11	13	14	15	b
1	1								
2		1							
3			1						1
4				1					
11					1				
13						1			
14							1		
15								1	
b									1

Fig. 38. Matriz  $A_2$ .

Las potencias sucesivas de  $A_2$  son calculadas hasta --- que se encuentra otro ciclo, siendo éste  $A_2^4$ , el cual está constituido por los nodos 2,3,4, y el pseudo-nodo b.

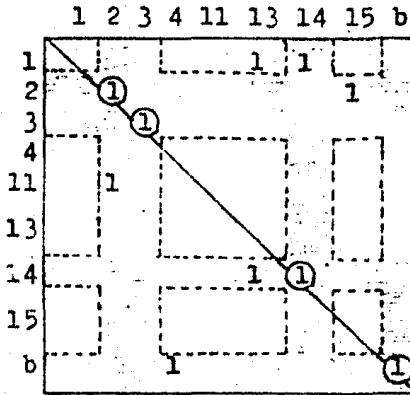


Fig. 39. Matriz  $A_2$ .

La matriz  $A_2$  de la figura 38 es cambiada para producir la matriz  $A_3$ .

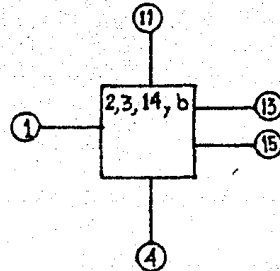
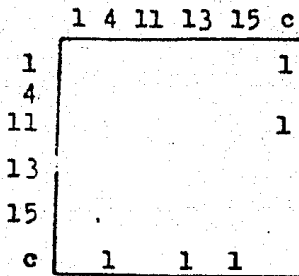


Fig. 40. Matriz  $A_3$  y el pseudo-nodo "c".

Así, la matriz  $A_3^3 = 0$ , indica que no hay más posibilidades de encontrar ciclos adicionales. Entonces termina este procedimiento.

Lista de los pseudo-nodos encontrados y sus ciclos respectivos:

pseudonodo = nodos involucrados  $\Rightarrow$  ciclo encontrado

- a = 5,6,7,y 8  $\Rightarrow$  5,6,7, y 8
- b = (5,6,7,8),9,10,y 12  $\Rightarrow$  6,7,8,5,9,10, y 12
- c = (5,6,7,8),(9,10,12),  $\Rightarrow$  2,3,5,9, y 14  
2,3, y 14

A continuación se muestra esquemáticamente el análisis de corrientes por medio de la asociación de matrices para localizar los ciclos que pueden existir en un diagrama de flujo.

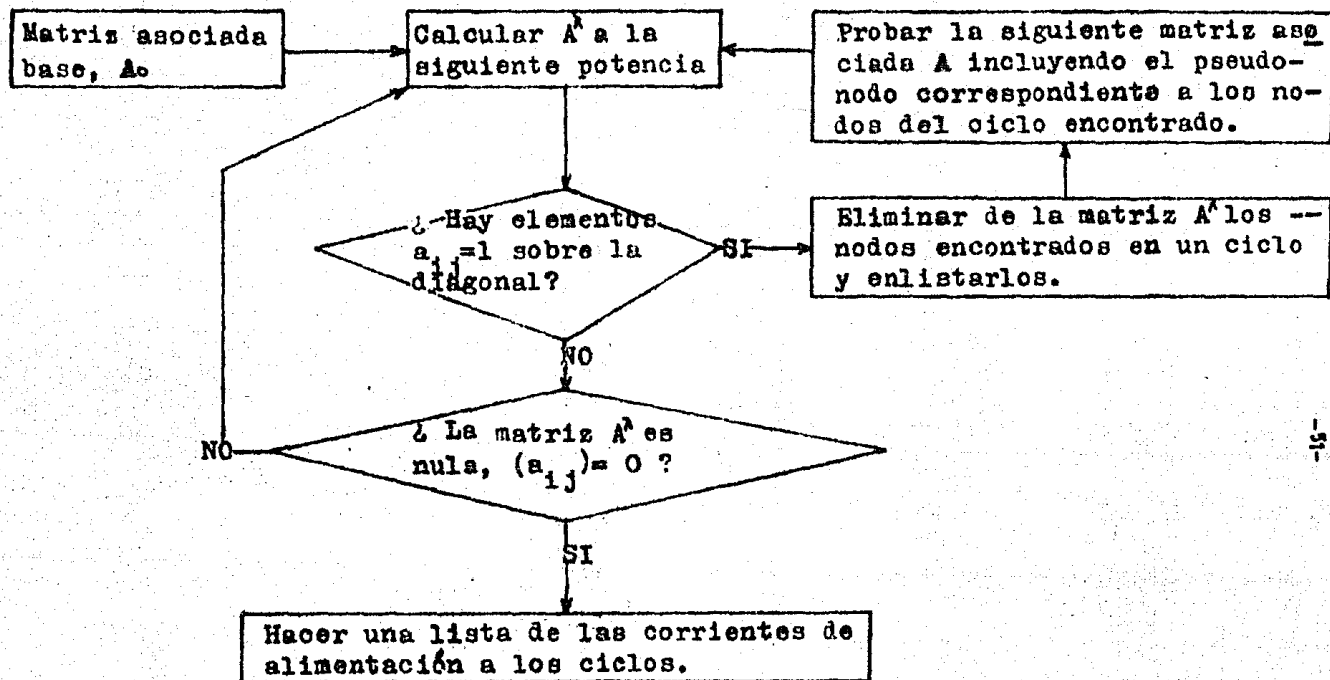


Fig. 41. Fase de operación de la matriz asociada a un diagrama de flujo.

ORDENAMIENTO DE LOS DIAGRAMAS DE FLUJO  
DE PROCESOS.



## VI. ORDENAMIENTO DE LOS DIAGRAMAS DE FLUJO DE PROCESOS.

La facilidad de este análisis es simplificar el cálculo del proceso. La figura 42 representa el diagrama de flujo de un proceso. Los bloques representan operaciones unitarias por ejemplo, destilación, secado, compresión, filtración, etc. y las flechas representan los flujos de materia y energía entre los bloques. Aclarando que la dirección física de flujo no es necesariamente igual a la dirección de flujo de información. La especificación de la corriente de salida del bloque M equivale a introducir información al sistema.

El diagrama de flujo puede reorganizarse en función de los flujos de información, y en éste caso, las flechas pueden tomar cualquier dirección. teniendo el diseñador esta ventaja a su favor se puede reorganizar la secuencia de cálculo, y puesto que la especificación de los valores de las variables de diseño encontradas en el análisis de grados de libertad conduce directamente a los tediosos cálculos iterativos, una condición que se evita seleccionando nuevas variables de diseño.

Cada bloque del diagrama puede contener un gran número de ecuaciones dependiendo del tipo de operación que se presente.

Una vez que las variables de entrada a un bloque han sido especificadas, pueden calcularse las variables de sali-

da, siendo ésta la convención seguida en la preparación de un diagrama de flujo de información. Este diagrama de flujo de información se elabora de la siguiente manera:

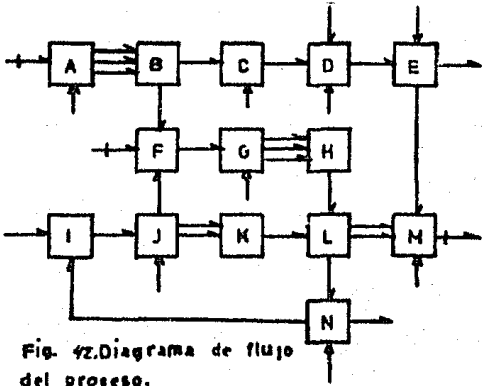
a). Se elimina la dirección de todas las flechas del diagrama de flujo del proceso original, excepto la de aquellas corrientes que han sido especificadas externamente, y se escribe dentro del bloque correspondiente la cantidad de flechas que salen del mismo, figura 42.a.

b). Las variables que aparecen en un solo bloque (es decir aquellas flechas sin dirección que no conectan ningún bloque) se asignan como salidas del sistema y se resta el número de éstas del número correspondiente al bloque en estudio, figura 42.b.

c). Los bloques que no permiten nuevas salidas (aquellas cuyo número es igual a cero) se eliminan del diagrama reducido y se repite el paso b). hasta eliminar todos los bloques, figura 42.c.

Cuando hay varias alternativas para seleccionar la variable de salida, se debe preferir por intuición aquella que simplifique los cálculos.

d). Una vez que se han asignado todas las salidas esta información se coloca sobre el diagrama de flujo sin direcciones original. Cualquier variable (flecha) sin dirección asignada se considera una variable de diseño, figura 42.d.



↔ Variables especificadas externamente

→ Variables de diseño encontradas por el análisis de grados de libertad.

→ Variables dependientes

Fig. 42. Diagrama de flujo del proceso.

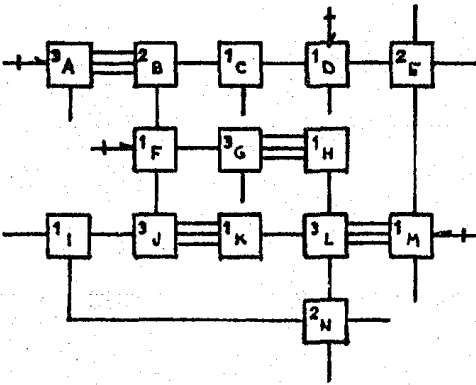


Fig. 42.a Diagrama de flujo sin direcciones.

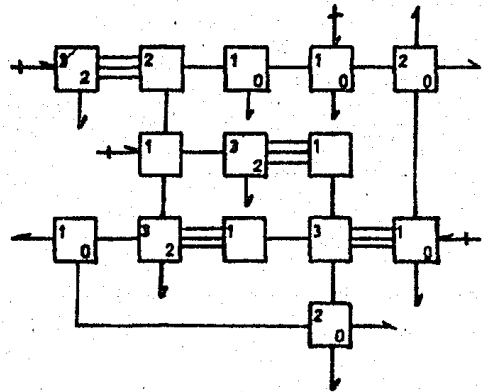


Fig. 43. Eliminación de los bloques C, D, E, I, M, y N.

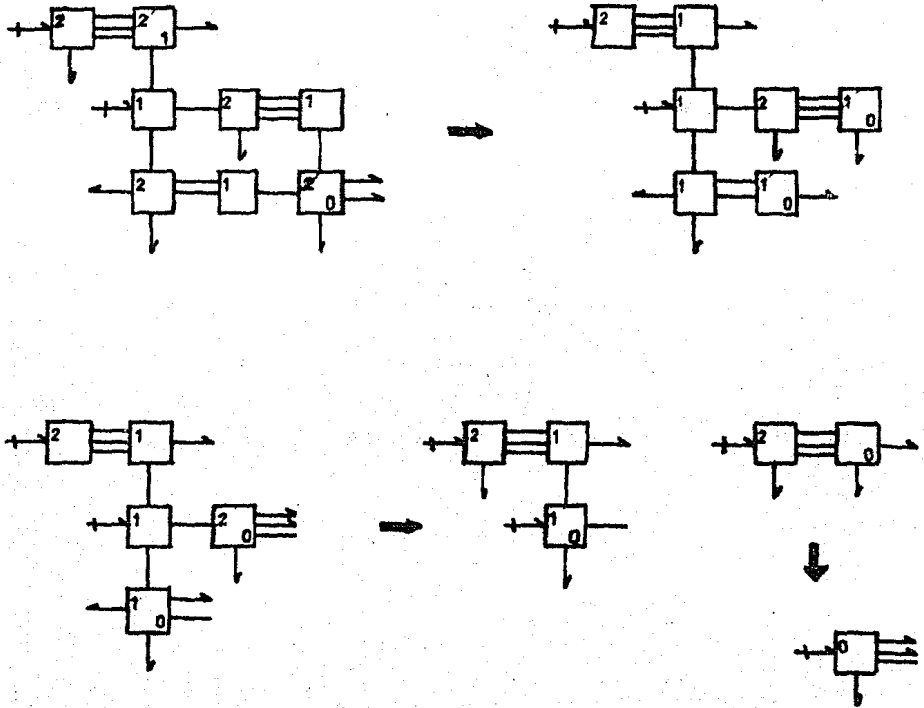


Fig. 42c Continuación del procedimiento de eliminación.

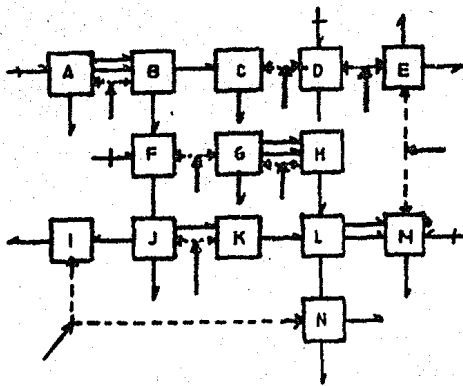


Fig. 42d Reasignación de las variables de diseño para el diagrama de flujo de la figura 42.

Las flechas punteadas indican aquellas variables de diseño que simplifican el cálculo. La secuencia de cálculo (orden de precedencia) se indica en la figura 43.

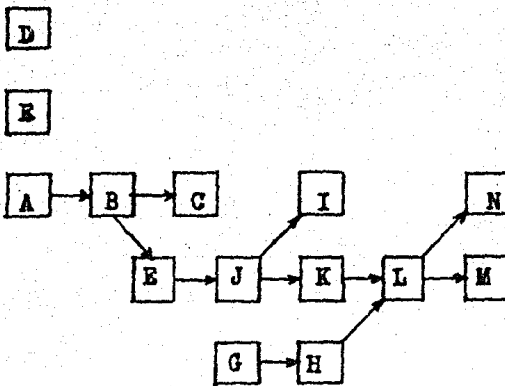


Fig. 43. Secuencia de cálculo del diagrama de flujo del proceso de la figura 42.

