

2 y.  
9a



**UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTONOMA DE MEXICO**

**ESCUELA NACIONAL DE ESTUDIOS PROFESIONALES  
ZARAGOZA**

Simulación de una torre de destilación  
por lote por el método implícito del  
doble punto y el método theta

**T E S I S**

( mancomunada )

Que para Obtener el Título de:

INGENIERO QUIMICO

PRESENTAN

MARCO ANTONIO RUIZ GARCIA  
VICTOR MANUEL CORONA SANCHEZ



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

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

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

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

---

## C O N T E N I D O

---

### CAPITULO I

INTRODUCCION	1
--------------	---

### CAPITULO II

GENERALIDADES	6
II.1 CONCEPTO BASICO DE DESTILACION	6
II.2 SIMULACION DE UNA TORRE DE DESTILACION POR LOTE	8
II.3 CARACTERISTICAS Y LIMITACIONES DE LA DESTILACION POR LOTE	11

### CAPITULO III

METODO DE CALCULO PARA LA SIMULACION DE UNA TORRE DE DESTILACION POR LOTE, POR EL METODO THETA Y EL METODO IMPLICITO DEL DOBLE PUNTO.	14
III.1 EL PERIODO DE ARRANQUE	15
III.1.1 RESOLUCION DE LOS BALANCES DE MATERIA POR COMPONENTE EN CADA PLATO. METODO IMPLICITO DEL DOBLE PUNTO.	16
III.1.2 METODO DE CONVERGENCIA THETA PARA EL PERIODO DE ARRANQUE.	22
III.1.3 DETERMINACION DE LAS TEMPERATURAS DE EQUILIBRIO, METODO Kb.	25

III.1.4	EVALUACION DE LOS BALANCES DE ENTALPIA Y DE MATERIA TOTAL EN LA TORRE, METODO DE LA COMPOSICION CONSTANTE.	29
III.1.5	SOLUCION DEL PROBLEMA DE SIMULACION DE UNA TORRE DE DESTILACION POR LOTE DURANTE EL PERIODO DE ARRANQUE.	32
III.2	EL PERIODO DE PRODUCTO	36
III.2.1	RESOLUCION DE LOS BALANCES DE MATERIA POR COMPONENTE EN CADA PLATO. METODO IMPLICITO DEL DOBLE PUNTO.	
III.2.2	METODO DE CONVERGENCIA THETA PARA EL PERIODO DE PRODUCTO.	40
III.2.3	EVALUACION DE LOS BALANCES DE ENTALPIA Y DE MATERIA TOTAL EN LA TORRE. METODO DE LA COMPOSICION CONSTANTE.	42
III.2.4	SOLUCION DEL PROBLEMA DE SIMULACION DE UNA TORRE DE DESTILACION POR LOTE DURANTE SU OPERACION EN EL PERIODO DE PRODUCTO.	43

#### CAPITULO IV

	PROGRAMA DE COMPUTO PARA SIMULAR LA OPERACION DE UNA TORRE DE DESTILACION POR LOTE. PROGRAMA TDBA (TORRE DE DESTILACION BATCH).	45
IV.1	CARACTERISTICAS DEL PROGRAMA.	47
IV.1.1	DESCRIPCION DE LA ALIMENTACION DE DATOS AL PROGRAMA	58
IV.1.2	DESCRIPCION DE LA SALIDA DE DATOS DEL PROGRAMA	63

#### CAPITULO V

	ANALISIS DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES	69
--	---------------------------------------	----

## APENDICES

A.1 DETERMINACION DE LOS BALANCES DE MASA POR COMPONENTE .	80
A.1.1 ARRANQUE.	80
A.1.2 PRODUCTO.	81
A.2 DETERMINACION DE LOS BALANCES DE MATERIA TOTAL . Y DE ENTALPIA.	82
A.2.1 ARRANQUE.	82
A.2.2 PRODUCTO.	84
A.3 CONCEPTOS BASICOS DE TERMODINAMICA.	87
A.4 METODOS NUMERICOS.	94
A.4.1 SISTEMAS DE ECUACIONES LINEALES.	94
A.4.1.1 METODO DE THOMAS.	94
A.4.1.2 METODO DE GAUSS JORDAN PARA INVERSION. DE MATRICES.	98
A.4.2 ECUACIONES NO LINEALES.	101
A.4.2.1 ECUACIONES UNIVARIABLES.	101
A.4.2.1.1 METODO DE NEWTON.	101
A.4.2.2 SISTEMAS MULTIVARIABLES.	103
A.4.2.2.1 METODO DE BROYDEN.	103
A.4.3 ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS.	107
A.4.3.1 METODO IMPLICITO DEL DOBLE PUNTO.	108
A.5 LISTADO GENERAL DEL PROGRAMA TDBA Y UN EJEMPLO DE LOS RESULTADOS DEL PROGRAMA.	110
NOMENCLATURA	139
BIBLIOGRAFIA	142

## INTRODUCCION

La destilación es uno de los métodos de separación más importantes en la industria química. Este proceso se fundamenta en el establecimiento de equilibrios entre las fases líquida y vapor de la mezcla cuyos componentes se requiere separar. Existen diferentes tipos de destilación, y su empleo esta en función del tipo de mezcla a procesar y de los requerimientos del producto final a obtener. Las torres de destilación por lote fueron de los primeros aparatos en utilizar este procedimiento, y aun en la actualidad su empleo sigue siendo una de las técnicas de separación más empleadas por la industria. Algunas de sus principales ventajas son :

- Manejo de cantidades relativamente pequeñas de material, las cuales no requieren tiempos de operación continuos.
- No requiere de muchos cambios en su operación cuando se cambia de una mezcla a otra, lo cual provee a la torre de una gran flexibilidad.
- La relación de reflujo puede variarse fácilmente sin necesidad de grandes reajustes a los instrumentos.

En general el uso más importante de este tipo de destilación es durante su empleo para manejar diferentes mezclas a separar. Debido a ésto, la destilación por lote es utilizada frecuentemente para obtener y recuperar sustancias valiosas como son solventes, tintes, aceites esenciales, etc. A nivel experimental tiene diversas aplicaciones:

- La determinación de azeótropos.
- La determinación del número de etapas teóricas para un sistema trabajando a reflujo total.
- La determinación de curvas de destilación (composición contra porcentaje de destilado) para mezclas multicomponentes.
- etc...

La destilación por lote se encuentra con mayor frecuencia en la industria alimentaria y farmacéutica, y en menor escala en la industria petrolera. 2

En la actualidad, debido a la situación económica por la cual atraviesa el país, se ha hecho necesario el reacondicionamiento y empleo de los equipos de destilación por lote ya existentes para recuperar compuestos y productos que antes se desechaban, para lo cual se han tenido que operar las torres a condiciones de servicio diferentes a las que originalmente fueron diseñadas. Esto lleva a la necesidad de contar con modelos de simulación confiables para poder predecir el comportamiento de la operación de las torres de destilación por lote.

Los procedimientos de cálculo para poder simular y diseñar las columnas de destilación por lote han seguido muy de cerca el desarrollo de los sistemas computacionales de alta velocidad. Los primeros esfuerzos se caracterizan por el empleo de métodos de aproximación y gráficos. Pero con el advenimiento de las computadoras, se han desarrollado modelos cada vez más exactos, junto con la aplicación de métodos numéricos para la resolución de este tipo de problemas. Desde Rayleigh hasta la fecha se han propuesto numerosos procedimientos de cálculo para resolver la destilación por lote.

El problema principal para poder lograr la simulación de una torre de destilación por lote, radica en obtener los modelos que permitan observar el comportamiento del equipo con respecto al tiempo, esto es lo que da al proceso un carácter de tipo dinámico, ya que la composición del producto destilado y las condiciones de operación de la torre varían conforme pasa el tiempo, mientras que la cantidad de líquido contenida en el equipo se va agotando.

El objetivo de esta tesis es el desarrollar un programa de cómputo TDBA, con la finalidad de llevar a cabo la simulación de una torre de destilación por lote, basado en el

empleo combinado del método implícito del doble punto y el método Theta, de acuerdo a los trabajos realizados por C.D. Holland y Liapis.

La operación de una columna típica de destilación por lote se dividió para su estudio en dos partes. 1) El período de arranque y 2) El período de producto. Este último es la parte del proceso de destilación durante el cual se obtiene un producto de la columna. El período de ajuste que precede al de producto se le conoce como período de arranque.

Los ajustes necesarios para llevar la columna a una condición de operación tal que se pueda extraer un destilado con la pureza deseada se realiza durante el período de arranque.

El procedimiento de cálculo basado en la combinación del método implícito y el método Theta, para cualquiera de los dos períodos de operación de la torre, considera inicialmente fijos los flujos totales con respecto al tiempo en una serie de valores supuestos. Posteriormente, una vez que se han encontrado las condiciones de equilibrio, se incluyen los balances de entalpía y de materia totales, con el objeto de considerar la variación de los flujos totales.

El método de cálculo está compuesto principalmente de las siguientes etapas.

- Determinación de los flujos parciales en la torre, por la resolución de los balances de materia por componente con las relaciones de equilibrio, por medio de la aplicación del método implícito del doble punto a las ecuaciones dependientes del tiempo resultantes, para los flujos totales supuestos.