Como se puede observar, todos los circuitos de recirculación de información han sido eliminados y el cálculo se puede efectuar en forma secuencial.

ORDENAMIENTO DE LOS CALCULOS

EN RECICLO.

## VII.- ORDENAMIENTO DE LOS CALCULOS EN RECICLO

En este capítulo se presentan algunos Algoritmos para los cálculos en reciclo, y cómo determinar el mínimo número de parámetros reciclo que deben asumirse para ejecutar los cálculos de reciclo acíclicamente.

El problema de ejecutar cálculos en reciclo complejos se resuelve tentativamente asumiendo los valores de ciertos parámetros de reciclo (ó recirculación) clave. Los cálculos restantes, los que no contienen parámetros de reciclo no especificados, son ejecutados paso por paso, produciendo nuevos valores para los parámetros de recirculación.

Estos dos pasos se repiten hasta que se logra la convergencia deseada, frecuentemente con la ayuda de un acelerador de convergencia.

Puesto que un cierto número de combinaciones de las variables en un problema dado pueden asumir el papel de parámetros reciclo, la selección de estos parámetros reciclo determina la dificultad de los cálculos iterativos.

A continuación se muestra el desarrollo de procedimientos simples para determinar el mínimo número de parámetros reciclo en los procesos complejos con recirculación.

### MINIMO NUMERO DE CORTES

Se distinguen dos casos:

Corrientes reciclo definidas por una sola variable, y corrientes reciclo definidas por una o más variables, por ejemplo, corrientes que llevan información en términos de composiciones, entalpías, velocidades de flujo, etc.

Después de haber visto como localizar todos los ciclos (capítulo V), se construye una matriz ciclo. Donde  $A, B, C, \dots$ , representan los ciclos y  $S_j$  las corrientes. La matriz ciclo tiene los elementos

$$C = [c_{ij}] = \begin{cases} 1, & \text{si } S_j \text{ aparece en el ciclo } i \\ 0, & \text{si no aparece.} \end{cases}$$

Rango de ciclo, se define como el número de corrientes envueltas y es igual a la suma total de los elementos en una hilera de la matriz.

Frecuencia de corriente, es el número de ciclos en los que aparecen las corrientes, e igual a la sumatoria de los elementos en una columna.

Columnas independientes.

Si la frecuencia de la columna  $j$  es igual o mayor que la de la columna  $k$  y si la columna  $j$  tiene elementos  $c_{ij}=1$  en todas las hileras donde la columna  $k$  tiene también elementos  $a_{ij}=1$ , entonces la columna  $k$  está contenida en la columna  $j$ . A la columna  $k$  se le llama columna dependiente. En este caso la selección de la columna  $j$  implica que más ciclos son removidos que si la columna  $k$  hubiese sido seleccionada, y todos los ciclos removidos por la selección de  $k$  tam



bien serán removidos por la selección de  $j$ . Por consiguiente, la columna  $k$  es removida de la matriz ciclo sin perderse generalidad. La remoción de las columnas dependientes reduce el tamaño de la matriz ciclo.

#### Selección de columna.

Si la matriz ciclo sin columnas dependientes contiene una hilera con un solo elemento  $c_{ij}=1$ , el ciclo correspondiente a la hilera es eliminado sólo si la columna que contiene al único elemento  $c_{ij}=1$  es elegida como una variable de reciclo.

Las columnas elegidas como variable de reciclo son eliminadas de la matriz ciclo junto con las hileras en las que aparece el único elemento  $c_{ij}=1$ . Este procedimiento es continuado hasta que todas las hileras han sido eliminadas ó que no haya hileras con un solo elemento  $c_{ij}=1$ .

Todo ciclo de rango 1, o sea, un circuito con signo mismo, puede eliminarse cortando la corriente envuelta en el ciclo. Los ciclos pueden eliminarse de la matriz ciclo, junto con las columnas de las corrientes atendidas, hasta que todos los ciclos tengan un rango de al menos 2.

Esta detección sistemática de ciclos de rango 1 es llamada ALGORITMO 1.

Si la matriz ciclo reducida no es terminada con el Algoritmo 1; esto es, los rangos de los ciclos son mayores de 1, y todas las columnas son dependientes. Entonces se aplica el ALGORITMO 2.

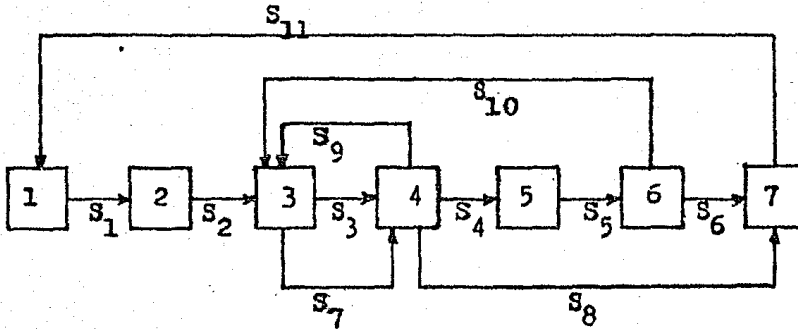


Fig. 44 Ejemplo

Ciclos del sistema de la figura 44

- A =  $s_3, s_9$
- B =  $s_7, s_9$
- C =  $s_3, s_4, s_5, s_{10}$
- D =  $s_4, s_5, s_7, s_{10}$
- E =  $s_1, s_2, s_3, s_4, s_5, s_6, s_{11}$
- F =  $s_1, s_2, s_4, s_5, s_6, s_7, s_{11}$
- G =  $s_1, s_2, s_3, s_8, s_{11}$
- H =  $s_1, s_2, s_7, s_8, s_{11}$

	$s_1$	$s_2$	$s_3$	$s_4$	$s_5$	$s_6$	$s_7$	$s_8$	$s_9$	$s_{10}$	$s_{11}$	Hango de ciclo
A			1						1			2
B							1		1			2
C			1	1	1					1		4
D				1	1		1			1		4
E	1	1	1	1	1	1					1	7
F	1	1		1	1	1	1				1	7
G	1	1	1					1			1	5
H	1	1					1	1			1	5
Frecuencia de columna	4	4	4	4	4	2	4	2	2	2	4	

Matriz ciclo del sistema de la figura 44.

Puesto que  $S_2$  contiene a  $S_1, S_6, S_8$  y  $S_{11}$ ; y  $S_5$  contiene a  $S_4$  y  $S_{10}$ , entonces por la eliminación de estas columnas de pendientes se obtiene la siguiente matriz reducida :

	$S_2$	$S_3$	$S_5$	$S_7$	$S_9$	
A	1			1		2
B				1	1	2
C		1	1			2
D			1	1		2
E	1	1	1			3
F	1		1	1		3
G	1	1				2
H	1			1		2
	4	4	4	4	2	

En el ejemplo de la figura 44 el Algoritmo 1 no se aplica, entonces aplicando el Algoritmo 2 :

Se adiciona una columna a la derecha de la matriz ciclo reducida donde los elementos de esta columna son los números de las corrientes de los elementos  $c_{ij}$  de las hileras.

	$S_2$	$S_3$	$S_5$	$S_7$	$S_9$	Columna aumentada
A	1			1		2
B				1	1	2
C		1	1			2
D			1	1		2
E	1	1	1			3
F	1		1	1		3
G	1	1				2
H	1			1		2
	4	4	4	4	2	

El primer elemento de la columna aumentada indica que el ciclo A no será removido si las columnas  $S_2, S_5$  y  $S_7$  son seleccionadas. También implica que el ciclo A no puede removerse al seleccionar alguna subserie de esta serie. Nótese que un cierto número de subseries pueden generarse de esta serie. Nótese también que la serie de tres columnas  $S_2, S_3$  y  $S_7$  remueve todos los ciclos, pero se requerirán tres cortes para reducir el sistema de reciclo a un sistema acíclico. Sin embargo, hay alguna serie de dos corrientes de reciclo que removerán todos los ciclos. Es obvio que una serie de dos corrientes que pueden ser generados por algún elemento de la nueva columna no será capaz de remover al menos uno de los ciclos.

Si hay una serie de dos corrientes que no pueden ser generadas por algún elemento de la columna aumentada, tal serie removerá todos los ciclos de la matriz. En este ejemplo, la serie de las columnas  $S_3$  y  $S_7$  ha sido encontrada para ser la serie de dos corrientes que no puede generarse por los elementos de la columna aumentada. Por lo tanto, se ha encontrado que 2 es el número mínimo de cortes o roturas y las corrientes de reciclo son  $S_3$  y  $S_7$ .

	$S_2$	$S_3$	$S_5$	$S_7$	$S_9$					
A	1				1	2	$S_2 S_5 S_7$	$S_2 S_5$	$S_2 S_7$	$S_5 S_7$
B		1	1			2	$S_2 S_3 S_5$	$S_2 S_3$	$S_2 S_5$	$S_3 S_5$
C	1	1				2	$S_2 S_7 S_9$	$S_2 S_7$	$S_2 S_9$	$S_7 S_9$
D		1	1			2	$S_2 S_3 S_9$	$S_2 S_3$	$S_2 S_9$	$S_3 S_9$
E	1	1	1			3	$S_7 S_9$	$S_7 S_9$		
F	1		1	1		3	$S_3 S_9$	$S_3 S_9$		
G	1	1				2	$S_5 S_7 S_9$	$S_5 S_7$	$S_5 S_9$	$S_7 S_9$
H	1			1		2	$S_3 S_5 S_9$	$S_3 S_5$	$S_3 S_9$	$S_5 S_9$
	4	4	4	4	2					

La única serie de dos corrientes que no puede ser generada por la columna aumentada es  $S_3, S_7$ .

Una serie de columnas con una frecuencia total menor que el número de los ciclos de la matriz no puede remover todos los ciclos. Por ejemplo, en la última matriz, la frecuencia mayor es 4 y la menor 2, y hay 8 ciclos. Alguna serie de dos columnas en la cual la columna  $S_9$  es un miembro no puede remover todos los ciclos, puesto que la suma de frecuencia de esta serie de dos columnas siempre será menor que el número de los ciclos. Por lo tanto, el tiempo de indagación para las series de dos columnas las cuales removerán a todos los ciclos, todas las series de dos columnas que incluyen a la columna  $S_9$  pueden descuidarse. Eliminando la columna  $S_9$  de la matriz anterior se obtiene la siguiente matriz.

	$S_2$	$S_3$	$S_5$	$S_7$	
A	1				(1)
B			1		(1)
C	1	1			2
D		1	1		2
E	1	1	1		3
F	1		1	1	3
G	1	1			2
H	1			1	2
	4	4	4	4	

Dos hileras de esta matriz cada una ahora tiene un solo elemento distinto de cero. Las columnas en las que aparecen estos únicos elementos distintos de cero corresponden a las corrientes de reciclo. En general, la serie que contenga el menor número de corrientes que no pueden generarse por la columna aumentada deben seleccionarse como las corrientes de reciclo. Este método sistemático de selección de corrientes de reciclo es llamado ALGORITMO 2.

MINIMO NUMERO DE PARAMETROS DE RECICLO

En la sección de mínimo número de cortes se desarrolló un procedimiento para decidir el mínimo número de corrientes de reciclaje en el caso donde las corrientes están definidas por un número idéntico de parámetros.

En esta sección se desarrolla el procedimiento para decidir el mínimo número de parámetros de reciclaje en el caso donde las corrientes están definidas por un número desigual de parámetros, tal como, temperatura, velocidad de flujo y composición.

Considerando el ejemplo de Rubin (29) mostrado en la figura siguiente:

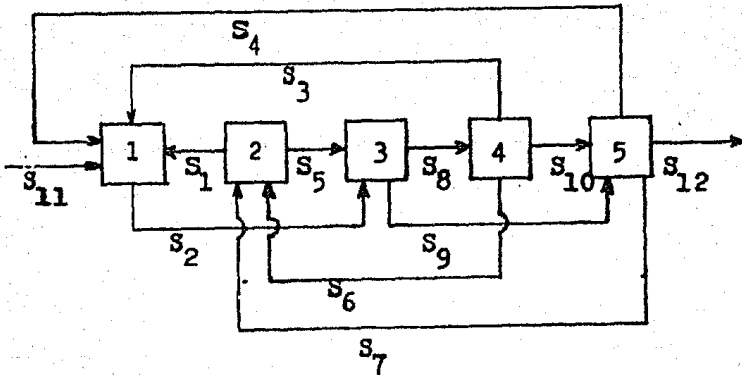


Fig. 45. Ejemplo hipotético de Rubin.

Número de parámetros necesarios para especificar el sistema de la figura 45 .

Corriente	Núm. de parámetros
S <sub>1</sub>	3
S <sub>2</sub>	2
S <sub>3</sub>	1
S <sub>4</sub>	4
S <sub>5</sub>	1
S <sub>6</sub>	3
S <sub>7</sub>	5
S <sub>8</sub>	7
S <sub>9</sub>	1
S <sub>10</sub>	2

#### Eliminación de columnas

La columna  $k$  está estrictamente contenida en la columna  $j$ , si la columna  $k$  está contenida en la columna  $j$  y si el número de variables de la corriente  $k$ ,  $p_k$ , no es menor que aquellos de la corriente  $j$ ,  $p_j$ . Si es éste el caso, la columna  $k$  es eliminada de la matriz ciclo por el mismo argumento del Algoritmo 1.

Este proceso de eliminación es continuado hasta que ninguna columna de la matriz esté estrictamente contenida en alguna otra columna.



ALGORITMO 3 .

Cada v ez que el rango de un ciclo sea igual 1, la columna en la que el  nico elemento  $c_{ij}=1$  aparece, corresponde a una corriente de reciclo. Esta columna se elimina de la matriz junto con las hileras de los elementos  $c_{ij}=1$  que aparecen en la columna. Si no hay ciclos con rango 1, las columnas son eliminadas por el siguiente camino:

Si la columna  $k$  est  contenida en una serie de columnas y si el n mero de variables de la corriente  $k$  no es menor que la suma del n mero de variables de las columnas en la serie, la columna  $k$  est  estrictamente contenida en la serie. Por consiguiente, si existe alguna serie de columnas que contengan estrictamente a la columna  $k$ , se eliminar  la columna  $k$  de la matriz. Principiando con las columnas con el  $p_j$  mayor.

La generaci n de ciclos de rango 1 debe chequearse tras cada eliminaci n.

La eliminaci n de columnas de los  $p_j$ 's altos es continuada hasta que aparezca un ciclo de rango 1. La columna en la que aparece el  nico elemento  $c_{ij}=1$  corresponde a una corriente de reciclo. Esta columna es eliminada de la matriz junto con todas las hileras correspondientes. La eliminaci n de todas las columnas produce la soluci n.

Matriz ciclo = (C <sub>0</sub> )	S <sub>1</sub>	S <sub>2</sub>	S <sub>3</sub>	S <sub>4</sub>	S <sub>5</sub>	S <sub>6</sub>	S <sub>7</sub>	S <sub>8</sub>	S <sub>9</sub>	S <sub>10</sub>	Rango del ciclo
A	1	1					1	1		1	5
B				1		1	1	1		1	4
C		1		1				1		1	4
D		1	1					1			3
E	1	1				1		1			4
F					1	1		1			3
G		1		1						1	3
H	1	1					1	1			4
I					1		1	1			3
Núm. de parámetros de la corriente j, p <sub>j</sub> .	3	2	1	4	1	3	5(7)	1	2		

Matriz ciclo del sistema de la figura 45.

Así, puesto que S<sub>2</sub> contiene estrictamente a S<sub>1</sub> y S<sub>4</sub>, entonces, la matriz ciclo C<sub>0</sub> se reduce a la matriz C<sub>1</sub>

C <sub>1</sub> =	S <sub>2</sub>	S <sub>3</sub>	S <sub>5</sub>	S <sub>6</sub>	S <sub>7</sub>	S <sub>8</sub>	S <sub>9</sub>	S <sub>10</sub>	
A	1			1	1		1		4
B		1		1	1		1		4
C	1				1		1		3
D	1	1				1			3
E	1			1		1			3
F			1	1		1			3
G	1						1		2
H	1			1		1			3
I		1		1		1			3
	2	1	1	3	5(7)	1	2		

Del ejemplo, en la matriz ciclo  $C_1$ , la columna  $S_8$  tiene el mayor valor de  $p_j$  de la matriz  $p_8=7$ . La serie  $[S_3, S_6, S_{10}]$  estrictamente contiene a la columna  $S_8$  y la suma de  $p_j$ 's de esta serie es 6, que es menor que 7. Por consiguiente, la columna  $S_8$  es eliminada, y se produce la matriz ciclo  $C_2$ .

$$C_2 = \begin{array}{c|cccccccc|c} & S_2 & S_3 & S_5 & S_6 & S_7 & S_9 & S_{10} & \\ \hline A & 1 & & & & 1 & & 1 & 3 \\ B & & 1 & & & 1 & & 1 & 3 \\ C & 1 & & & & & & 1 & 2 \\ D & 1 & 1 & & & & & & 2 \\ E & 1 & & & 1 & & & & 2 \\ F & & & 1 & 1 & & & & 2 \\ G & 1 & & & & & 1 & & 2 \\ H & 1 & & & & 1 & 1 & & 3 \\ I & & & 1 & & 1 & 1 & & 3 \\ \hline p_j & 2 & 1 & 1 & 3(5) & 1 & 2 & & \end{array}$$

Así, en  $C_2$ , la serie  $[S_2, S_5]$  de  $p_j$ 's = 3, contiene estrictamente a la columna  $S_7$  de  $p_j=p_7=5$ . La eliminación de la columna  $S_7$  conduce a la matriz ciclo  $C_3$ . Y la serie  $[S_2, S_5] \gg S_6$ .

$$C_3 = \begin{array}{c|cccccc|c} & S_2 & S_3 & S_5 & S_6 & S_9 & S_{10} & \\ \hline A & & & & & 1 & & 2 \\ B & & 1 & & & 1 & & 2 \\ C & 1 & & & & & 1 & 2 \\ D & 1 & 1 & & & & & 2 \\ E & 1 & & & 1 & & & 2 \\ F & & & 1 & 1 & & & 2 \\ G & 1 & & & & 1 & & 2 \\ H & 1 & & & & 1 & & 2 \\ I & & & 1 & & 1 & & 2 \\ \hline p_j & 2 & 1 & 1(3) & 1 & 2 & & \end{array}$$

$$C_4 = \begin{array}{c|cccccc|c} & S_2 & S_3 & S_5 & S_6 & S_9 & S_{10} & \\ \hline A & 1 & & & & 1 & & 2 \\ B & & 1 & & & 1 & & 2 \\ C & 1 & & & & & 1 & 2 \\ D & 1 & 1 & & & & & 2 \\ E & \textcircled{1} & & & & & & \textcircled{1} \\ F & & & \textcircled{1} & & & & \textcircled{1} \\ G & 1 & & & & 1 & & 2 \\ H & 1 & & & & 1 & & 2 \\ I & & & 1 & 1 & & & 2 \\ \hline p_j & 2 & 1 & 1 & 1 & 2 & & \end{array}$$

Si no hay más columnas que puedan eliminarse de la matriz y si todo ciclo tiene un rango mayor de uno, se obtendrá una de las siguientes situaciones:

- (i) los  $p_j$ 's para toda  $j$  de la matriz son los mismos;
- (ii) los  $p_j$ 's no son los mismos .

Si ocurre el caso (i), se empleará el Algoritmo 2. En el caso (ii), el siguiente procedimiento es requerido.

ALGORITMO 4

La matriz mostrada en seguida, la cual ha sido modificada para propósitos de ilustración de modo que falle el Algoritmo 3.

	$s_2$	$s_3$	$s_5$	$s_6$	$s_9$	$s_{10}$	
A	1					1	2
B		1				1	2
C	1					1	2
D	1	1					2
E	1		1				2
F			1	1			2
G	1				1		2
H	1				1		2
I			1	1			2
$p_j$	2	1(2)	3	1	2		

	$s_6'$	$s_6''$	
A			
B			
C			
D			
E	1		
F		1	
G			
H			
I			
$p_j$	1	2	

	$s_6'g_6''$	
A		
B		
C		
D		
E	1	
F		1
G		
H		
I		
$p_j$	2	1

ALGORITMO 4 .

Una columna se divide en un número de pseudo-columnas tal que al menos una de las pseudo-columnas esté estrictamente contenida en alguna de las columnas de la matriz.

El peor caso hacia el que conduce el Algoritmo 4 es - un caso donde el Algoritmo 2 puede ser usado. Esto es, los valores de todas las  $p_j$ 's son iguales y cada ciclo tiene rango mayor de uno.

El valor mayor de los  $p_j$ 's es 3 para la columna  $S_6$ . Sin embargo, la columna  $S_6$  no puede eliminarse, puesto que no existe alguna serie de columnas que estrictamente contenga a la columna  $S_6$ . De hecho, la serie  $S_2, S_5$  contiene (no estrictamente) la columna  $S_6$ , pero la suma de los  $p_j$ 's de esta serie es 4, que es mayor que 3. En el Algoritmo 4, la columna  $S_6$  es dividida en dos pseudo-columnas como se muestra. Tomando el segundo caso de la división de la columna  $S_6$ , la pseudo-columna  $S_6^1$  está estrictamente contenida en  $S_2$  y puesto que la pseudo-columna  $S_6^2$  es eliminada de la matriz para obtener la siguiente:

	$S_2$	$S_3$	$S_5$	$S_6^1$	$S_6^2$	$S_9$	$S_{10}$	
A	1					1		2
B			1			1		2
C	1					1		2
D	1	1						2
E	1							(1)
F			1	1				2
G	1					1		2
H	1					1		2
I			1			1		2
$p_j$	2	1	2	1	1	2		

Puesto que la hilera E tiene sólo un elemento igual a 1 y éste aparece en la columna  $S_2$  como una corriente de -- reciclo y eliminando la columna correspondiente de la matriz junto con las hileras A,C,D,E,G, y H . La matriz resultante es :

	$S_5$	$S_6$	$S_9$	$S_{10}$	
B	1		1		2
F	1	1			2
I	1		1		2
$p_j$	2	1	1	2	

	$S_5$	$S_6$	$S_9$	
B	1			(1)
F	1	1		2
I	1		1	2
$p_j$	2	1	1	

La columna  $S_{10}$  es estrictamente contenida en la columna  $S_5$  y por lo tanto eliminada de la matriz. Esto produce la hilera B con un solo elemento en la columna  $S_5$ . La selección de la columna  $S_5$  remueve todos los ciclos restantes. Así, -- las corrientes de reciclo que producen el orden de etapa óptimo con el mínimo número de parámetros de reciclo ha sido seleccionada. Para éste caso, las corrientes de reciclo son -- las columnas  $S_2$  y  $S_5$  y el mínimo número de parámetros de reciclo correspondientes es 3.

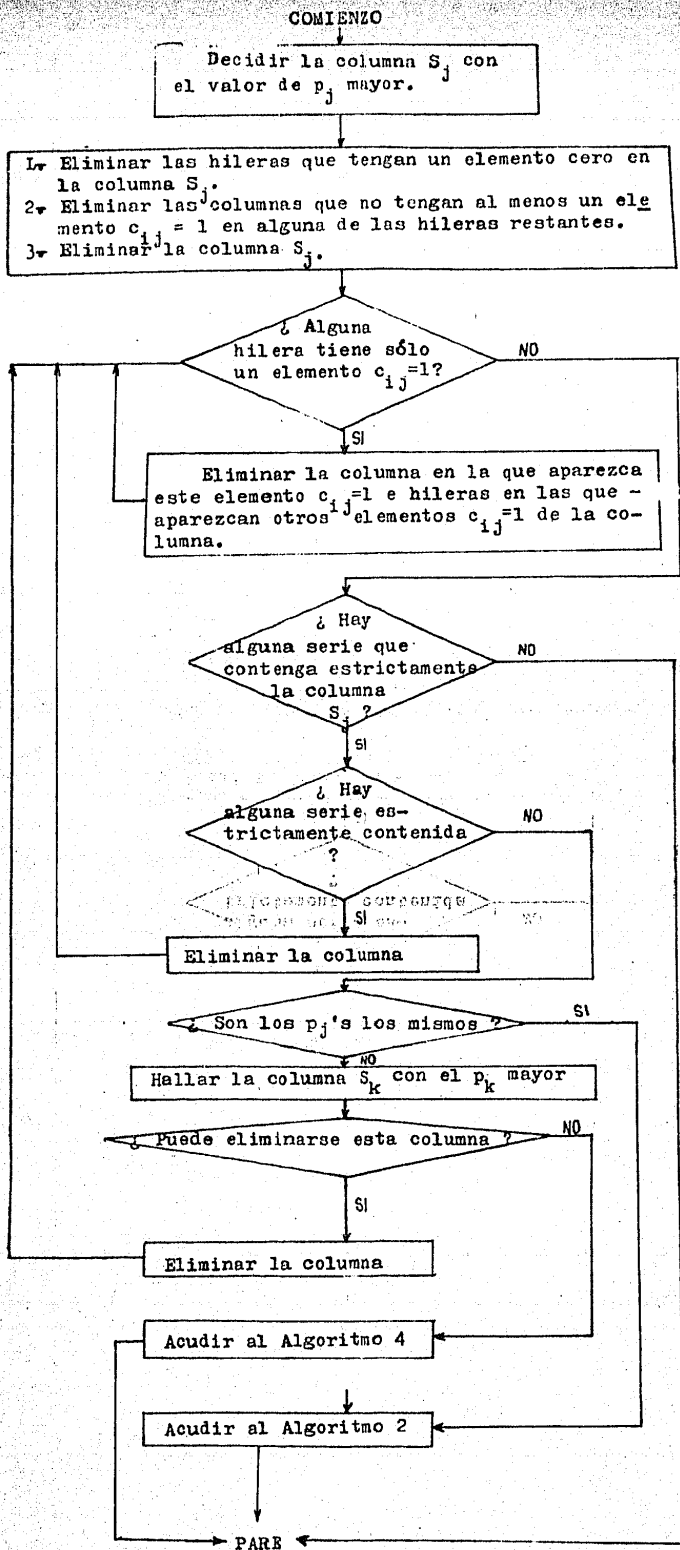


Fig. 46. Diagrama de flujo del Algoritmo 3.