-Determinación de las condiciones de equilibrio de la torre que cumplan con las restricciones y especificaciones a las que se somete, por medio del método Theta.



-Evaluación de las temperaturas que corresponden a los equilibrios encontrados, por el medio del método Kb.

-Cálculo de los flujos totales que cumplen con las nuevas condiciones encontradas, por medio de la resolución de los balances de entalpía y de materia total a través del método del doble punto.

Para la exposición de este trabajo, la tesis se ha estructurado de la siguiente manera.

En el capítulo II se explican algunos conceptos básicos sobre la destilación y específicamente sobre la destilación por lote.

En el capítulo III se presenta el modelo de simulación, explicando la teoría en la cual se fundamenta, las secuencias de cálculo, sus limitaciones y sus alcances.

En el capítulo IV se presenta la estructura y la lógica del programa de cómputo TDBA, así como la forma de su empleo.

En el capítulo V se analizan los resultados obtenidos con el programa y se dan las conclusiones de su utilidad.

En el apéndice A.3 se dan algunos conceptos básicos de termodinámica necesarios para comprender las relaciones y suposiciones que se emplean durante los cálculos de los balances de materia y energía para simular la torre de destilación por lote.

Por otra parte, la simulación de una torre de destilación por lote plantea en su modelado la solución de una serie de problemas numéricos de diferente tipo. Esto hace necesario el uso de herramientas matemáticas capaces de proveer soluciones confiables y prácticas. En el apéndice A.4 se describen brevemente los métodos numéricos que fueron utilizados para la solución de los diferentes sistemas de ecuaciones involucrados en el método de simulación. Debe hacerse notar que los métodos numéricos elegidos no son los únicos existentes para atacar este tipo de problemas, sobre todo porque día a día surgen nuevas estrategias para resolver un determinado planteamiento.

Baste con señalar que la selección de los métodos de solución numérica se limitó a escoger aquellos que respondieran a las necesidades del objetivo de la tesis. Para un análisis más detallado sobre cual método es idóneo para una situación determinada se recomienda consultar a Richard S.h & Warren.<sup>21</sup>

## CAPITULO II

### GENERALIDADES

El empleo de la tecnología de separación representa una parte fundamental en el diseño y operación de una planta química. Dentro de esta área, el proceso de destilación es uno de los más utilizados y llega a ocupar del 40% al 80% de la inversión total de la planta. De ahí que la necesidad de mejorar la operación de los equipos de destilación, aumentando su eficiencia y ampliando el rango de servicio que pueda cubrir.

La tecnología de separación de materiales utiliza para sus fines, la diferencia en las propiedades físicas y químicas, para lo cual, el ingeniero debe crear un ambiente que provoque un comportamiento diferente en las propiedades de las sustancias que componen la mezcla a separar.

Al mecanismo que provoca la diferencia en propiedades de los materiales a separar se le ha denominado agente de separación .

En el caso de la destilación, la propiedad que se maneja es la diferencia de volatilidades, el agente de separación es el calor, y la separación se logra provocando una aproximación al estado de equilibrio líquido-vapor.

#### II.1 CONCEPTO BASICO DE DESTILACION

El modelo básico de destilación que describe la operación de una columna de destilación, utiliza el concepto de plato o etapa ideal de equilibrio. En el cual se tiene que el líquido y el vapor que salen de la misma, se encuentran en equilibrio. Además se supone que las retenciones del líquido y el vapor se encuentran perfectamente mezcladas (ver figura 2.1).

Las suposiciones de equilibrio y mezclado perfecto son esenciales, ya que a partir de éstas se podrá hacer una

aproximación a los valores de la composición de los componentes en ambas fases líquido-vapor, a través de los principios termodinámicos y valores experimentales de equilibrio.

En los equipos de destilación, por lo general se utilizan diversos dispositivos (platos, charolas o empaques), para brindar un contacto íntimo entre las fases.

Las charolas son colocadas una encima de otra y encerradas en una coraza cilíndrica para formar una columna o torre de destilación. De esta forma, cada plato representa en teoría una etapa ideal de equilibrio.

Principalmente, las columnas de destilación pueden ser divididas en dos tipos, dependiendo de su operación.

Las primeras son aquellas cuyo operación es continua, esto es, en donde la alimentación de la torre y la extracción de productos se lleva a cabo en forma ininterrumpida.

Las del segundo tipo corresponden a las de operación por lote en donde se lleva a cabo una secuencia de operación consistente en : alimentación de la torre, estabilización de la misma y extracción de productos.

La figura 2.3 muestra un esquema típico de una columna de destilación por lote , la cual consta de un rehervidor, una columna, un condensador y un tanque acumulador.

La operación de una torre de destilación por lote típica se puede dividir en dos etapas o periodos : uno el período de arranque y el otro el período de producto.

Durante el primer período se llevan a cabo todos los ajustes necesarios para lograr una condición de operación en la columna, tal que pueda obtenerse la pureza especificada del destilado deseado cuando comience la etapa posterior.

Durante la segunda etapa o de producto ya se obtiene el destilado.

El período de arranque esta caracterizado porque no existen corrientes de salida en la torre. Durante esta etapa se trata de estabilizar la torre para tener un mejor control del destilado. Esto se logra llevando la columna a estado estacionario y posteriormente se extrae el destilado en la etapa de producto.

## II.2 SIMULACION DE UNA TORRE DE DESTILACION POR LOTE

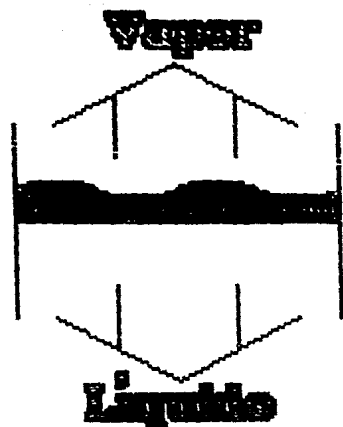
Dado que muchas separaciones se lleva a cabo tanto a nivel comercial como a nivel laboratorio por medio de destilación por lote, existe una gran necesidad de contar con modelos matemáticos más exactos que predigan el comportamiento de este proceso.

La simulación de una torre de destilación por lote es uno de los problemas más interesantes y difíciles para el ingeniero químico. Esto se debe principalmente a que se trata de un proceso a régimen dinámico. Las composiciones en el rehervidor y en la torre varían continuamente respecto al tiempo, y por consiguiente una solución matemática rigurosa no es práctica para realizarse manualmente. Debido a ésto, el diseño preliminar de estos equipos se efectúa normalmente a través de métodos cortos.

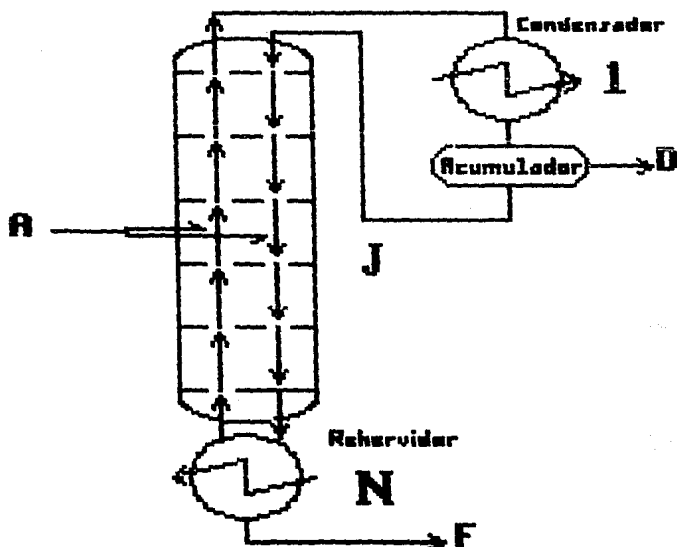
Para realizar un cálculo riguroso, se consideran tres problemas principalmente :

- 1.- Régimen dinámico : la composición en el equipo cambia conforme transcurre el tiempo y se extrae el producto.
- 2.- Retención : la cantidad de material en el rehervidor, la columna y equipo auxiliar, tiene un efecto considerable sobre la eficiencia de separación.
- 3.- Estabilidad : la longitud del tiempo previo al período de obtención de producto, tiene un efecto considerable sobre la economía del proceso.

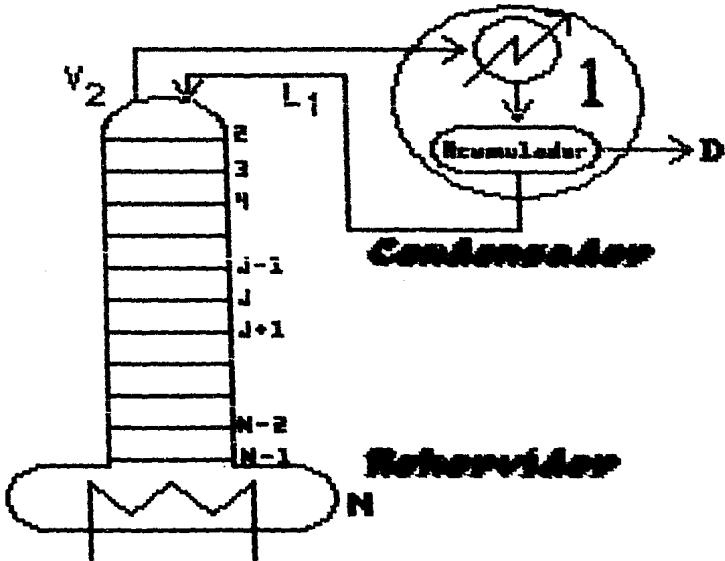
Desde hace más de 70 años, se han dirigido esfuerzos hacia el desarrollo de métodos de cálculo para columnas de destilación por lote. La mayoría de las suposiciones hechas para destilación continua, han sido utilizadas para el desarrollo de esta teoría.