Sumarizando la aplicación de estos algoritmos,

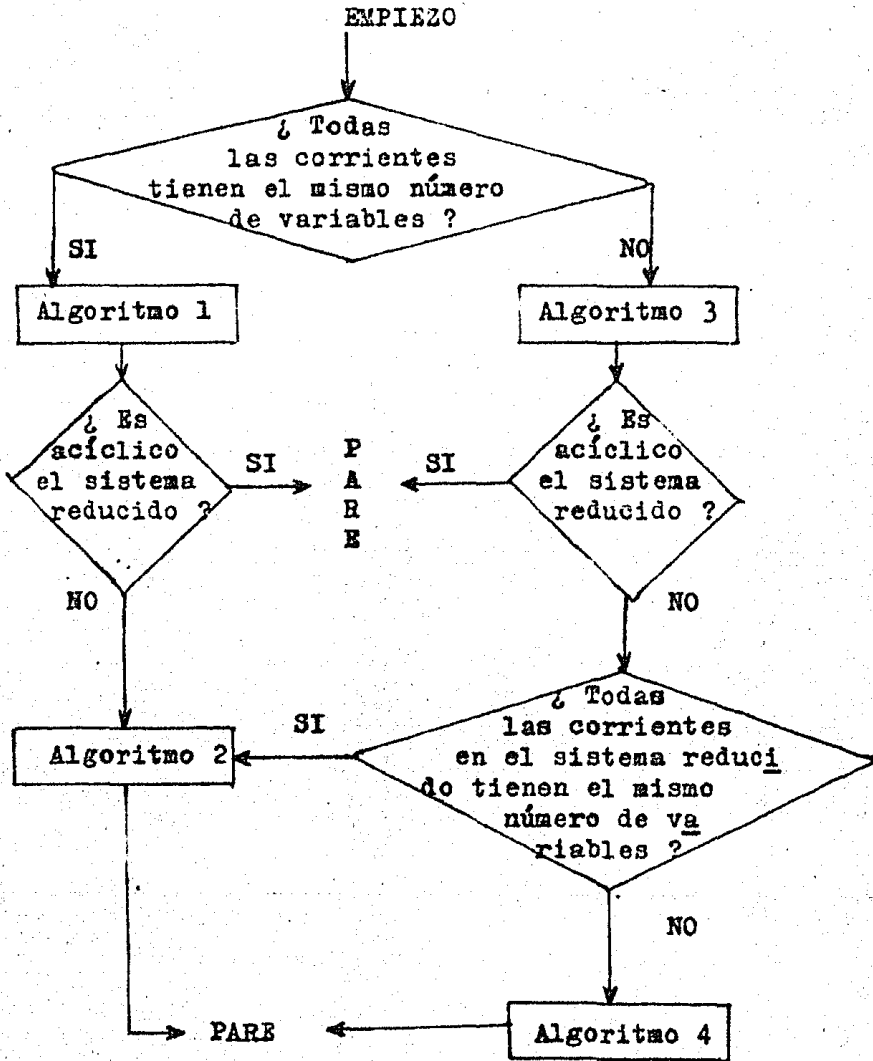


Fig.47 Diagrama de flujo para la estimación del mínimo número de corrientes de reciclo.



**METODOS DE CONVERGENCIA**

## VIII.- METODOS DE CONVERGENCIA

Después de establecida la secuencia de cálculo y las y las corrientes que deben suponerse para el cálculo de -- recirculaciones, la dificultad a enfrentar, es cómo volver a estimar el valor de las variables de una cierta corriente para lograr que el valor calculado corresponda con el supuesto, es decir, que converja a la solución.

El problema estriba en hacer coincidir los valores -- supuestos con los calculados. Esto puede lograrse mediante los métodos siguientes,

Los métodos de convergencia se dividen en dos clases:

- A.) Métodos que requieren valores de las funciones y sus derivadas.
- B.) Métodos que requieren valores sólo de sus funciones.

El método de Newton y los métodos Cuasi-Newton son generalmente los más prometedores de estas dos clases. Sin -- embargo, debido a sus grandes requerimientos de espacio de - almacenaje en computadora y algunas otras razones, métodos más simples han sido sugeridos. Estos son, sin embargo, menos eficientes.

Los rasgos distintivos deseables en el método candidato incluye simplicidad, pequeños espacios de almacenaje, y razonable velocidad de convergencia.

METODO DE SUBSTITUCIONES SUCESIVAS O DIRECTAS.

El método de substituciones sucesivas es el más sencillo, y consiste en reemplazar el valor calculado como nueva suposición de la siguiente iteración; esto es,

$$x_{k+1} = y_k \quad (18)$$

donde,  $x_k$ , es el valor supuesto en la iteración  $k$ .

$y_k$ , es el valor calculado en la iteración  $k$

$x_{k+1}$ , es el valor supuesto en la iteración  $k+1$

Este método converge para cualquier sistema con recirculaciones, siempre que el valor estimado se encuentre cercano a la solución; pero puede ser lento para converger.

Para empezar la iteración un valor inicial debe ser obtenido gráficamente o de algún otro modo.

La condición suficiente para convergencia es:

$$\left| \frac{\partial f_i}{\partial x_1} \right| + \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_2} \right| + \dots + \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_n} \right| < 1 \quad , \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (19)$$

cerca de la iteración de la solución real.

METODO DE WEGSTEIN Y DEL VALOR PROPIO DOMINANTE

El método de Wegstein es una variante del método anterior, que acelera la convergencia de una sola variante, éste asume dos iteraciones previas  $x_{k-1}$  produciendo  $Y_k$  y  $X_k$  produciendo  $Y_{k+1}$  que hayan sido efectuadas. El valor acelerado para  $x_{j,k+1}^a$  es entonces calculado por extrapolación (o interpolación) de la línea recta que pasa a través de los puntos  $(x_{j,k-1}, y_{j,k-1}), (x_{j,k}, y_{j,k})$  hasta el punto donde aparece  $x_{j,k+1}^a$  que igualará  $y_{j,k+1}$ ; esto se muestra de la siguiente manera:

$$y_{j,k} = ax_{j,k} + b \quad (20)$$

$$y_{j,k-1} = ax_{j,k-1} + b \quad (21)$$

para resolver a y b, la solución aparente cuando  $y_{j,k} = x_{j,k}$  es  $b/(1-a)$ , y el nuevo valor a suponer es probado igual a éste, entonces la ecuación para esta extrapolación es:

$$x_{j,k+1} = x_{j,k} + q(y_{j,k} - x_{j,k}) \quad (22)$$

donde,

$$q = \frac{(x_{j,k} - x_{j,k-1})}{(x_{j,k} - x_{j,k-1}) - (y_{j,k} - y_{j,k-1})} \quad (23)$$

siendo q el parámetro de aceleración.

Comportamiento del proceso de sustituciones sucesivas:	Rango de q óptimo:
Convergencia monotónica	$q < 0$
Convergencia Oscilatoria	$0 < q < 0.5$
Divergencia Oscilatoria	$0.5 < q < 1.0$
Divergencia Monotónica	$q > 1.0$

Orbach and Crowe ( 23) propusieron el método del valor propio dominante; su principal diferencia del método de Wegstein, es que sólo es aplicado después de que un esquema iterativo exhibe una aproximación asintótica a la solución caracterizada por

$$\lambda = \frac{x_{j,k} - x_{j,k-1}}{x_{j,k-1} - x_{j,k-2}} \quad (24)$$

donde  $\lambda$ , es un valor propio dominante, constante para toda  $j$  para dos o más iteraciones consecutivas. El paso de aceleración está dado también por la ecuación (22), pero ahora

$$q = \frac{\lambda}{\lambda - 1} \quad (25)$$

La condición necesaria suficiente para que exista convergencia, es que  $|\lambda| < 1$ .

El método del valor propio dominante tiene la ventaja, sobre el de Wegstein, de que toma en cuenta las interacciones entre las variables.

#### METODO DE NEWTON

La fórmula de iteración para este método es la siguiente:

$$x_{k+1} = x_k - \left( \frac{f}{x} \right)_{x=x_k}^{-1} \cdot f_i \quad (26)$$

Este es caracterizado por su rápida convergencia cuando el valor supuesto inicialmente  $x_0$  es cercano a la solución.

Sin embargo, se requiere la evaluación de una matriz nxn de las funciones derivadas (el Jacobiano) también como la solución de n ecuaciones simultáneas. Varios métodos han sido sugeridos para aproximar el Jacobiano, siendo el más utilizado en ingeniería química El Método de Broyden.

METODO DE BROYDEN

El cálculo de la recirculación se puede expresar de la siguiente manera:

$$f(x) = y - x = 0$$

La forma de estimar los nuevos valores de las variables para la siguiente iteración se hace según la siguiente relación:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k H_k f(x_k) \tag{27}$$

donde,  $\alpha_k$ , es un escalar,

$H_k$ , la aproximación negativa del Jacobiano.

El proceso se inicia haciendo H igual a la matriz identidad y  $\alpha=1$ . En las iteraciones subsiguientes H se corrige de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$H_{k+1} = \frac{H_k - (\alpha_k P_k + H_k y_k) Z^T H_k}{Z^T H_k y_k} \tag{28}$$

donde,  $y_k = f(x_{k+1}) - f(x_k)$

$$P_k = x_{k+1} - x_k$$

$Z$  = vector arbitrario.

Broyden propone que  $Z = P$ , sin embargo como lo han propuesto otros autores, se puede definir de otras maneras (34).

Las pruebas de convergencia que han sido más ampliamente aceptados son:

$$\sum (x_{k-1,j} - x_{k,j})^2 \leq \epsilon \quad (29)$$

$$\left| \frac{x_{k-1,j} - x_{k,j}}{x_{k-1,j}} \right| \leq \epsilon \quad (30)$$

donde  $\epsilon$  es una pequeña tolerancia fijada por el usuario.

EJEMPLC DE APLICACION

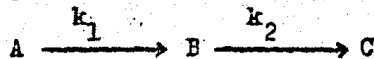


En el proceso hipotético propuesto por Rosen (28), mostrado en la figura 48, se desea encontrar los valores de los flujos de materia en todas las corrientes del proceso. Para ello se tienen los datos siguientes:

Corriente de alimentación

Componente	lb. mol/hr.
A	970.
B	30.
C	0.

Las siguientes reacciones ocurren en cada reactor,



La salida de cada reactor en términos de la entrada, de cada componente está dada por las siguientes ecuaciones:

$$n_A = n_{A0} / (1 + k_1 \theta)$$

$$n_B = n_{B0} / (1 + k_2 \theta) + k_1 n_A \theta / (1 + k_2 \theta)$$

$$n_C = n_{C0} + k_2 \theta n_B$$

donde  $n_A, n_B, n_C$  y  $n_{A0}, n_{B0}, n_{C0}$  son las lb mol/hr. de A, B, y C saliendo y entrando al reactor, respectivamente.

	CSTR 1	CSTR 2
$k_1, \text{hr.}^{-1}$	0.211	0.440
$k_2, \text{hr.}^{-1}$	0.101	0.219
tiempo de residencia		
$\theta, \text{hr.}$	1.5	2.0

Unidad Flash -Isotérmica :

$T = 40^{\circ}F$  y  $P = 200 \text{ lb/in}^2$  (abs.)

Componente	K
A	2.523
B	1.570
C	0.0329

Fracciones divididas en los Separadores :

Separador 4

Componente	Corriente 10	Corriente 11
A	0.9	0.1
B	0.5	0.5
C	0.8	0.2

Separador 5

Componente	Corriente 8	Corriente 9
A	0.25	0.75
B	0.25	0.75
C	0.25	0.75

Separador 6

Componente	Corriente 12	Corriente 13	Corriente 14
A	0.8	0.1	0.1
B	0.6	0.4	0.0
C	0.2	0.4	0.4

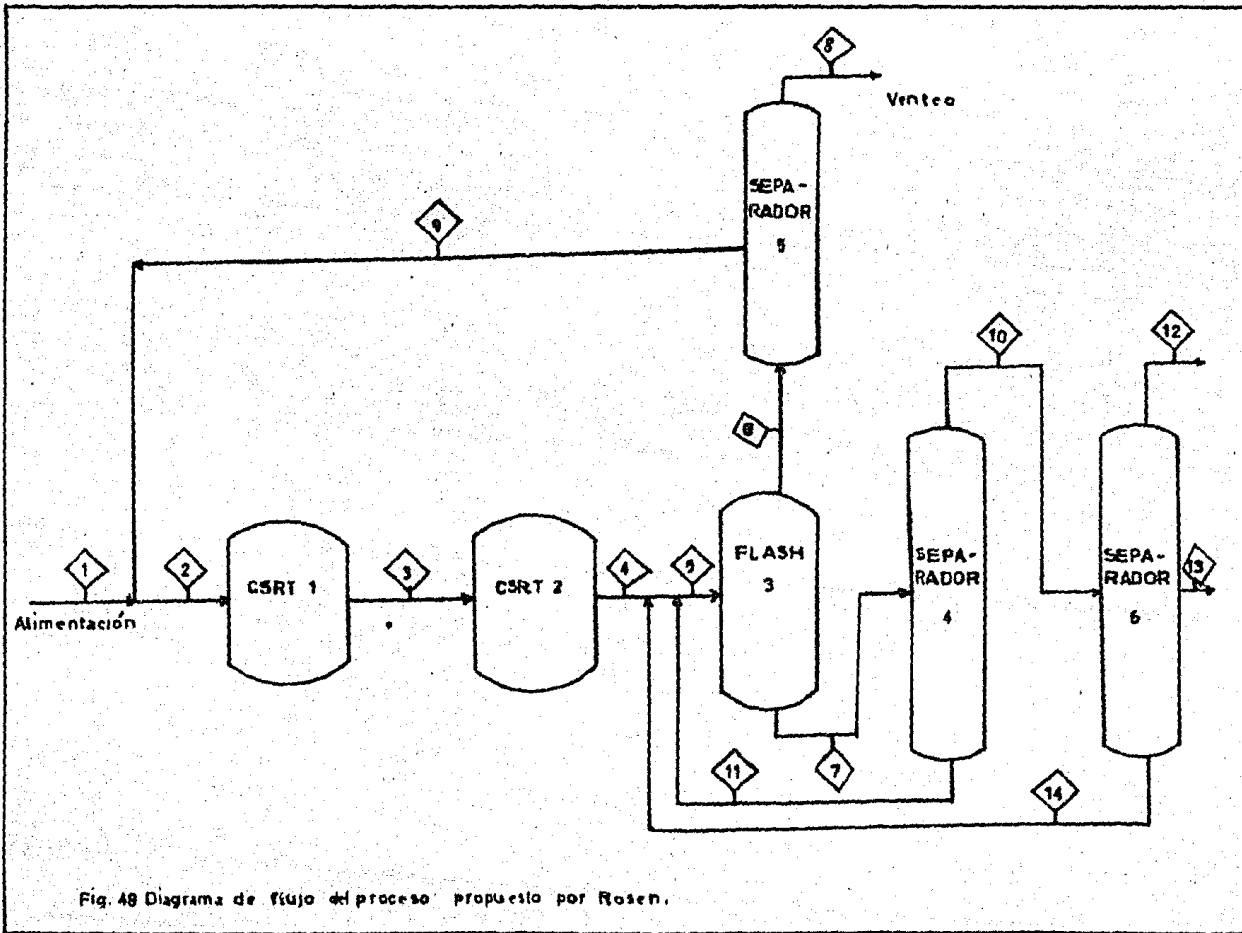


Fig. 48 Diagrama de flujo del proceso propuesto por Rosen.

Tabla 3 .Análisis de grados de libertad para el diagrama de flujo en la figura 48 .

ELEMENTO	$N_V^e$	$N_C^e$	$N_I^e = N_V^e - N_C^e$
Reactor 1	$2(c+2)+r$	$c+2$	$c+2+r$
Reactor 2	$2(c+2)+r$	$c+2$	$c+2+r$
Flash 3	$3(c+2)$	$2(c+2)$	$c+2$
Separador 4	$3(c+2)$	$2(c+2)$	$c+2$
Separador 5	$3(c+2)$	$2(c+2)$	$c+2$
Separador 6	$4(c+2)$	$3(c+2)$	$c+2$
Mezclador 7	$3(c+2)$	$c+2$	$2c+4$
Mezclador 8	$4(c+2)$	$c+2$	$3c+6$
TOTALES:	$24(c+2)+2r$	$13(c+2)$	$11c+22+2r$

Número de intercorrientes = 10 , entonces  $N_C^u = 10(c+2)$   
 y  $N_V^u = \sum N_I^e = 11c + 22 + 2r$  .

Así,  $N_I^u = N_V^u - N_C^u = c + 2 + 2r$  grados de libertad.

Ahora, puesto que se conocen las variables siguientes:  
 $n_{5A}, n_{5B}, n_{5C}$ , (de la corriente de alimentación 1 );  
 Temperatura y Presión de la unidad de flash ;  
 $2r = 4$  reacciones químicas (2 por cada reactor).

Este número de variables especificadas agotan los  $(c + 2 + 2r)$  grados de libertad necesarios para determinar el proceso completamente. Por lo cual el modelo matemático representando el proceso analizado , debe cumplir con :  $N_V^u = N_C^u$ .

El modelo matemático representando éste proceso es el siguiente:

MODELO MATEMATICO DEL PROCESO.

UNIDAD DE FLASHEO

Balances de materia por componente:

$$n_{7A} = n_{5A} - n_{6A} \quad (f_1)$$

$$n_{7B} = n_{5B} - n_{6B} \quad (f_2)$$

$$n_{7C} = n_{5C} - n_{6C} \quad (f_3)$$

Relaciones de equilibrio:

$$n_{6A} = n_{5A} V K_A / (1 - V(1 - K_A)) \quad (f_4)$$

$$n_{6B} = n_{5B} V K_B / (1 - V(1 - K_B)) \quad (f_5)$$

$$n_{6C} = n_{5C} V K_C / (1 - V(1 - K_C)) \quad (f_6)$$

Relación de división de la corriente  $S_6$ :

$$(n_{6A} + n_{6B} + n_{6C}) / (n_{5A} + n_{5B} + n_{5C}) = V \quad (f_7)$$

UNIDAD DE SEPARACION 5

Relaciones de distribución de los componentes A, B y C en las corrientes  $S_8$  y  $S_9$ :

$$n_{8A} = n_{6A} R_A \quad (f_8)$$

$$n_{8B} = n_{6B} R_B \quad (f_9)$$

$$n_{8C} = n_{6C} R_C \quad (f_{10})$$

$$n_{9A} = n_{6A} (1 - R_A) \quad (f_{11})$$

$$n_{9B} = n_{6B} (1 - R_B) \quad (f_{12})$$

$$n_{9C} = n_{6C} (1 - R_C) \quad (f_{13})$$

UNIDAD DE SEPARACION 4

Relaciones de distribución de los componentes A, B y C en las corrientes  $S_{10}$  y  $S_{11}$  :

$$\begin{aligned}n_{10A} &= n_{7A} R_A^i && (f_{14}) \\n_{10B} &= n_{7B} R_B^i && (f_{15}) \\n_{10C} &= n_{7C} R_C^i && (f_{16}) \\n_{11A} &= n_{7A} (1-R_A^i) && (f_{17}) \\n_{11B} &= n_{7B} (1-R_B^i) && (f_{18}) \\n_{11C} &= n_{7C} (1-R_C^i) && (f_{19})\end{aligned}$$

UNIDAD DE SEPARACION 6

Relaciones de distribución de los componentes A, B y C en las corrientes  $S_{12}$ ,  $S_{13}$  y  $S_{14}$  :

$$\begin{aligned}n_{12A} &= n_{10A} R_A^{ii} && (f_{20}) \\n_{12B} &= n_{10B} R_B^{ii} && (f_{21}) \\n_{12C} &= n_{10C} R_C^{ii} && (f_{22}) \\n_{14A} &= n_{10A} R_A^{iii} && (f_{23}) \\n_{14B} &= n_{10B} R_B^{iii} && (f_{24}) \\n_{14C} &= n_{10C} R_C^{iii} && (f_{25}) \\n_{13A} &= n_{10A} (1-R_A^{ii}-R_A^{iii}) && (f_{26}) \\n_{13B} &= n_{10B} (1-R_B^{ii}-R_B^{iii}) && (f_{27}) \\n_{13C} &= n_{10C} (1-R_C^{ii}-R_C^{iii}) && (f_{28})\end{aligned}$$

MEZCLADOR 7

Balances de materia por componente:

$$\begin{aligned}n_{2A} &= n_{1A} + n_{9A} && (f_{29}) \\n_{2B} &= n_{1B} + n_{9B} && (f_{30}) \\n_{2C} &= n_{1C} + n_{9C} && (f_{31})\end{aligned}$$

REACTOR 1

$$\begin{aligned} n_{3A} &= n_{2A}/(1+k_1\theta) & (f_{32}) \\ n_{3B} &= (n_{2B}/(1+k_2\theta)) + (n_{3A}k_1\theta/(1+k_2\theta)) & (f_{33}) \\ n_{3C} &= n_{2C} + k_2\theta n_{3B} & (f_{34}) \end{aligned}$$

REACTOR 2

$$\begin{aligned} n_{4A} &= n_{3A}/(1+k_1\theta) & (f_{35}) \\ n_{4B} &= (n_{3B}/(1+k_2\theta)) + (n_{4A}k_1\theta/(1+k_2\theta)) & (f_{36}) \\ n_{4C} &= n_{3C} + k_2\theta n_{4B} & (f_{37}) \end{aligned}$$

MEZCLADOR 8

Balances de materia por componente:

$$\begin{aligned} n_{5A} + n_{4A} + n_{11A} + n_{14A} & & (f_{38}) \\ n_{5B} + n_{4B} + n_{11B} + n_{14B} & & (f_{39}) \\ n_{5C} + n_{4C} + n_{11C} + n_{14C} & & (f_{40}) \end{aligned}$$

Este modelo matemático comprende 40 ecuaciones independientes con 40 variables desconocidas; entonces, el número de variables de diseño o grados de libertad es cero.

### DETECCION DE CICLOS

La detección de los ciclos en el proceso es efectuada mediante potencias sucesivas de la matriz de adyacencia

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1							
2								1
3			1	1				
4					1	1		
5						1		
6								1
7	1							
8			1					

Matriz A

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1							1
2		1						
3			1	1	1			
4			1				1	
5				1				
6					1			
7	1							
8			1	1				

Matriz A<sup>2</sup>

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1							
2		1	1					
3			1	1				1
4			1	1	1			
5				1				
6					1	1		
7	1							
8			1	1				1

Matriz A<sup>3</sup>

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1			1	1			
2		1			1	1	1	
3			1	1	1	1		
4			1	1	1	1	1	
5					1			
6						1	1	
7	1							
8			1					1

Matriz A<sup>4</sup>

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1					1	1	1
2		1						1
3			1	1	1	1	1	
4			1	1			1	1
5				1				
6					1			1
7	1							
8			1	1	1	1		

Matriz A<sup>5</sup>

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1							1
2		1	1	1	1			
3			1	1			1	1
4			1	1	1	1		1
5					1	1		
6						1	1	1
7	1							1
8			1	1	1	1		1

Matriz A<sup>6</sup>

Los ciclos encontrados son tres, y son los siguientes:

- 1<sup>er</sup> Ciclo: formado por los nodos 3, 4, y 8.
- 2<sup>o</sup> Ciclo: integrado por los nodos 3, 4, 6 y 8.
- 3<sup>er</sup> Ciclo: formado por los nodos 1, 2, 3, 4, 5, 7 y 8.

En la matriz A<sup>7</sup> aparece el ciclo encontrado en la matriz A<sup>4</sup>, y la matriz A<sup>8</sup> también es una repetición de algunas de las anteriores.

En éste caso, los ciclos 1<sup>o</sup> y 2<sup>o</sup> sí concuerdan con el



diagrama de flujo, pero el 3<sup>o</sup> no. Para que este último con---  
 cuerde ; es necesario no tomar en cuenta el nodo 4 para que  
 así el tercer ciclo esté constituido sólo por los nodos 1, 2  
 3, 5, 7 y 8. Estos tres ciclos son encontrados también efectu  
 ando un análisis físico directamente sobre el diagrama de -  
 flujo.

Así, los tres ciclos encontrados y sus corrientes res-  
 pectivas son los siguientes:

Ciclo	Corrientes	nodos
1 <sup>er</sup> ciclo, (A)	$S_5, S_7$ y $S_{11}$	3, 4 y 8
2 <sup>o</sup> ciclo, (B)	$S_5, S_7, S_{10}$ y $S_{14}$	3, 4, 6 y 8
3 <sup>er</sup> ciclo, (C)	$S_5, S_6, S_9, S_4, S_3$ y $S_2$	7, 1, 2, 8, 3 y 5

siendo la matriz ciclos/corrientes la siguiente:

	$S_2$	$S_3$	$S_4$	$S_5$	$S_6$	$S_7$	$S_9$	$S_{10}$	$S_{11}$	$S_{14}$	Grado del ciclo
A				1		1			1		3
B				1		1		1		1	4
C	1	1	1	1	1		1				6
$P(S_1)$	1	1	1	3	1	2	1	1	1	1	

En éste caso, puesto que todas las corrientes están de-  
 finidas por un mismo número de variables, entonces utilizan-  
 do el Algoritmo I de Lee-Rudd:

Como la frecuencia de la columna  $S_5, P(S_5)$ , es mayor -  
 que la de las demás columnas que tienen elementos iguales a  
 1, y puesto que estas columnas tienen sus 1's en todas las  
 hileras donde la columna  $S_5$  tiene sus 1's, entonces todas és  
 tas columnas están contenidas en la columna  $S_5$ .

Así,

	$S_5$	
A	1	(1)
B	1	(1)
C	1	(1)
	3	

se selecciona a la corriente  $S_5$  como la corriente de recirculación a suponer. Esta corriente rompe los tres ciclos.

Y ahora, analizando el diagrama de flujo con la corriente  $S_5$  como conocida, se obtiene la siguiente secuencia de cálculo de las unidades:

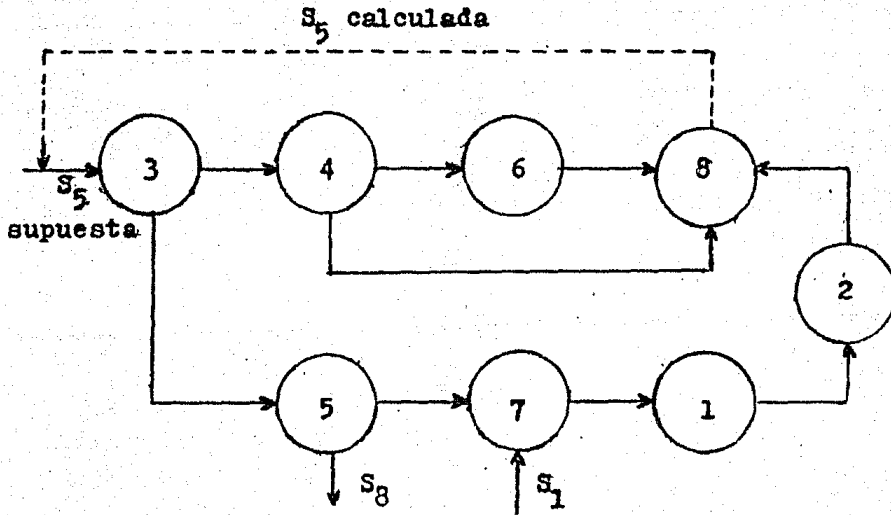


Fig. 49 Diagrama de flujo de información de los módulos o unidades de cálculo.