**Figura 2.1 Etapa ideal de equilibrio**



**Fig.2.2 Modelo básico de un equipo de Destilación continua**



**Fig.2.3 Esquema de una Torre de Destilación por Lote.**

### II.3 CARACTERISTICAS Y LIMITACIONES DE LA DESTILACION POR LOTE

La decisión de utilizar una destilación por lote para separar compuestos relativamente puros de una mezcla binaria o multicomponente, usualmente depende de una comparación económica contra la destilación continua. Sin embargo, hay problemas de separación, para los cuales la destilación por lote es insuficiente y, por otro lado, hay numerosas situaciones en la que es lo idóneo.

El empleo de la destilación por lote se prefiere a la de operación continua, cuando van a manejarse pequeñas cantidades de material durante períodos irregulares de tiempo. En la mayoría de los casos, la composición de alimentación puede variar ampliamente de período a período.

Uno de los atributos más sobresalientes de la destilación por lote, es su flexibilidad, ya que se requiere de pequeñas variaciones en la operación cuando se cambia de una mezcla a otra para destilar. La razón de reflujo se puede variar fácilmente. No es necesario mantener un balance entre la alimentación y el producto. En situaciones en que la composición de alimentación cambia frecuentemente o cuando se manejan mezclas completamente diferentes, la versatilidad de la destilación por lote es insuperable.

La destilación por lote requiere menos capital para separar un componente relativamente puro de una mezcla multicomponente, que una destilación continua, ya que esta última requiere de columnas adicionales para cada producto, y diversos dispositivos auxiliares.

En general los cálculos para el diseño o la simulación de las columnas de destilación están basados en balances de materia y energía, así como en ecuaciones de equilibrio. Estas ecuaciones involucran diversas suposiciones de simplificación, las cuales introducen un cierto grado de inexactitud en el resultado final. De acuerdo con esto, el ingeniero



debe conocer y reconocer estas simplificaciones para estar conciente del error que tendrá cada método.

Los procedimientos de cálculo propuestos por años han seguido muy de cerca el desarrollo de los equipos de cómputo. Los procedimientos aproximativos y gráficos, son característicos de los primeros esfuerzos por contar con algoritmos confiables de simulación o diseño. Con el desarrollo de computadoras de mayor velocidad y el uso de métodos numéricos para resolver las ecuaciones requeridas para describir el sistema, han surgido modelos más exactos.

Entre los primeros métodos propuestos, se encuentra el de Smoker y Rose,<sup>32</sup> el cual hace uso de una expresión del tipo de la ecuación de Rayleigh.<sup>26</sup> Para desarrollar tal expresión se despreciaron todas las retenciones con excepción de la del rehervidor.

Para una mezcla binaria, Smoker y Rose<sup>32</sup> propusieron que el valor de las fracciones mol de un componente en el producto destilado y en el rehervidor, podían ser relacionados en cualquier tiempo  $t$  por medio del método gráfico de McCabe-Thiele.<sup>29</sup>

Posteriormente Rose<sup>27</sup> y otros investigadores modificaron el modelo original al considerar todas las retenciones en la columna. Los métodos numéricos indicados por Rose<sup>29-30-28</sup> et al fueron posteriormente desarrollados por Huckaba y Danly.

Meadows,<sup>22</sup> presentó el primer modelo de destilación por lote para sistemas multicomponentes, en donde la variable tiempo es eliminada.

Distefano<sup>9</sup> reportó los resultados de un estudio desarrollado principalmente para el análisis de varios métodos numéricos para integrar las ecuaciones diferenciales de un modelo para sistemas multicomponentes de destilación por lote. Los modelos se basan en los balances de materia y energía, y son limitados con las mismas suposiciones asumidas por Meadows.<sup>22</sup>

Barb y Holland<sup>2</sup>, desarrollaron un tratamiento riguroso para sistemas multicomponentes. El balance de materia y energía es representado con ecuaciones diferenciales, y resuelto con métodos numéricos. El modelo fue validado por la comparación con curvas experimentales desarrolladas por Rose y O'Brien<sup>3</sup>. Se encontró que los valores calculados y las curvas experimentales para el sistema ternario probado (n-heptano, metilciclo-benceno-tolueno) fueron extremadamente buenos. Posteriormente Holland presentó un tratamiento para las etapas de operación de destilación por lote, esto es, para los periodos de arranque y producto de la torre.

El tratamiento riguroso de una torre de destilación por lote cuenta ahora con las técnicas de cómputo más modernas. De ahí que los análisis más recientes, se preocupan actualmente más por el mejoramiento de los tiempos de cómputo y la disminución del número de iteraciones, esto por medio de la selección de técnicas numéricas cada vez más sofisticadas.

## CAPITULO III

METODO DE CALCULO PARA LA SIMULACION DE UNA TORRE  
DE DESTILACION POR LOTE, POR EL METODO THETA Y  
EL METODO IMPLICITO DEL DOBLE PUNTO.

El desarrollo de los procedimientos de cálculo para poder llevar a cabo la simulación de las torres de destilación por lote, ha seguido una trayectoria diferente a la de la amplia gama de metodologías existentes en la actualidad para analizar las características de las torres de destilación cuya operación es continua. Esto se debe, y como ya se explicó con anterioridad, al carácter no estacionario del comportamiento de la destilación por lote, lo cual obliga al ingeniero químico a atacar este tipo de problemas a través de técnicas de cómputo muy sofisticadas.

El programa de cómputo TDBA desarrollado para poder llevar a cabo este tipo de simulación, utiliza los principios teóricos y el método de cálculo propuesto por Holland y Linpis, los cuales se fundamentan en una combinación del método Implícito del doble punto para la resolución de ecuaciones diferenciales (ver apéndice A4), y del método Theta el cual permite la posterior determinación de las temperaturas de equilibrio en cada plato al mismo tiempo que se cumplen las especificaciones de la torre. Este procedimiento divide el problema de la simulación en dos partes. La primera parte considera fijos los flujos totales de materia con respecto al tiempo en la torre, manteniéndolos en una serie de valores específicos para el periodo. En la segunda parte, se incluyen los balances de entalpía de la torre para poder contabilizar la variación de los flujos parciales y totales de materia a través de los platos y en global de la torre de destilación. De acuer-

do con esto, cualquiera que sea la etapa de operación de la torre se deben seguir los siguientes pasos para la simulación :

1.- Solución de los balances de materia por componente en cada plato (método implícito del doble punto).

2.- Corrección de las retenciones de materia en cada plato así como de las composiciones (método de convergencia Theta).

3.- Determinación de las temperaturas de equilibrio en cada plato (método Kb).

4.- Evaluación de los balances de entalpía y de materia total en la torre (método de la composición constante).

Los primeros tres puntos corresponden a la primera parte del procedimiento de cálculo y el cuarto punto a la segunda parte.

La solución de las ecuaciones para la etapa de arranque se muestra en la sección III.1 mientras que la correspondiente a la etapa de producto se presentará en la sección III.2

### III.1 EL PERIODO DE ARRANQUE

El proceso de arranque de una columna de destilación por lote tiene una infinidad de formas, por lo que el presente método hace las siguientes consideraciones.

1.- Al inicio del proceso los platos se encuentran llenos con el líquido que se va a destilar.

2.- Para la presión de operación dada, el líquido que alimentó a la torre se encuentra a la temperatura de burbuja.

3.- La columna es operada a reflujo total, por lo que el destilado (D) será cero (no se consideran flujos de alimentación ,ni de salida en los fondos de la torre).

4.- Se considera en la operación el empleo de un condensador total.

Las especificaciones que deben tomarse son las siguientes:

- 1.- Número de etapas.
- 2.- Carga térmica del rehedridor.
- 3.- Presión en la columna.
- 4.- Composición de la mezcla alimentada.
- 5.- Retención de líquido en cada plato.

Para el desarrollo de las subsecuentes ecuaciones de cálculo , se supone que las fases líquida y vapor se encuentran perfectamente mezcladas, y cada etapa de separación en la torre representa un plato teórico.

### III.1.1 SOLUCION DE LOS BALANCES DE MATERIA POR COMPONENTE EN CADA PLATO. METODO IMPLICITO DEL DOBLE PUNTO.

Imaginemos que la operación de una torre de destilación por lote durante su arranque, se verifica de acuerdo a la figura 3.1

En esta figura se puede observar que no existen corrientes externas a la torre, es decir , flujos de alimentación o de producto (denominaremos a partir de este punto, a los flujos totales de materia con letras mayúsculas y a los flujos parciales con letras minúsculas).