En la matriz de ocurrencia de la figura 50 las ecuaciones eliminadas con sus respectivas variables de salida son las siguientes, en el orden establecido :

$$f_8 \longrightarrow n_{8A} ; f_9 \longrightarrow n_{8B} ; f_{10} \longrightarrow n_{8C} ; f_{20} \longrightarrow n_{12A}$$

$$f_{21} \longrightarrow n_{12B} ; f_{22} \longrightarrow n_{12C} ; f'_{26} \longrightarrow n_{13A} ; f_{27} \longrightarrow n_{13B}$$

$$f_{28} \longrightarrow n_{13C} .$$

Luego, puesto que  $\rho(x_j)_{\text{mín.}}=2$ , es necesario eliminar una ecuación (la cual produzca un mayor grado de aciclicidad), siendo ésta ecuación eliminada  $f_{40}$ . Produciéndose la matriz de ocurrencia reducida de la figura 51. Luego las ecuaciones eliminadas y sus variables respectivas son:

$$f_{19} \longrightarrow n_{11C}, f_{25} \longrightarrow n_{14C}, f_{37C} \longrightarrow n_{4C} ; f_{16} \longrightarrow n_{10C}, f_{34} \longrightarrow n_{3C} ; f_3 \longrightarrow n_{7C}, f_{31} \longrightarrow n_{2C} ; \text{ y } f_{13} \longrightarrow n_{19C} .$$

De nuevo  $\rho(x_j)_{\text{mín.}}=2$ , entonces es necesario eliminar otra ecuación, siendo ésta la  $f_{39}$ . Así, es obtenida la matriz de la figura 52.a, y las ecuaciones y variables eliminadas de ésta matriz son:  $f_{18} \longrightarrow n_{11B}, f_{24} \longrightarrow n_{14B}, f_{36} \longrightarrow n_{4B} ; f_{15} \longrightarrow n_{10B}, f_{33} \longrightarrow n_{3B} ; f_2 \longrightarrow n_{7B}, f_{30} \longrightarrow n_{2B} ; f_{12} \longrightarrow n_{9B} .$

Luego,  $\rho(x_j)_{\text{mín.}}=2$ , entonces eliminando la ecuación  $f_{38}$  se produce la matriz de la figura 52.b. Por lo tanto, continuando con el algoritmo de eliminación, las ecuaciones y variables eliminadas en ésta matriz son las siguientes:

$$f_{17} \longrightarrow n_{11A}, f_{23} \longrightarrow n_{14A}, f_{35} \longrightarrow n_{4A} ; f_{14} \longrightarrow n_{10A}, f_{32} \longrightarrow n_{3A} ; f_1 \longrightarrow n_{7A}, f_{29} \longrightarrow n_{2A} ; \text{ y } f_{11} \longrightarrow n_{9A} .$$

En la matriz de la figura 52.c,  $\rho(x_j)_{\text{mín.}}=2$ , por lo cual es necesario eliminar una ecuación, la  $f_7$ , produciéndose la de la figura 52.d de donde se eliminan las siguientes ecua--

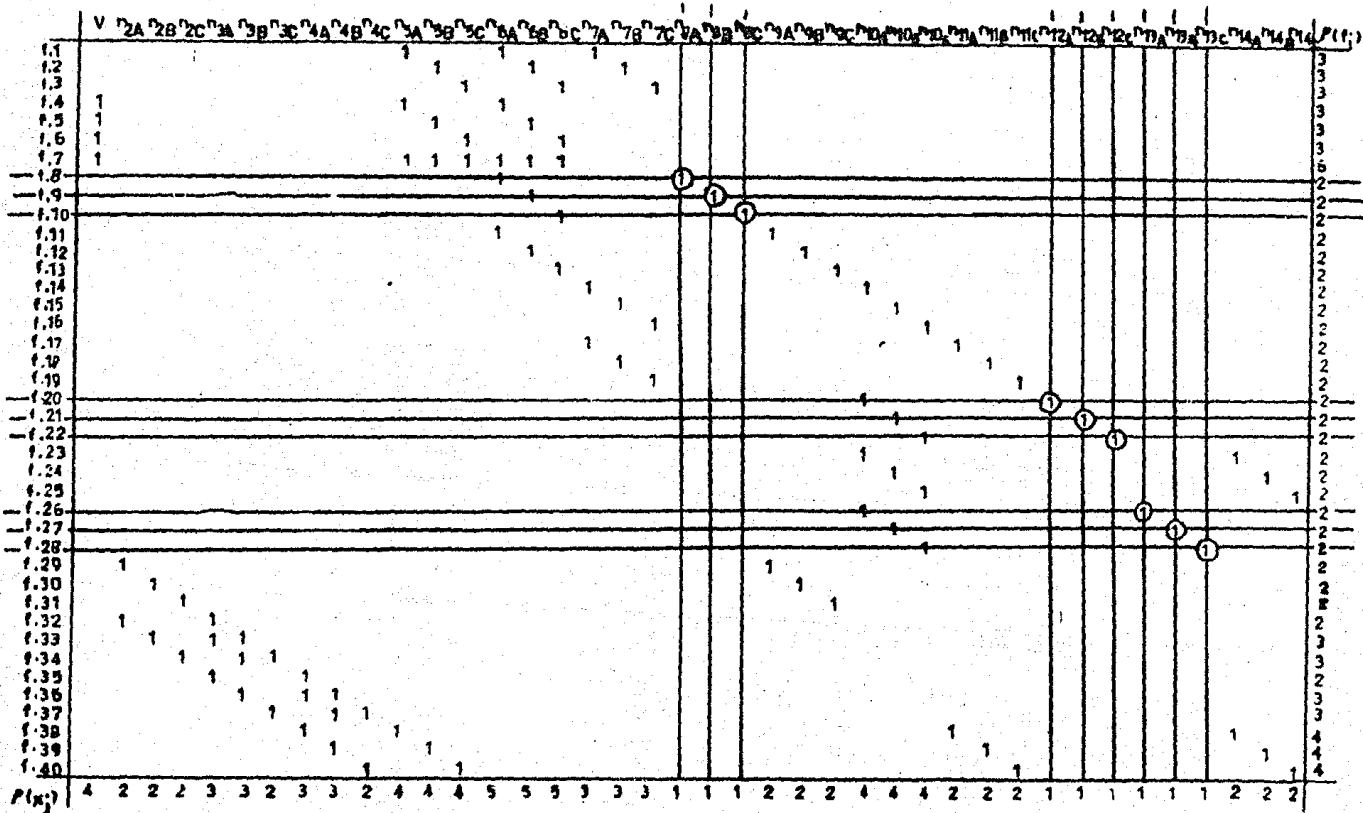


Fig. 90. Matrix de ocorrência inicial.

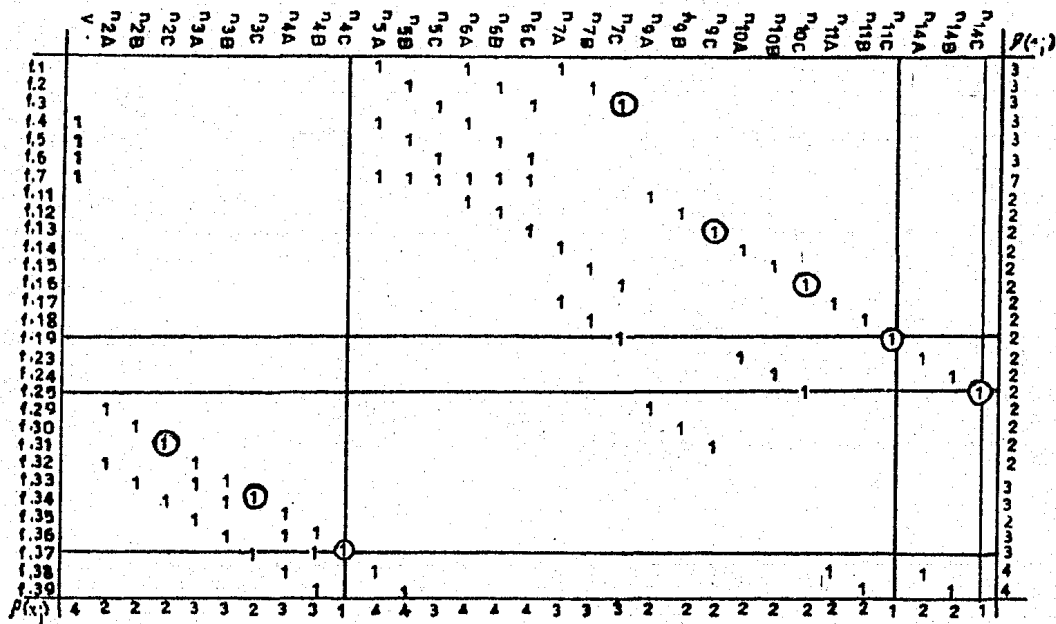


Fig. 31 Matriz reducida

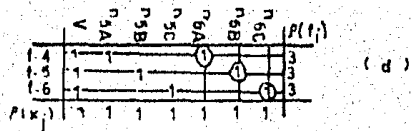
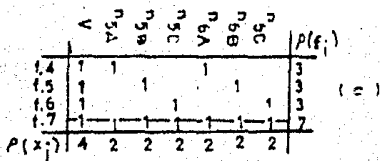
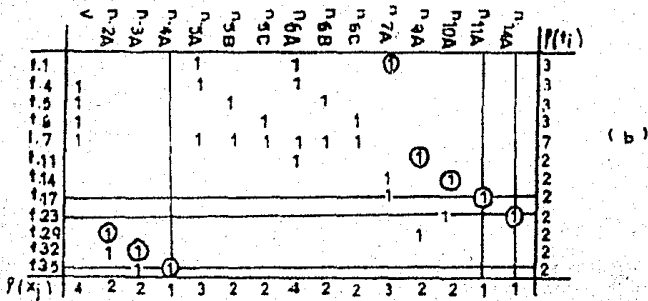
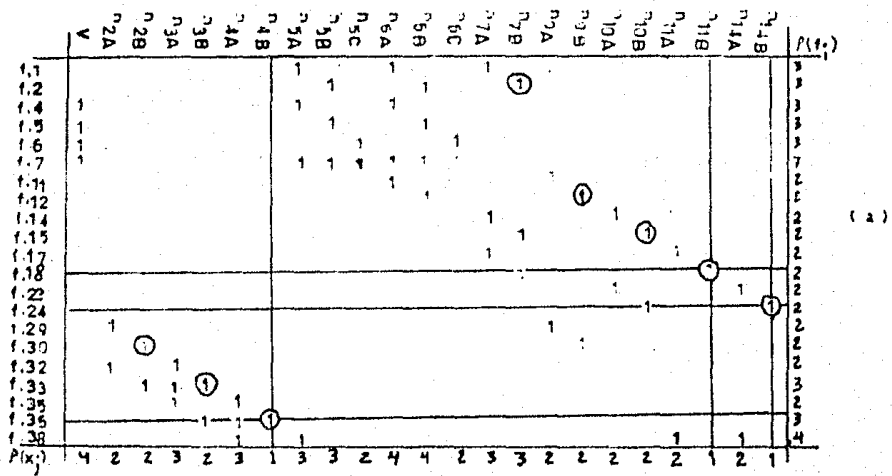


Fig 52 Continuation del procedimiento de eliminación

ciones y variables,  $f_4 \rightarrow n_{6A}$ ,  $f_5 \rightarrow n_{6B}$ , y  $f_6 \rightarrow n_{6C}$ ; y las variables iterativas (las variables restantes las cuales tienen  $p(x_j)=0$ ) son las variables de salida de las ecuaciones eliminadas en los cortes efectuados, o sea  $f_7 \rightarrow V$ ,  $f_{38} \rightarrow n_{5A}$ ,  $f_{39} \rightarrow n_{5B}$ , y  $f_{40} \rightarrow n_{5C}$ . Así, el orden de la secuencia de cálculo de las ecuaciones está dado en la tabla 4.

Para disminuir el tiempo de cálculo de este sistema de ecuaciones, se efectúan sustituciones para disminuirlo a un sistema de 7 ecuaciones con 7 incógnitas:

$$n_{6A} = n_{5A} V(2.523)/(1-1.523V) \quad (f_4)$$

$$n_{6B} = n_{5B} V(1.57)/(1-0.57V) \quad (f_5)$$

$$n_{6C} = n_{5C} V(0.0329)/(1+0.9671V) \quad (f_6)$$

$$(n_{6A} + n_{6B} + n_{6C}) / (n_{5A} + n_{5B} + n_{5C}) = V \quad (f_7)$$

Sustituyendo en la ecuación  $f_{38}$  las ecuaciones  $f_{35}, f_{17}, f_{23}, f_{32}, f_1, f_{14}, f_{29}$ , y  $f_{11}$  y los valores de las variables conocidas se obtiene

$$n_{5A} = 391.9125 + 0.1130251(n_{6A}) + 0.19(n_{5A})_{\text{supuesto}} \quad (f_{38a})$$

Calc.  
lado. esto.

Sustituyendo en la ecuación  $f_{39}$  las ecuaciones  $f_{36}, f_{18}, f_{24}, f_{15}, f_2, f_{33}, f_{30}, f_{32}, f_{29}, f_{11}, f_{30}, f_{12}$ , y los valores de las variables conocidas,

$$n_{5B} = 398.7797 + 0.29432(n_{6A}) - 0.047(n_{6B}) + 0.5(n_{5B})_{\text{supuesto}} \quad (f_{39.a})$$

calc.

Sustituyendo en la ecuación  $f_{40}$  las ecuaciones  $f_{37}, f_{19}, f_{25}, f_{16}, f_3, f_{34}, f_{36}, f_{31}, f_{33}, f_{35}, f_{13}, f_{30}, f_{32}, f_{29}, f_{11}, f_{12}$ , y los valores de las variables conocidas, se obtiene:

$$n_{5C} = 209.2929 + 0.152637(n_{6A}) + 0.297(n_{6B}) + 0.23(n_{6C}) + 0.52(n_{5C})_{\text{supuesto}} \quad (f_{40.a})$$

calc.

<u>Orden de ecuación</u>	<u>número de ecuación</u>	<u>variable de salida</u>	<u>Información</u>
1	f4	n6A	Suponer n <sub>5A</sub> y V
2	f5	n6B	Suponer n <sub>5B</sub>
3	f6	n6C	Suponer n <sub>5C</sub>
4	f7	V	Calcular V y
5	f11	n9A	checarlo con el
6	f29	n2A	supuesto.
7	f1	n7A	
8	f32	n3A	
9	f14	n10A	
10	f35	n4A	
11	f23	n14A	
12	f17	n11A	
13	f38	n5A	Calcular n <sub>5A</sub> y -
14	f12	n9B	checarlo con el
15	f30	n2B	supuesto.
16	f2	n7B	
17	f33	n3B	
18	f15	n10B	
19	f36	n4B	
20	f24	n14B	
21	f18	n11B	
22	f39	n5B	Calcular n <sub>5B</sub> y -
23	f13	n9C	checarlo con el
24	f31	n2C	supuesto.
25	f3	n7C	
26	f34	n3C	
27	f16	n10C	
28	f37	n4C	
29	f25	n14C	
30	f19	n11C	
31	f40	n5C	Calcular n <sub>5C</sub> y
32	f28	n13C	checarlo con el
33	f27	n13B	supuesto.
34	f26	n13A	
35	f22	n12C	
36	f21	n12B	
37	f20	n12A	
38	f10	n8C	
39	f9	n8B	
40	f8	n8A	

Tabla 4. . Secuencia de cálculo.



SECUENCIA DE CALCULO -

- 1.- Suponer valores para  $n_{5A}$ ,  $n_{5B}$ , y  $n_{5C}$ , y  $V$ .
- 2.- Calcular  $V$  mediante la ecuación  $f_7$ , y compararlo con el valor supuesto. Si no checan los valores de  $V$ , el supuesto y el calculado, suponer otro valor de  $V$ . Repetir éste paso hasta obtener el valor correcto.
- 3.- Continuar calculando los valores de  $n_{5A}$ ,  $n_{5B}$  y  $n_{5C}$  a partir de las ecuaciones  $f_{38.a}$ ,  $f_{39.a}$  y  $f_{40.a}$ , respectivamente. Y compararlos con los supuestos.
- 4.- Repetir los pasos 1, 2 y 3 hasta alcanzar la convergencia deseada; esto es, hasta que

$$\left| \frac{(n_{5j})_{\text{calculado}} - (n_{5j})_{\text{supuesto}}}{(n_{5j})_{\text{supuesto}}} \right| \leq 0.0001$$

Para obtener la solución de éste problema se utilizan los tres métodos de convergencia citados en el capítulo anterior. Los resultados son los siguientes:

METODO DE SUBSTITUCIONES SUCESIVAS.

ITERACION 1:

Suposiciones iniciales:

$$n_{5A} = 600 \text{ lbmol}$$

$$n_{5B} = 900 \text{ "}$$

$$n_{5C} = 700 \text{ "}$$

$V_{\text{supuesto}}$	0.5	0.35
$n_{6A}$	429.690	345.605
$n_{6B}$	549.805	412.297
$n_{6C}$	22.296	12.185
$V_{\text{calculado}}$	0.4554	0.35004

Puesto que  $V_{supuesto} = V_{calculado} = 0.35$ , entonces:

<u>Variable</u>	<u>valor calculado</u>	<u>Convergencia alcanzada</u>
n <sub>5A</sub>	544.979	0.0917016
n <sub>5B</sub>	931.096	0.0345513
n <sub>5C</sub>	751.366	0.0733803

ITERACION 2:

<u>Variable</u>	<u>Valores supuestos</u>	<u>Valores calculados</u>	<u>Convergencia alcanzada</u>
n <sub>5A</sub>	544.979	528.184	0.0308373
n <sub>5B</sub>	931.096	931.447	0.0003770
n <sub>5C</sub>	751.366	761.094	0.0129471
V	0.31	0.3078	0.0070968

ITERACION 3:

<u>Variable</u>	<u>Valores supuestos</u>	<u>Valores calculados</u>	<u>Convergencia alcanzada</u>
n <sub>5A</sub>	528.184	523.831	0.0082414
n <sub>5B</sub>	931.447	928.698	0.0029513
n <sub>5C</sub>	761.094	763.943	0.0024294
V	0.3078	0.3031	0.0152697

ITERACION 4:

<u>Variable</u>	<u>Valores supuestos</u>	<u>Valores calculados</u>	<u>Convergencia alcanzada</u>
n <sub>5A</sub>	523.831	522.417	0.00271
n <sub>5B</sub>	928.698	926.081	0.00281
n <sub>5C</sub>	763.943	762.774	0.00153
V	0.3031	0.29853	0.015077

ITERACION 5:

<u>Variable</u>	<u>Valores supuestos</u>	<u>Valores calculados</u>	<u>Convergencia alcanzada</u>
n <sub>5A</sub>	522.417	521.744	0.000825
n <sub>5B</sub>	926.081	924.000	0.001736
n <sub>5C</sub>	762.774	759.811	0.0045068
V	0.29853	0.29483	0.0124

ITERACION 6:

<u>Variable</u>	<u>Valores supuestos</u>	<u>Valores calculados</u>	<u>Convergencia alcanzada</u>
n <sub>5A</sub>	521.744	521.314	0.000825
n <sub>5B</sub>	924.0	922.395	0.001736
n <sub>5C</sub>	759.811	756.387	0.0045068
v	0.2948	0.2921	0.0091588

ITERACION 7:

<u>Variable</u>	<u>Valores supuestos</u>	<u>Valores calculados</u>	<u>Convergencia alcanzada</u>
n <sub>5A</sub>	521.314	521.015	0.0005725
n <sub>5B</sub>	922.395	921.193	0.001303
n <sub>5C</sub>	756.387	753.232	0.004171
v	0.2921	0.2903	0.0061623

ITERACION 8:

<u>Variable</u>	<u>Valores supuestos</u>	<u>Valores calculados</u>	<u>Convergencia alcanzada</u>
n <sub>5A</sub>	521.015	520.792	0.0004292
n <sub>5B</sub>	921.193	920.285	0.0009862
n <sub>5C</sub>	753.232	750.523	0.0035886
v	0.2903	0.2889	0.00368

ITERACION 9:

<u>Variable</u>	<u>Valores supuestos</u>	<u>Valores calculados</u>	<u>Convergencia alcanzada</u>
n <sub>5A</sub>	520.792	520.66	0.000253
n <sub>5B</sub>	920.285	919.668	0.000670
n <sub>5C</sub>	750.523	748.536	0.002647
v	0.2889	0.28836	0.0019728

ITERACION 10:

<u>Variable</u>	<u>Valores supuestos</u>	<u>Valores calculados</u>	<u>Convergencia alcanzada</u>
n <sub>5A</sub>	520.66	520.586	0.000141
n <sub>5B</sub>	919.668	919.273	0.000428
n <sub>5C</sub>	748.536	747.173	0.0018203
v	0.28836	0.28811	0.0008646

ITERACION 11:

<u>Variable</u>	<u>Valores supuestos</u>	<u>Valores calculados</u>	<u>Convergencia alcanzada</u>
n <sub>5A</sub>	520.586	520.55	0.0000683
n <sub>5B</sub>	919.273	919.04	0.0002535
n <sub>5C</sub>	747.173	746.3	0.0011641
V <sup>5C</sup>	0.28811	0.288057	0.000184

ITERACION 12:

<u>Variable</u>	<u>Valores supuestos</u>	<u>Valores calculados</u>	<u>Convergencia alcanzada</u>
n <sub>5A</sub>	520.55	520.6	0.0000163
n <sub>5B</sub>	919.04	918.93	0.00013
n <sub>5C</sub>	746.3	745.8	0.00067
V <sup>5C</sup>	0.28811	0.2881524	0.0001471

ITERACION 13:

<u>Variable</u>	<u>Valores supuestos</u>	<u>Valores calculados</u>	<u>Convergencia alcanzada</u>
n <sub>5A</sub>	520.6	520.592	0.0000156
n <sub>5B</sub>	918.93	918.947	0.0000191
n <sub>5C</sub>	745.8	745.770	0.0000386
V <sup>5C</sup>	0.28864	0.2886385	0.000005

En ésta última iteración se ha alcanzado la convergen-  
cia deseada, por lo tanto a partir de estos valores de las -  
variables n<sub>5A</sub>, n<sub>5B</sub>, n<sub>5C</sub> y V, se calculan las variables restan-  
tes desde las ecuaciones respectivas. Los resultados se dan  
en la tabla 5 .

METODO DE WEGSTEIN

Tomando como puntos iniciales los de las iteraciones 9 y 10 del método de sustituciones sucesivas:

<u>Variable</u> <u>i</u>	<u>x<sub>9,i</sub></u>	<u>y<sub>9,i</sub></u>	<u>x<sub>10,i</sub></u>	<u>y<sub>10,i</sub></u>
n <sub>5A</sub>	520.79	520.66	520.66	520.58
n <sub>5B</sub>	920.28	919.67	919.67	919.27
n <sub>5C</sub>	750.52	748.53	748.53	747.17
V	0.2889	0.2883	0.2883	0.2881

Así, los valores de n<sub>5A</sub>, n<sub>5B</sub>, n<sub>5C</sub> y V a suponer, son calculados por la ecuación (20); mientras que los valores computados para estas mismas variables se obtienen de las ecuaciones f<sub>4</sub>, f<sub>5</sub>, f<sub>6</sub>, f<sub>7</sub>, f<sub>38.a</sub>, f<sub>39.a</sub> y f<sub>40.a</sub>. Entonces,

<u>Variable</u> <u>i</u>	<u>x<sub>11,i</sub></u>	<u>y<sub>11,i</sub></u>	<u>Convergencia</u> <u>alcanzada</u>
n <sub>5A</sub>	520.45	520.51	0.0001132
n <sub>5B</sub>	918.51	918.63	0.0001366
n <sub>5C</sub>	744.25	744.62	0.0005225
V	0.288	0.2883	0.00101

ITERACION 2:

<u>Variable</u> <u>i</u>	<u>x<sub>10,i</sub></u>	<u>y<sub>10,i</sub></u>	<u>x<sub>11,i</sub></u>	<u>y<sub>11,i</sub></u>
n <sub>5A</sub>	520.66	520.58	520.45	520.51
n <sub>5B</sub>	919.67	919.27	918.51	918.63
n <sub>5C</sub>	748.53	747.17	744.23	744.62
V	0.2883	0.2881	0.288	0.2883

Así, los valores supuestos y los calculados son:

<u>Variable</u>	<u>x<sub>12,i</sub></u>	<u>y<sub>12,i</sub></u>	<u>Convergencia</u>
n <sub>5A</sub>	520.54	520.544	0.000008
n <sub>5B</sub>	918.777	918.802	0.00003
n <sub>5C</sub>	745.188	745.234	0.0000616
V	0.28818	0.28833	0.00054

Hasta aquí la convergencia lograda es satisfactoria.

METODO DEL VALOR PROPIO DOMINANTE

Tomando como puntos base los resultados obtenidos en las iteraciones 7, 8 y 9 del método de sustituciones sucesivas:

<u>Variable i</u>	<u><math>x_{7,i}</math></u>	<u><math>x_{8,i}</math></u>	<u><math>x_{9,i}</math></u>	<u><math>\lambda_1</math></u>
n <sup>5A</sup>	521.314	521.015	520.792	0.74582
n <sup>5B</sup>	922.395	921.193	920.285	0.75540
n <sup>5C</sup>	756.387	753.232	750.523	0.85863
v <sup>5C</sup>	0.2921	0.29	0.2889	0.52380

Entonces, los valores supuestos y los valores calculados en la Iteración 1, son los siguientes:

<u>Variable i</u>	<u><math>x_{10,i}</math></u>	<u><math>y_{10,i}</math></u>	<u>Convergencia</u>
n <sup>5A</sup>	520.625	520.573	0.0000995
n <sup>5B</sup>	919.600	919.227	0.0004044
n <sup>5C</sup>	748.197	746.960	0.0016532
v <sup>5C</sup>	0.2883	0.2880	0.0007

ITERACION 2:

<u>Variable i</u>	<u><math>x_{8,i}</math></u>	<u><math>x_{9,i}</math></u>	<u><math>x_{10,i}</math></u>	<u><math>\lambda_2</math></u>
n <sup>5A</sup>	521.015	520.792	520.625	0.74888
n <sup>5B</sup>	921.193	920.285	919.600	0.75440
n <sup>5C</sup>	753.232	750.523	748.197	0.85862
v <sup>5C</sup>	0.29	0.2889	0.2883	0.54545

Los valores supuestos y calculados son los siguientes:

<u>Variable i</u>	<u><math>x_{11,i}</math></u>	<u><math>y_{11,i}</math></u>	<u>Convergencia</u>
n <sup>5A</sup>	520.50	520.519	0.0000373
n <sup>5B</sup>	919.08	919.915	0.0001827
n <sup>5C</sup>	746.20	745.107	0.00066
v <sup>5C</sup>	0.28797	0.28805	0.0002777

Puesto que en ésta segunda iteración se ha obtenido un valor cuya convergencia alcanzada es menor de 0.0001 ; entonces, probando los valores calculados,  $y_{11,i}$ , por el método

do de sustituciones sucesivas, como los valores supuestos , se obtienen los siguientes resultados:

ITERACION 3 :

<u>Variable</u>	<u>Valores supuestos</u>	<u>Valores calculados</u>	<u>Convergencia alcanzada</u>
n <sub>5A</sub>	520.519	520.56	0.0000781
n <sub>5B</sub>	918.915	918.90	0.0000108
n <sub>5C</sub>	745.707	745.64	0.0000864
v <sub>5C</sub>	0.28847	0.2885	0.000104

Las convergencias alcanzadas en ésta iteración son satisfactorias.