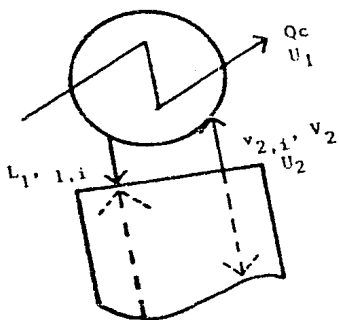
El primer problema consiste en encontrar los flujos parciales de vapor y de líquido dentro de la torre para cada plato, que cumplan con los valores que se han especificado para los flujos totales y con los acumulados de materia. Con estos valores se podrán obtener además , los valores de los acumulados parciales de materia en cada plato. Esto se realiza por medio de resolver los balances de materia por componente en cada plato.

Para ilustrar la metodología seguida en la deducción de las ecuaciones que dan solución al balance de materia

ETAPA

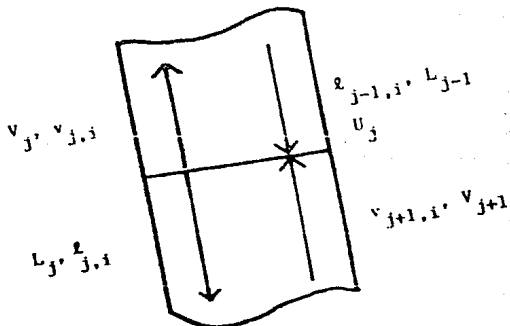
1

CONDENSADOR



2

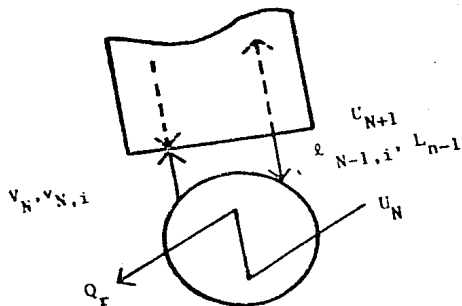
ETAPA J



J

N-1

REHERVIDOR



N

Figura 3.1 Operación de una torre de destilación por lote durante el periodo de arranque.

por componente se detallará el caso del balance en el plato (J), dejando las deducciones de las ecuaciones correspondientes del rehervidor y el condensador referidas al apéndice A1.

Para cualquier etapa  $j$  ( $j=2,3,\dots,n-1$ ), tenemos que:

$$\int_{t_n}^{t_n+\Delta t} (v_{j+1,i} + l_{j-1,i} - v_{j,i} - l_{j,i}) dt = (u_{j,i}^u + u_{j,i}^l) \Big|_{t_n+\Delta t} - (u_{j,i}^u + u_{j,i}^l) \Big|_{t_n} \quad 3.1$$

en donde :

$l_{j,i}$  = flujo molar del líquido del componente  $i$  que deja el plato  $j$ .

$v_{j,i}$  = flujo molar del vapor del componente  $i$  que deja el plato  $j$ .

$u_{j,i}$  = retención o acumulación de materia en moles del componente  $i$  en el plato  $j$  (ya sea de vapor o de líquido, denotados por los superíndices  $u$  y  $l$  respectivamente

$t$  = tiempo en unidades consistentes ( $t_n$  indicará el comienzo del incremento de tiempo  $n+1$  y  $t_{n+\Delta t}$  señalará el final).

$\Delta t$  = tamaño del período de tiempo.

Aplicando a la ecuación anterior el método implícito del doble punto explicado en el apéndice A.4 obtenemos:

$$v_{j+1,i} + l_{j-1,i} - v_{j,i} - l_{j,i} + \sigma (v_{j+1,i}^0 + l_{j-1,i}^0 - v_{j,i}^0 - l_{j,i}^0) \quad 3.2$$

$$= (u_{j,i} - u_{j,i}^0) / \phi \Delta t$$

en donde :

$$\sigma = (1 - \phi) / \phi$$

$\phi$  = parámetro de ajuste del método implícito del doble punto

En esta ecuación se han despreciado las acumulaciones

de vapor debido a que son muy pequeñas comparadas con el líquido acumulado en cada plato. En la ecuación 3.2 se han indicado los valores iniciales del período de tiempo  $n+1$  por medio del superíndice "0".

De las relaciones de equilibrio sabemos que :

$$v_{j,i}/V_j = K_{j,i} \ell_{j,i}/L_j \quad 3.3$$

donde :

$L_j$  = flujo molar total de líquido que sale del plato  $j$

$V_j$  = flujo molar total de vapor que sale del plato  $j$

de otra forma :

$$(L_j v_{j,i}) / (V_j K_{j,i}) = \ell_{j,i} \quad 3.4$$

de donde podemos definir :

$$A_{j,i} = L_j / (V_j K_{j,i}) \quad 3.5$$

por lo que 3.4 queda como :

$$A_{j,i} v_{j,i} = \ell_{j,i} \quad 3.6$$

Además, dado que la fase líquida en el plato  $j$  se considera que está perfectamente mezclada, las composiciones del líquido que cae y el que se acumula son iguales :

$$u_{j,i} / U_j = \ell_{j,i} / L_j \quad 3.7$$

en donde:

$U_j$  = acumulación total en moles de líquido en el plato  $j$

sustituyendo la ecuación 3.6 en 3.7 y reagrupando :

$$u_{j,i} = U_j (A_{j,i} v_{j,i}) / L_j \quad 3.8$$



La cual al sustituirla en la ecuación 3.2 se obtiene :

$$v_{j+1,i} + A_{j-1,i} v_{j-1,i} - v_{j,i} - A_{j,i} v_{j,i} = -\sigma(v_{j+1,i}^0 + \rho_{j-1,i}^0) - v_{j,i}^0 + (U_{j,i} v_{j,i}) / (L_{j,i} \phi \Delta t) - u_{j,i} / (\phi \Delta t) \quad 3.9$$

Si definimos el parámetro  $\tau_j$  como :

$$\tau_j = U_j / (L_j \phi \Delta t) \quad 3.10$$

Y al parámetro  $\rho_{j,i}$

$$\rho_{j,i} = 1 + A_{j,i} (1 + \tau_j) \quad 3.11$$

Al sustituir 3.10 y 3.11 en 3.9 queda finalmente :

$$A_{j-1,i} v_{j-1,i} - \rho_{j,i} v_{j,i} + v_{j+1,i} = -\sigma(v_{j+1,i}^0 + \rho_{j-1,i}^0 - v_{j,i}^0 - \rho_{j,i}^0) - u_{j,i} / (\phi \Delta t) \quad 3.12$$

De la misma forma se pueden obtener las ecuaciones restantes para resolver los balances de materia por componente en toda la columna (ver apéndice A1).

De esta manera se forma el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} 0.0 - \rho_{1,i} v_{1,i} + v_{2,i} &= -\sigma(v_{2,i}^0 + 0.0 - 0.0 - \rho_{1,i}^0) - u_{1,i} / (\phi \Delta t) \\ \rho_{1,i} v_{1,i} - \rho_{2,i} v_{2,i} + v_{3,i} &= -\sigma(v_{3,i}^0 + \rho_{1,i}^0 - v_{2,i}^0 - \rho_{2,i}^0) - u_{2,i} / (\phi \Delta t) \\ A_{j-1,i} v_{j-1,i} - \rho_{j,i} v_{j,i} + v_{j+1,i} &= -\sigma(v_{j+1,i}^0 + \rho_{j-1,i}^0 - v_{j,i}^0 - \rho_{j,i}^0) - u_{j,i} / (\phi \Delta t) \\ A_{n-1,i} v_{n-1,i} - \rho_{n,i} v_{n,i} + 0.0 &= -\sigma(0.0 + \rho_{n-1,i}^0 - v_{n,i}^0 - 0.0) - u_{n,i} / (\phi \Delta t) \end{aligned} \quad 3.13$$

En donde :

$$\begin{aligned} \rho_{1,i} &= 1 + \tau_1 \\ \rho_{j,i} &= 1 + A_{j,i} (1 + \tau_j) \quad (j=2, 3, \dots, n-1) \\ \rho_{n,i} &= 1 + (U_n / V_n) / (K_{n,i} \phi \Delta t) \\ \tau_j &= (U_j / L_j) / (\phi \Delta t) \quad (j=1, 2, 3, \dots, n-1) \\ A_{j,i} &= (L_j / V_j) / K_{j,i} \quad (j=2, 3, \dots, n-1) \text{ y } (i=1, 2, \dots, nc) \end{aligned}$$

$n$  = número total de etapas.

$nc$  = número total de componentes.