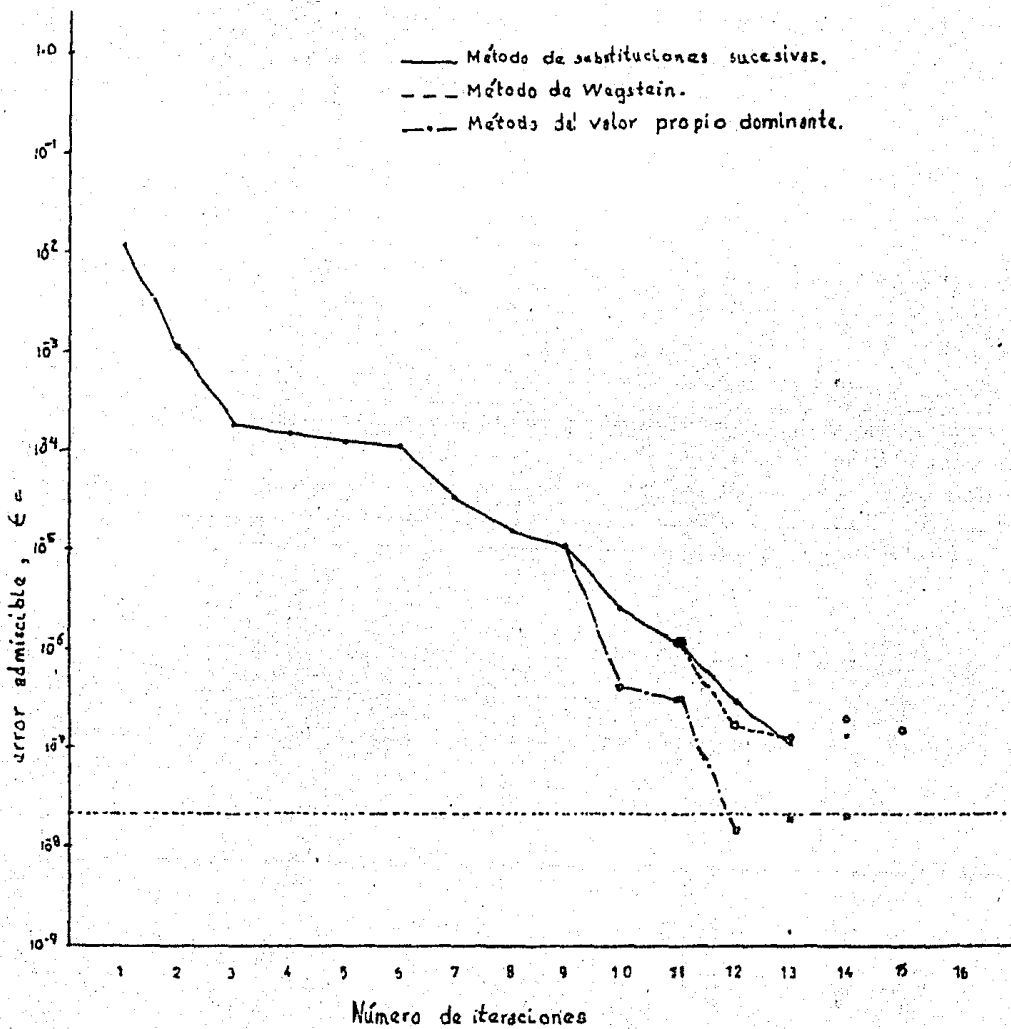
Tabla 5. Valores las variables del proceso hipotético

---

$n_{5A} = 520.60$	$n_{6A} = 263.35$	$n_{7A} = 257.25$	
$n_{5B} = 918.93$	$n_{6B} = 357.59$	$n_{7B} = 561.34$	
$n_{5C} = \frac{745.80}{2185.33}$	$n_{6C} = \frac{9.83}{630.77}$	$n_{7C} = \frac{735.97}{1554.56}$	
$n_{8A} = 65.84$	$n_{9A} = 197.51$		
$n_{8B} = 89.40$	$n_{9B} = 268.20$		
$n_{8C} = \frac{2.46}{157.69}$	$n_{9C} = \frac{7.37}{473.08}$		
$n_{1A} = 970.00$	$n_{2A} = 1167.51$	$n_{3A} = 886.83$	$n_{4A} = 471.72$
$n_{1B} = 30.00$	$n_{2B} = 289.20$	$n_{3B} = 502.72$	$n_{4B} = 638.26$
$n_{1C} = \frac{0.00}{1000.00}$	$n_{2C} = \frac{7.37}{1473.08}$	$n_{3C} = \frac{83.53}{1473.08}$	$n_{4C} = \frac{363.10}{1473.08}$
$n_{10A} = 231.52$	$n_{11A} = 25.72$		
$n_{10B} = 280.67$	$n_{11B} = 280.67$		
$n_{10C} = \frac{588.78}{1100.97}$	$n_{11C} = \frac{147.19}{453.59}$		
$n_{12A} = 185.21$	$n_{13A} = 23.15$	$n_{14A} = 23.15$	
$n_{12B} = 168.40$	$n_{13B} = 112.27$	$n_{14B} = 0.00$	
$n_{12C} = \frac{117.76}{471.37}$	$n_{13C} = \frac{235.51}{370.93}$	$n_{14C} = \frac{235.51}{258.66}$	

---





## COMENTARIOS

Puesto que la mayoría de los procesos químicos son caracterizados por recirculación de materia y/o energía, es necesario acudir a métodos iterativos para el cálculo de las variables involucradas en las corrientes de procesos. Se han desarrollado procedimientos que conducen a cortes en el mínimo número de corrientes LEE-RUDD (16) y en el mínimo número de variables como los de LEE-RUDD (16), CHRISTENSEN-RUDD (2) y SARGENT-WESTERBERG (30).

Comparación de otros algoritmos de selección de variables de diseño y/o de ordenamiento de precedencia de las ecuaciones:

El Algoritmo de LEE-CHRISTENSEN-RUDD (15) es un método efectivo y simple, para la designación de una serie de variables de diseño. Pero cuando  $N_v = N_c$ , este algoritmo resulta inefectivo.

El Algoritmo de SOYLEMEZ-SEIDER (32) es utilizado para sistemas con  $N_v = N_c$ , atiende las no linealidades de las ecuaciones. Tales propiedades son desatendidas por el resto de los algoritmos desarrollados, puesto que sólo atienden las propiedades algebraicas.

El Algoritmo de RAMIREZ-VESTAL (26) escoge el mínimo número de cortes que conducen al menor número necesario de iteraciones. Este algoritmo es utilizado en sistemas donde  $N_v \geq N_c$ .

SARGENT-WESTERBERG (30) propusieron un método de cortes en el cual todos los ordenamientos posibles de las unidades son considerados, y la programación dinámica es utilizada para encontrar el orden óptimo. El objetivo de este algoritmo es ordenar las unidades dentro de una secuencia tal que un mínimo número de variables es asociado con las corrientes de salida de las unidades que alimentan a las unidades precedentes en la secuencia. El Algoritmo es fácilmente programable en una computadora digital pero se requiere de una gran capacidad de almacenaje de palabras.

LLE-RUDD (16) obtienen los cortes para el mínimo número de variables asociadas con las corrientes rotas. El algoritmo requiere del conocimiento previo de los circuitos de flujo de materia localizados por el método de STEWARD (37). Este algoritmo es inconveniente para sistemas grandes, especialmente si se desea implementarlo en una computadora.

El objetivo de esta tesis es cumplido en todas sus facetas, presentando para ello, algoritmos sencillos, pero muy -- efectivos que se aplican manualmente en los problemas presentados en la simulación de cualquier proceso químico; aun que también podrían implementarse en una computadora.

En cuanto a los métodos de convergencia, cabe mencionar que el método de Newton ha sido el mejor, puesto que requiere de un menor número de iteraciones, siguiéndole en este -- aspecto los llamados métodos Cuasi-Newton, y por último los tres presentados en esta tesis. Pero la desventaja de los -- primeros es su gran capacidad de almacenaje de datos requerida.

En el ejemplo de aplicación, en el capítulo IX, se aplican muy ilustrativamente los algoritmos tratados en los -- demás capítulos.

BIBLIOGRAFIA

- 1.- Christensen, J.H., AICHE J., 7 16 ,177,1970.
- 2.- Christensen, J.H. and D.F. Rudd, Structuring Design Computations., AICHE J., 15 (1), 94-100, January, 1969.
- 3.- Crowe, C.M. and M. Nishio, Convergence Promotions - in the Simulations of Chemical Process-The General Dominant Eigenvalue Method., AICHE J., 21 (3), 528-533, May, 1975.
- 4.- Di Bella, C.W. and William F.S., Process Optimization by nonlinear Programming., I. and E.C. Process Design and Development, 4 (1), 16-20, January, 1965.
- 5.- Frank, Andrew, Homogeneous Second-Order Chemical -- Reaction in Countercurrent Flow Systems., Chem. Eng. Progn Symposium Series, 63 (72), 54-57
- 6.- Gilliland, E.R. and C.E. Reed, Degrees of Freedom - in Multicomponent Absorption and Rectification Columns., Ind. and Eng. Chem., 34 (5), 551-557
- 7.- Giral, José, Francisco Barnés y Alejandro Ramírez, - Ingeniería de procesos. Manual para el diseño de procesos - químicos apropiado para países en desarrollo. UNAM, 1977.
- 8.- Goldstein, R.P. and R.B. Stanfield, Flexible Method for the Solution of Distillation Design problems Using the Newton-Raphson Technique., Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Develop., 9 (1), 78-84, January, 1970.
- 9.- Himmelblau, D. and Bischoff, Process Analysis and Simulation, Ed. Wiley and Sons Inc. , 1968.
- 10.- Hanson, D.N. and G.F. Somerville, Computation of --

Multistage Separation Process, Reinhold Publishing, 1962.

11.- Howard, G.M., Degrees of Freedom for Unsteady-State Distillation Processes, I.E. and C. Fundamentals, 6 (1), January, 1967.

12.- Johnson, A.I., Computer aided process analysis and design-a modular approach, Brit. Chem. Eng. and Proc. Tech. 17 (1), 28-33, January, 1972.

13.- -----, 17 (2), February, 1972.

14.- Knawk, M., A System for Counting Variables in Separation Process, AIChE J., 2 (2), 241-248, June, 1956.

15.- Lee, W., J.H. Christensen, and D.F. Rudd, Design Variable Selection to Simplify Process Calculations, AIChE J. 12 (6), 1104-1110, November, 1966.

16.- Lee, W. and D.F. Rudd, On the Ordering of Recycle - Calculations, AIChE J. 12 (6), 1184-1190, November 1966.

17.- Miers, A.L. and W.D. Seider, Introduction to Chemical Engineering and Computer Calculations, Prentice-Hall - Inc., 1976.

18.- Morse, P.L., Degrees of Freedom for Steady State -- Flow Systems, I. and E.C. Eng. and Proc. Develop., 43(8), - 1863-1871, August, 1951.

19.- Murril, M.F., Degrees of Freedom Determine Control Needs for Distillation, Hydrocarbon Processing, 14 (6), 143-146, June 1965.

20.- Naphtali, L.M., Process heat and material balances, Chem. Eng. Progr., 60 (9), -74, September, 1964.

21.- Navieg, M.F., Material Balance in Complex and Multi stage Recycle Chemicals Processes, Chem. Eng. Progr., 53(6), 298-305, June, 1957.

22.- Norman, R.L., Matrix Method for Location of Cycles of a Directed Graph, AIChE J., 11 (3), 450-452, May, 1965.

23.- Orbach, O. and C.M. Crow, Convergence Promotion in the Simulation Chemical Processes with Recycle-The Dominant Eigenvalue Method, Can. J. of Chem. Eng., 49, 509-513, August 1971.

24.- Perry, H.R. and C.H. Chilton, Chemical Engineering Handbook, 5a. ed., 2-85 — 2-99, McGraw-Hill Book Co., 1973.

25.- Pho, T.K. and L. Lapidus, Topics in Computer-Aided Design: Part 1. An Optimum Tearing Algorithm for Recycle Systems, AIChE J., 19 (6), 1170-1181, November, 1973.

26.- Ramirez, A.E. and R.L. Norman, Algorithms for Structuring Design Calculations, Chem. Eng. Sci., 27, 2243-, 1972

27.- Ravicz, A.E. and R.L. Norman, Heat and mass balancing on a digital computer, Chem. Eng. Progr., 60 (5), 71-76 May, 1964.

28.- Rosen E.M., A machine computations method for performing material balances, Chem. Eng. Progr., 58 (10), 69-73 October, 1962.

29.- Rubin, D.I., Generalized Material Balance, Chem. -- Eng. Progr., Symp. Sers., 58 (37), 54-61.

30.- Sargent, R.W.H. and A.W. Westerberg, "Speed-up" in Chemical Engineering Design, Trans. Inst. Chem. Engrs., 42, T190-T197, 1964.

31.- Shannon, P.T., et alius., Computer Simulation of a Sulfuric acid Plant, Chem. Eng. Progr., 62 (6), 42-59, June, 1966.

32.- Soylemez, S. and W.D. Seider, A new Technique for Precedence-Ordering Chemical Process Equations Sets, AIChE J., 19 (5), 934-942, September 1973.

33.- Smith, D.B., Design of Equilibrium Stage Processes, McGraw-Hill, 1963.

34.- Soliman, M.A., Quasi-Newton Methods for Convergence Acceleration of Cycle Systems, Can. J. Chem. Eng., 57, 642-647, October, 1979.

35.- Soliman, M.A., A modified General Dominant Eigenvalue Method for Convergence Acceleration of Cycle Systems, Can. J. Chem. Eng., 59, 395-397, June, 1981.

36.- Stadtherr, M.A., et alious., Efficient Solution of Sparse Sets of Design Equations, Chem. Eng. Sci., 29, 1025, 1974

37.- Steward, D.V., Soc. Ind. Appl. Math. Rev., 4 (4), 321 1962, On an approach to Techniques for the Analysis of the Structure of Large Systems of Equations.

38.- Steward, D.V., Partitioning and Tearing Systems of Equations, J. Soc. Appl. Math. núm. Anal., 2, Ser. B, 345, 1966

39.- Upadhye, R.S. and E.A. Gross, An Efficient Algorithm for Optimum Decomposition of Recycle Systems, AIChE J., 18 (3), 533-539, May, 1972.

39.- Tiernan, J.C., An Efficient Search Algorithm to find the elementary circuits of a Graph, Comm. ACM., 13 (12) 722-727, December, 1970.

40.- Weinblatt, H., A New Search Algorithm for Finding -  
the Simple Cycles of a Finite Directed Graph, J. ACM, 19 --  
(1), 43-56, January, 1972.

41.- Westerberg, A.W. and Edie F.C., Chem. Eng. J., 2, 9, 1971

42.- -----, 17, 1971

43.- -----, 114, 1971.