Reagrupando la ecuación 3.13 de forma matricial queda como:

$$\bar{A}_i \bar{v}_i = -\bar{F}_i \quad (i=1,2,\dots,nc) \quad 3.14$$

o de otra forma :

$$\begin{array}{cccccccc|c} -\rho_{1,i} & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \ell_{1,i} \\ 1 & -\rho_{2,i} & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & v_{2,i} \\ 0 & A_{2,i} & -\rho_{3,i} & 1 & 0 & \dots & 0 & v_{3,i} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & A_{n-2,i} & -\rho_{n-1,i} & \dots & 1 & v_{n-1,i} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & A_{n-1,i} & \dots & -\rho_{n,i} & v_{n,i} \end{array}$$

3.15

$$= - \begin{array}{c} \sigma(v_{2,i}^0 - \ell_{1,i}^0) + u_{1,i}^0 / (\phi \Delta t) \\ \sigma(v_{3,i}^0 + \ell_{1,i}^0 - v_{2,i}^0 - \ell_{2,i}^0) + u_{2,i}^0 / (\phi \Delta t) \\ \sigma(v_{j+1,i}^0 + \ell_{j-1,i}^0 - v_{j,i}^0 - \ell_{j,i}^0) + u_{j,i}^0 / (\phi \Delta t) \\ \dots \\ \sigma(\ell_{n-1,i}^0 - v_{n,i}^0) + u_{n,i}^0 / (\phi \Delta t) \end{array}$$

Esta matriz puede ser resuelta para el vector  $\bar{v}_i$  por medio del método Thomas descrito en el apéndice A.4 . Posteriormente se pueden calcular las acumulaciones  $u_{j,i}$  por medio de la ecuación 3.7 .

### III.1.2 METODO DE CONVERGENCIA THETA PARA EL PERIODO DE ARRANQUE

Durante cada periodo de tiempo, y para cada plato, se requiere determinar las temperaturas que satisfagan los balances de materia por componente y de energía, además de las especificaciones de la columna, para el final del periodo de tiempo

El método de convergencia theta permite, de manera indirecta, elegir una nueva serie de temperaturas en base a los resultados calculados con la última serie de temperaturas asumidas. El método altera o corrige las fracciones mol en la torre fundándose en el hecho de que estas cantidades reflejan el comportamiento de cada componente en la torre, al encontrarse dentro del balance de materia total, el cual además, debe de estar en concordancia con los valores específicos de destilado y de acumulación total de materia (condiciones de la torre). Esto permitirá encontrar una nueva serie de temperaturas de equilibrio que estén de acuerdo con las modificaciones hechas en cada plato a las composiciones de la mezcla a destilar. La naturaleza del método Theta se relaciona con la de los multiplicadores Lagrangianos en los que para cada condición de restricción o especificación realizada en el sistema, existirá un multiplicador. En el caso de una torre de destilación por lote, se tendrá un multiplicador llamado ( $\theta$ ) por cada acumulación de materia especificada .

Para el arranque, si además de especificar la carga térmica del rehervidor, se especifica la composición y la temperatura de burbuja de la carga alimentada, así como las acumulaciones totales de materia  $U_1, U_2 \dots U_n$  las que a su vez fijan la cantidad de líquido alimentado, tendremos  $n-1, \theta_j$ 's independientes, definidas de la siguiente manera:

$$u_{j,i}/u_{1,i} = \theta_j (u_{j,i}/u_{1,i})_{ca} \quad 3.16$$

Donde el subíndice "ca" indica los valores obtenidos a partir de los balances de materia por componente evaluados con la serie de temperaturas supuesta.

Las  $\theta_j$ 's tendrán que ser evaluadas de tal forma que las  $u_{j,i}$ 's corregidas cumplan con los balances de materia por componente y estén de acuerdo con los valores especificados de las  $U_j$ 's. Para lograr ésto, se requiere desarrollar una expresión de la  $u_{1,i}$  que satisfaga lo anterior.

Si las  $u_{j,i}$ 's corregidas cumplen con los balances de materia por componente, y dado que no existen corrientes de entrada o salida a la torre durante el período de arranque, tenemos que :

$$\sum_{j=1}^n u_{j,i} - \sum_{j=1}^n u_{j,i}^0 = 0 \quad 3.17$$

de otra forma

$$\sum_{j=1}^n u_{j,i} = \sum_{j=1}^n u_{j,i}^0 = U_a X_{ai} \quad 3.18$$

en donde :

$U_a$  = flujo molar de alimentación a la torre, al tiempo  $t=0$

$X_{ai}$  = fracción molar del componente  $i$  en el flujo de alimentación, al tiempo  $t=0$

despejando  $u_{1,i}$  de 3.17 obtenemos :

$$u_{1,i} = U_a X_{ai} - \sum_{j=2}^n u_{j,i} \quad 3.19$$

sustituyendo 3.16 en 3.17 y reagrupando :

$$u_{1,i} = (U_a X_{ai}) / (1 + \sum_{j=2}^n \theta_j (u_{j,i} / u_{1,i})_{ca}) \quad 3.20$$

Esta ecuación permite el cálculo de  $u_{1,i}$  a partir de parámetros conocidos, a excepción de los valores  $\theta$ 's. A partir de la ecuación 3.20, y gracias a la ecuación 3.16 que permite establecer los valores de las  $u_{j,i}$ 's restantes en términos de los valores  $\theta$ 's, podremos calcular estos últimos, si se resuelve el sistema de ecuaciones simultáneas:

$$g_1(\theta_2, \theta_3, \theta_4, \dots, \theta_n) = \sum_{i=1}^{nc} u_{1,i} - U_1$$

$$g_j(\theta_2, \theta_3, \theta_4, \dots, \theta_n) = \sum_{i=1}^{nc} u_{j,i} - U_j$$

(j=2,3,...,n-1)

tal que se cumpla  $g_1 = g_2 = g_3 = \dots = g_{n-1} = 0$

de esta forma los valores  $\theta$ 's pueden ser calculados mediante el uso de un método de resolución de ecuaciones múltiples no lineales, como el método de Broyden. (apendice A.4)

Posteriormente, las fracciones mol pueden ser fácilmente evaluadas por medio de la siguiente ecuación :

$$x_{j,i} = ((u_{j,i}/u_{1,i})_{ca})^{nc} / \sum_{i=1}^{nc} ((u_{j,i}/u_{1,i})_{ca})^{nc}$$

donde :

$$x_{j,i} = \text{fracción mol del componente } i \text{ en el plato } (j)$$

Sin embargo, es muy probable que para los componentes más pesados, el valor de  $u_{1,i}$  pueda llegar a ser cero durante el cálculo lo que acarrearía problemas de división por cero en las ecuaciones 3.20 y 3.16. Para evitar ésto, se puede definir el factor  $p_i$  a partir de la ecuación 3.20 dividiéndolo entre  $(u_{1,i})_{ca}$  :

$$p_i = (U_a X_{ai}) / ((u_{1,i})_{ca} + \sum_{j=2}^n \theta_j (u_{j,i})_{ca}) \quad 3.21$$

por lo que :

$$u_{1,i} = p_i (u_{1,i})_{ca} \quad 3.22$$

y las funciones  $g_j$  quedan establecidas como :

$$g_1(\theta_2, \theta_3, \theta_4, \dots, \theta_n) = \sum_{i=1}^{nc} p_i(u_{1,i})_{ca} - U_1 \quad 3.23$$

$$g_j(\theta_2, \theta_3, \theta_4, \dots, \theta_n) = \sum_{i=1}^{nc} \theta_j p_i(u_{j,i})_{ca} - U_j$$

(j=2,3,4,...,n-1)

$$x_{j,i} = (u_{1,i})_{ca} p_i / \sum_{i=1}^{nc} (u_{j,i})_{ca} p_i \quad 3.24$$

Así, el algoritmo de cálculo del método Theta quedaría de la siguiente manera :

- 1.- Evaluar las  $(u_{j,i})_{ca}$  a partir de los balances de masa por componente (secc. III.1.1).
- 2.- Calcular los valores de  $p_i$  de la ecuación 3.21.
- 3.- Resolver por el método de Broyden las ecuaciones 3.23.
- 4.- Obtener las  $x_{j,i}$ 's corregidas con la ecuación 3.24.

### III.1.3 DETERMINACION DE LAS TEMPERATURAS DE EQUILIBRIO-METODO Kb

Una vez que se han obtenido las  $x_{j,i}$ 's es necesario determinar las temperaturas de equilibrio que corresponden a estos valores. La nueva serie de temperaturas puede ser calculada por medio de un método al que Holland<sup>17</sup> denomina Kb. Este método elimina el problema de emplear un algoritmo de prueba y error para determinar las temperaturas de burbuja o de rocío en cada plato.

El método Kb hace la suposición de que la volatilidad relativa, referida a un componente base, se mantiene constante durante el intervalo de tiempo  $\Delta t$ , en cada plato (j). Esto es válido sobre todo cuando se trata de una mezcla multicomponente que se comporta como una solución ideal y cuyos puntos de ebullición están muy cercanos entre sí. Para una solución ideal tenemos que  $K_i = Y_i/x_i$ , y por medio de la ley de Raoult sabemos que  $K_i = P_i^0/P$ , en donde  $P_i^0$  es

la presión de vapor del componente  $i$  en función de la temperatura, mientras que  $P$  es la presión en la columna. Así que la volatilidad relativa del componente  $i$  respecto al componente  $j$  sería  $\alpha_{j,i} = P_i^0 / P_j^0$ . De tal manera que para cumplir lo estipulado por el método Kb las funciones de la presión de vapor de los componentes  $i$  y  $j$  deben tener un comportamiento muy similar a distintas temperaturas. Aunque este comportamiento comienza a tener desviaciones conforme nos alejamos de la idealidad y el rango entre los puntos de ebullición se hacen más amplios, podemos considerar para los fines de la simulación de la torre, que los valores de las  $\alpha_{j,i}$ 's no varíen para un intervalo de tiempo  $\Delta t$  lo suficientemente pequeño. De acuerdo con ésto, y tomando como referencia la volatilidad con respecto a un componente base "b", cuyo punto de ebullición sea intermedio en la mezcla o ligeramente mayor, tendremos que:

$$\alpha_{j,b,i} = K_{j,i} / K_{j,b} \quad 3.25$$

Sustituyendo la ecuación A.3.26 en 3.25 y para todas las especies de la mezcla tenemos:

$$\sum_{i=1}^{nc} \alpha_{j,b,i} K_{j,b} x_{j,i} = 1 \quad 3.26$$

De donde para un intervalo de tiempo  $\Delta t$ , durante el cual  $T_{j,n+1}$  y  $T_{j,n}$  indican las temperaturas al final y al principio del período :

$$K_{j,b}|_{T_{j,n+1}} = 1 / \left( \sum_{i=1}^{nc} \alpha_{j,b,i} |_{T_{j,n}} x_{j,i} \right) \quad 3.27$$

en función de  $Y_{j,i}$  :

$$K_{j,b}|_{T_{j,n+1}} = \sum_{i=1}^{nc} (Y_{j,i} / \alpha_{j,b,i}) |_{T_{j,n}} \quad 3.28$$

Donde :

$Y_{j,i}$  = fracción molar en la fase vapor del componente  $i$  en el plato  $j$

Ahora bien, muchos compuestos se caracterizan por el hecho de que sus presiones de vapor pueden evaluarse aproximadamente por medio de la ecuación de Clausius Clapeyron. Estos compuestos presentan calores latentes de vaporización muy similares. Para tales compuestos,<sup>15</sup> cuando se grafica el logaritmo de la presión de vapor, contra el inverso de la temperatura absoluta, se obtienen líneas paralelas, y para cualquier pareja de compuestos de este tipo, se podría demostrar que su volatilidad relativa es independiente de la temperatura. De acuerdo con ésto, se puede decir que :

$$\ln P_i^0 = (b/T') + a' \quad 3.29$$

en donde :

$P_i^0$  = presión de vapor del componente  $i$  a la temperatura  $T'$ .

$a'$  y  $b$  = son los parámetros de correlación de una línea recta :

$T'$  = temperatura absoluta

Como ya se mencionó anteriormente, en la idealidad  $K_i = P_i^0/P$ , por lo que la ecuación 3.29 se puede reagrupar:

$$\ln K_i = (b/T') + a \quad 3.30$$

en donde

$$a' = a - \ln P \quad 3.31$$

Así que si suponemos que  $K_{j,b}$  puede ser expresado por la ecuación 3.31, bastará con conocer las fracciones de la mezcla a destilar, al final del intervalo de tiempo  $y$ , las  $\alpha_{j,b,i}$  correspondientes al final del período de tiempo ante-



rior para conocer la temperatura de equilibrio, a y b se pueden evaluar con los límites superior e inferior de las temperaturas de ebullición individuales entre los componentes de la mezcla (temperaturas de ebullición de los compuestos más ligero y más pesado).

No obstante, los resultados obtenidos por este método para presiones elevadas muestra gran desviación cuando se emplea la ecuación 3.31, por lo cual es recomendable el empleo de otro medio más preciso que sustituya a esta ecuación cuando las condiciones de operación se alejen de la idealidad. En el caso de emplear un método termodinámico para evaluar las  $K_{jb}$ 's se puede seguir los siguientes pasos:

- 1.- Determinar la  $K_{jb}$ 's por medio de la ecuación 3.27 o 3.28 según convenga, a partir de las fracciones mol corregidas del método Theta y de las  $\alpha_{jb,i}$  evaluadas a la temperatura de inicio del período de tiempo.
- 2.- Suponer temperaturas en cada plato y evaluar las  $K_{jb}$ 's por el método termodinámico elegido hasta que se igualen a los valores del punto anterior. Para lograr esto se puede emplear el método de Newton modificado, analizado en el apéndice A.4.2.1.1 utilizando como función a converger la siguiente ecuación :

$$F_j(T_j) = K_{jb} - (K_{jb})_{ca} \quad 3.32$$

donde el subíndice "ca" indica en este caso los valores de  $K_{jb}$  calculados del punto 1. La primera suposición de  $T_j$  se puede realizar por medio de la temperatura de ebullición de la mezcla alimentada a la torre o con los valores de  $T_j$  evaluados al final del período de tiempo anterior.

Con todo y el empleo de un método iterativo, el método  $K_b$  resultó ser más rápido y menos engorroso que los métodos tradicionales para encontrar las temperaturas de equilibrio.

Además, los resultados que se obtienen, si se ha seleccionado un método termodinámico adecuado para la mezcla a destilar, son bastante aceptables

### III.1.4 EVALUACION DE LOS BALANCES DE ENTALPIA Y DE MATERIA TOTAL EN LA TORRE, METODO DE LA COMPOSICION CONSTANTE.

Holland y Liapis<sup>17</sup> proponen un método para el cálculo de una nueva serie de flujos totales en base a los valores de las  $x_{j,i}$ 's corregidas y las temperaturas correspondientes encontradas gracias al método Kb. Este método, denominado por el nombre de método de la composición constante, elimina el flujo de un componente para la etapa  $j$  de cada balance de entalpía, por medio del uso de los balances de materia por componente del plato  $j$ . Cada balance de entalpía puede encerrar ya sea un sólo plato (inclusive el domo o el fondo de la torre) ó todos los platos de la columna.

El primer paso de este procedimiento consiste en calcular la carga térmica del condensador. Así, del balance de energía de la torre tenemos :

$$\int_{t_n}^{t_n+\Delta t} (Q_r - Q_c) dt = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{nc} (u_{j,i} \hat{H}_{j,i} + u_{j,i}^l \hat{h}_{j,i}) \Big|_{t_n}^{t_n+\Delta t} - \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{nc} (u_{j,i} \hat{h}_{j,i} + u_{j,i}^l \hat{H}_{j,i}) \Big|_{t_n} \quad 3.33$$

en donde :

$Q_r$  = carga térmica del rehervidor en unidades de energía sobre tiempo.

$Q_c$  = carga térmica del condensador en unidades de energía sobre tiempo.

$\hat{h}_{j,i}$  = valor virtual de la entalpía molar parcial del vapor para el componente  $i$  en el plato  $j$ .

$\hat{H}_{j,i}$  = valor virtual de la entalpía molar parcial del líquido para  $i$  en el plato  $j$

Resolviendo la integral por el método implícito del doble punto y despreciando la acumulación del vapor  $\dot{u}_{j,i}^U$  tenemos:

$$Q_c = Q_r + \sigma(Q_r^0 - Q_c) - 1/(\phi \Delta t) \sum_{i=1}^{nc} \sum_{j=1}^n (u_{1,i} \hat{h}_{j,i} - u_{j,i}^0 \hat{h}_{j,i}) \quad 3.34$$

Ahora realizando un balance de entalpía en el condensador

$$\int_{t_n}^{t_n + \Delta t} \left( \sum_{i=1}^{nc} v_{2,i} \hat{H}_{2,i} - \lambda_{1,i} \hat{h}_{1,i} \right) - Q_c dt = \sum_{i=1}^{nc} (u_{1,i}^U \hat{H}_{1,i} + u_{1,i}^L \hat{h}_{1,i}) \Big|_{t_n}^{t_n + \Delta t} - \sum_{i=1}^{nc} (u_{1,i}^U \hat{H}_{1,i} - u_{1,i}^L \hat{h}_{1,i}) \Big|_{t_n} \quad 3.35$$

Por medio del método implícito del doble punto y despreciando la retención  $u_{1,i}^U$ ,

$$\sum_{i=1}^{nc} (v_{2,i} \hat{H}_{2,i} - \lambda_{1,i} \hat{h}_{1,i}) - Q_c + \sigma \left( \sum_{i=1}^{nc} (v_{2,i}^0 \hat{H}_{2,i}^0 - \lambda_{1,i}^0 \hat{h}_{1,i}^0) - Q_c \right) = \sum_{i=1}^{nc} (u_{1,i} \hat{h}_{1,i} - u_{1,i}^0 \hat{h}_{1,i}^0) / (\phi \Delta t) \quad 3.36$$

Despejando  $\lambda_{1,i}$  de la ecuación A.1.2 del balance de masa por componente y sustituyendo en 3.36 .

$$\sum_{i=1}^{nc} (v_{2,i} \hat{H}_{2,i} - (v_{2,i} + \sigma(v_{2,i}^0 - \lambda_{1,i}^0) - ((u_{1,i} - u_{1,i}^0) / \phi \Delta t)) \hat{h}_{1,i}) - Q_c + \sigma \left( \sum_{i=1}^{nc} (v_{2,i}^0 \hat{H}_{2,i}^0 - \lambda_{1,i}^0 \hat{h}_{1,i}^0) - Q_c \right) = \sum_{i=1}^{nc} (u_{1,i} \hat{h}_{1,i} - u_{1,i}^0 \hat{h}_{1,i}^0) / (\phi \Delta t) \quad 3.37$$

si  $v_{2,i} = Y_{2,i}$  . entonces reagrupando 3.37 podremos despejar  $Y_{2,i}$  como:

$$Y_{2,i} = \frac{Q_c - \sigma \left( \sum_{i=1}^{nc} (Y_{2,i} (\hat{H}_{2,i}^0 - \hat{h}_{1,i}^0) - \lambda_{1,i}^0 (\hat{h}_{1,i}^0 - \hat{h}_{1,i}^0)) - Q_c^0 \right)}{\sum_{i=1}^{nc} Y_{2,i} (\hat{H}_{2,i} - \hat{h}_{1,i})} + \frac{\sum_{i=1}^{nc} u_{1,i}^0 (\hat{h}_{1,i} - \hat{h}_{1,i}^0) / (\phi \Delta t)}{\sum_{i=1}^{nc} Y_{2,i} (\hat{H}_{2,i} - \hat{h}_{1,i})} \quad 3.38$$

Del balance de materia en el condensador tenemos:

$$\int_{t_n}^{t_n + \Delta t} \frac{1}{n} (V_2 - L_1) dt = (U_1^U + U_1^L) \Big|_{t_n + \Delta t} - (U_1^U + U_1^L) \Big|_{t_n} \quad 3.39$$

por medio del método implícito del doble punto, despreciando la acumulación del vapor

$$V_2 - L_1 + \alpha (V_2^0 - L_1^0) = (U_1 - U_1^0) / (\phi \Delta t) \quad 3.40$$

Dado que se considera que la acumulación del líquido en cada plato es constante respecto al tiempo, es claro que el segundo término de la ecuación 3.40 se elimina. Además en vista de que al inicio del período de arranque no hay flujos ni de vapor ni de líquido y que esto se reflejará a lo largo del tiempo, tenemos finalmente:

$$L_1 = V_2 \quad 3.41$$

En forma similar se obtienen las ecuaciones para  $V_{j+1}$  y  $L_j$  (en el apéndice A.2 se puede consultar el desarrollo para la obtención de estas ecuaciones).

$$\begin{aligned} V_{j+1} = & \left[ \sum_{i=1}^{nc} (v_{j,i} (\hat{H}_{j,i} - \hat{h}_{j,i}) - x_{j-1,i} (\hat{h}_{j-1,i} - \hat{h}_{j,i})) - \right. \\ & \sigma \sum_{i=1}^{nc} (v_{j+1,i}^0 (\hat{H}_{j+1,i}^0 - \hat{h}_{j,i}) + x_{j-1,i}^0 (\hat{h}_{j-1,i}^0 - \hat{h}_{j,i})) \\ & \left. - v_{j,i}^0 (\hat{H}_{j,i}^0 - \hat{h}_{j,i}) - x_{j,i}^0 (\hat{h}_{j,i}^0 - \hat{h}_{j,i}) \right] + \sum_{i=1}^{nc} (u_{j,i}^0 (\hat{h}_{j,i} - \hat{h}_{j,i}^0) / \phi \Delta t) \\ & / \left[ \sum_{i=1}^{nc} y_{j+1,i} (\hat{H}_{j+1,i} - \hat{h}_{j,i}) \right] \end{aligned} \quad 3.42$$

$$(j=2, 3, 4, \dots, n)$$

$$L_j = V_{j+1} + L_{j-1} - V_j \quad (j=2, 3, \dots, n-1) \quad 3.43$$

### III.1.5 SOLUCION DEL PROBLEMA DE SIMULACION DE UNA TORRE DE DESTILACION POR LOTE DURANTE EL PERIODO DE ARRANQUE

La selección apropiada del valor de  $\phi$ , durante la aplicación del método implícito del doble punto, es de suma importancia para que se pueda lograr una simulación adecuada de una torre de destilación por lote sin peligro de que el método no pueda converger hacia la condición de operación en el estado estacionario o que el método oscile demasiado.

Holland y Liapis, recomiendan el empleo de  $\phi$  con valores superiores a 0.5 y específicamente igual a 0.6, para resolver este problema en particular.

Por otro lado, mientras se utilicen valores de  $\Delta t$  muy pequeños, pueden obtenerse soluciones más precisas durante la operación transiente, que cuando se empleen valores grandes; sin embargo, es recomendable el uso de valores  $\Delta t$  superiores a  $10E-6$  minutos,<sup>17</sup> ya que así se impide que los valores de los acumulados de líquido tomen demasiada importancia en los cálculos. La suposición inicial de  $\Delta t$  puede tomarse como un quinto del tiempo de residencia promedio del acumulado de líquido en los platos,<sup>17</sup> es decir :

$$\Delta t = \frac{(U_j/L_j)_{prom}}{5} \quad 3.44$$

Conforme la operación de la torre se acerca al estado estacionario, no resulta práctico el empleo de  $\Delta t$ 's pequeños dado que las condiciones de operación de la torre ya no varían mucho de período a período. Holland y Liapis<sup>17</sup> proponen que el valor de  $\Delta t$  se duplique cada 10 períodos pero nuestros resultados muestran que la utilización de una función de tipo exponencial para la determinación de cada nuevo período es bastante más adecuado y de una utilidad más práctica. De esta forma, al principio se tendrán períodos

muy cortos, los cuales irán creciendo de acuerdo al avance paulatino del tiempo. La ecuación que utilizamos tiene la forma :

$$\Delta t = (1.07 e^{\Delta t^0}) - 1 + \Delta t^0 \quad 3.45$$

A continuación se muestra el procedimiento de cálculo para realizar la simulación de la torre de destilación por lote durante su arranque ; pero antes es importante hacer notar los siguientes puntos :

1.- Al inicio del arranque, es decir, cuando  $t=0$ , cada plato contiene parte del líquido alimentado en su punto de ebullición a la presión de operación de la torre. Por lo tanto se considera que :  $L_j^0 = V_j^0 = Q_c^0 = Q_r^0 = 0$

2.- A un tiempo mayor de cero,  $t=0+$ , se inicia la operación del rehervidor, el cual proporcionará, a la columna, una carga térmica  $Q_r$ .

Para el enésimo período  $t_n$  a  $t_n + \Delta t$  las etapas de cálculo son :

1.- Asignar un valor para  $\Delta t$  y tomar  $\phi$  como 0.6 .

2.- Suponer valores para las temperaturas de equilibrio en los platos  $T_j$ , y para  $V_j$  y  $L_j$  al tiempo  $t_n + \Delta t$ , esto es el final del período considerado, como primer aproximación para iniciar el método.

Para el primer período, se puede suponer un calor latente de vaporización promedio de la mezcla multicomponente a separar, y calcular la cantidad de vapor que se formará con la carga térmica  $Q_r$ . Esto hará posible asignar valores para  $V_j$  y posteriormente encontrar los valores de  $L_j$  con la ecuación 3.41 y 3.43, mientras que las temperaturas  $T_j$  se pueden igualar a la temperatura de ebullición de la mezcla alimentada a la presión de operación .

Para el segundo período se pueden asumir los valores de  $T_j, V_j, L_j$  calculados al final del primer período , como las nuevas suposiciones.

A partir del tercer período pueden emplearse las siguientes aproximaciones :

Si  $dT_j/dt$  puede ser representado de la siguiente manera

$$dT_j / dt = (T_j|_{t_n+\Delta t} - T_j|_{t_n-\Delta t}) / (2\Delta t_{n+1}) \quad 3.46$$

Despejando  $T_j|_{t_n+\Delta t}$  :

$$T_j|_{t_n+\Delta t} = T_j|_{t_n-\Delta t} + 2\Delta t_{n+1}(dT_j/dt)|_{t_n} \quad 3.47$$

$dT_j/dt$  también puede representarse como :

$$dT_j/dt = (T_j|_{t_n} - T_j|_{t_n-\Delta t}) / \Delta t_n \quad 3.48$$

entonces :

$$T_j|_{t_n+\Delta t} = T_j|_{t_n-\Delta t} + 2\Delta t_{n+1}(T_j|_{t_n} - T_j|_{t_n-\Delta t}) / \Delta t_n \quad 3.49$$

Donde los subíndices representan :

$t_n+\Delta t$  = el valor final del período  $n+1$ .

$t_n$  = el valor al principio del período  $n+1$  o al final del  $n$ .

$t_n-\Delta t$  = el valor al principio del período  $n$ .

De igual forma para encontrar los valores iniciales de  $V_j$  se tiene :

$$V_j|_{t_n+\Delta t} = V_j|_{t_n-\Delta t} + 2\Delta t_{n+1}(V_j|_{t_n} - V_j|_{t_n-\Delta t}) / \Delta t_n \quad 3.50$$

y los valores de  $L_j$  se obtienen de las ecuaciones 3.41, 3.43

3.- Calcular  $v_{j,i}$ ,  $q_{j,i}$ ,  $u_{j,i}$  de acuerdo a la sección IV.2.1.1.

4.- Encontrar los valores  $\Theta$ 's como se explicó en la sección III.1.2

5.- Evaluar las temperaturas de equilibrio por el método de la sección III.1.3.

6.- Determinar los nuevos valores de  $V_j$  y  $L_j$  como se vio en la sección III.1.4.

7.- Si el valor de la norma  $\| \theta_{j-1} \|$  es  $\leq 1E-4$ , o no hay variación entre las temperaturas  $T_j$  de una iteración a otra; prosiga al siguiente período regresando a la etapa 1 y cambiando el valor de  $\Delta t$ . (La serie de valores encontrados al tiempo  $t_n + \Delta t$  se considerarán como la serie inicial de valores de las variables para el siguiente período). De otra forma pasar a la etapa 3.

El método se detiene cuando se ha alcanzado un cierto tiempo de operación especificado, o la torre haya entrado en estado estacionario, es decir:

$$\| (T_j |_{t_n + \Delta t} - T_j |_{t_n}) / T_j |_{t_n + \Delta t} \| \leq 1 E - 4 \quad 3.51$$



### III .2 EL PERIODO DE PRODUCTO

Una vez que se ha concluido con el período de arranque, se comienza a remover el producto destilado de la columna ( $D > 0$ ). En general, una columna puede ser operada de diferentes formas durante el período de producto. Debido a ésto, el desarrollo de este método tiene las siguientes consideraciones:

- 1.- Se requieren hacer dos especificaciones que fijen el destilado,  $L_1$  o  $V_2$  y el flujo de destilado,  $D$ . (De hecho bastará con indicar el destilado como un porcentaje del líquido que se estaba refluendo a la torre durante el arranque, manteniendo a  $V_2$  constante, lo cual fijará automáticamente el valor de  $L_1$ ). Esto permitirá encontrar las cargas térmicas del condensador y del rehevador  $Q_c$  y  $Q_r$  respectivamente.
- 2.- Se supone que los valores de los acumulados  $U_j$ 's se conocen a excepción del valor de  $U_n$  (acumulado en el rehevador), el cual disminuirá conforme avance el período de producto.
- 3.- Es posible que ya no se trabaje con un condensador total por lo que requiere definirse el tipo de condensador empleado (parcial o total).
- 4.- Son conocidas las condiciones de operación al inicio del período de producto (condiciones finales de operación del período de arranque).

#### III .2.1 RESOLUCION DE LOS BALANCES DE MATERIA POR COMPONENTE EN CADA PLATO. METODO IMPLICITO DEL DOBLE PUNTO

La operación de una torre de destilación por lote durante el período de producto se lleva a cabo de acuerdo con la figura 3.1, exceptuando al primer plato, el cual se ilustra en la figura 3.2.

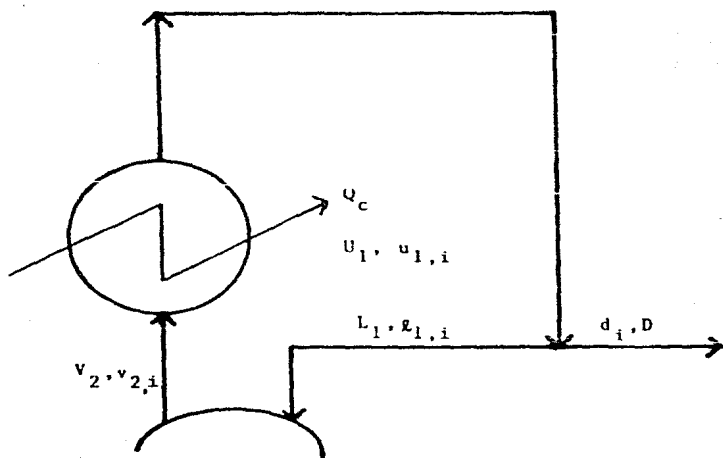


Figura 3.2 Operación del primer plato de una torre de destilación por lote durante el periodo de producto.

Al realizar los balances de materia por componente en cada etapa de la torre y aplicando el método implícito del doble punto, se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones :

$$-d_{1,i}\rho_{1,i} + v_{2,i} = -\alpha (v_{2,i}^0 - \rho_{1,i}^0 - d_{1,i}^0 + 0) - (u_{1,i})/(\phi\Delta t)$$

$$A_{j-1,i}v_{j-1,i} - v_{j,i}\rho_{j,i} + v_{j+1,i} = -\sigma (v_{j+1,i}^0 - \rho_{j,i}^0 - v_{j,i}^0 + \rho_{j-1,i}^0) - (u_{j,i})/(\phi\Delta t)$$

$$A_{n-1,i}v_{n-1,i} - v_{n,i}\rho_{n,i} + 0 = -\sigma (0 - 0 - v_{n,i}^0 + \rho_{n-1,i}^0) - (u_{n,i})/(\phi\Delta t)$$

3.52

Donde :

$d_i$  = Flujo molar en el destilado del componente  $i$

$\tau_j = (U_j/L_j)/(\phi\Delta t)$  ( $j=1,2,3,\dots,n-1$ )

$A_{1,i} = L_1/(DK_{1,i})$  condensador parcial.

$A_{1,i} = L_1/D$  condensador total.

$A_{j,i} = L_j/(VK_{j,i})$  ( $j=2,3,\dots,n-1$ )

$\rho_{j,i} = 1 + A_{j,i}(1 + \tau_j)$  ( $j=1,2,3,\dots,n-1$ )

$\rho_{n,i} = 1 + (U_n/V_n)/(K_{n,i}\phi\Delta t)$

La deducción de las ecuaciones 3.52 se puede observar en el apéndice A1.

Reagrupando 3.52 en forma matricial :

$$\bar{A}_i \bar{v}_i = -\bar{F}_i \quad (i=1,2,3,\dots,nc) \quad 3.53$$

$$\left| \begin{array}{cccccc|c} -\rho_{1,i} & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & d_i \\ A_{1,i} & -\rho_{2,i} & 1 & 0 & \dots & 0 & v_{2,i} \\ 0 & A_{2,i} & -\rho_{3,i} & 1 & \dots & 0 & v_{3,i} \\ \hline 0 & 0 & A_{n-2,i} & -\rho_{n-1,i} & \dots & 1 & v_{n-1,i} \\ 0 & 0 & 0 & A_{n-1,i} & \dots & -\rho_{n,i} & v_{n,i} \end{array} \right| \quad 3.54$$

(continua)

$$\begin{array}{l}
 \sigma (v_{2,i}^0 - \ell_{1,i}^0 - d_i^0 + 0) - u_{1,i}^0 / (\phi \Delta t) \\
 \sigma (v_{3,i}^0 - \ell_{2,i}^0 - v_{2,i}^0 + \ell_{1,i}^0) - u_{2,i}^0 / (\phi \Delta t) \\
 \sigma (v_{4,i}^0 - \ell_{3,i}^0 - v_{3,i}^0 + \ell_{2,i}^0) - u_{3,i}^0 / (\phi \Delta t) \\
 \text{-----} \\
 \sigma (v_{n,i}^0 - \ell_{n-1,i}^0 - v_{n-1,i}^0 + \ell_{n-2,i}^0) - u_{n-1,i}^0 / (\phi \Delta t) \\
 \sigma (0 - 0 - v_{n,i}^0 + \ell_{n-1,i}^0) - u_{n,i}^0 / (\phi \Delta t)
 \end{array}
 \quad 3.54$$

Este sistema de ecuaciones puede ser fácilmente resuelto para  $\bar{v}_i$  por medio del método Thomas de acuerdo a cualquier serie de valores  $\theta$  y  $\Delta t$  que se haya elegido y a las  $L_j$ 's,  $V_j$ 's y  $T_j$ 's supuestas. Los valores de los acumulados por componente en cada plato se pueden encontrar gracias a la ecuación 3.7 .

### III .2.2 METODO DE CONVERGENCIA THETA PARA EL PERIODO DE PRODUCTO

Durante el período de producto es necesario definir los multiplicadores theta en función de los valores  $d_i$ , para poder contabilizar el efecto del destilado en la operación de la torre. De acuerdo con ésto, se tiene que las  $\theta_j$ 's pueden ser expresados como :

$$u_{n,i}/d_i = \theta_0(u_{n,i}/d_i)_{ca} \quad 3.55$$

$$u_{j,i}/d_i = \theta_j(u_{j,i}/d_i)_{ca} \quad ; \quad (j=1,2,\dots,n-1) \quad 3.56$$

Ahora se requiere encontrar una ecuación que determine el valor de  $d_i$ .

Analicemos primero el caso de un condensador parcial.

Al realizar un balance de materia por componente en toda la torre tenemos que :

$$\int_{t_n}^{t_n + \Delta t} (-d_i) dt = \sum_{j=1}^n (u_{j,i}|_{t_n + \Delta t} - u_{j,i}|_{t_n}) \quad 3.57$$

Aplicando el método implícito del doble punto :

$$-d_i - \sigma d_i^0 = \sum_{j=1}^n (u_{j,i} - u_{j,i}^0) / (\phi \Delta t) \quad 3.58$$

Sustituyendo las ecuaciones 3.55 y 3.56 en 3.58 y despejando  $d_i$  :

$$d_i = \frac{-\sigma d_i^0 + \left( \sum_{j=1}^n u_{j,i}^0 \right) / (\phi \Delta t)}{1 + \left( \sum_{j=1}^{n-1} \theta_j (u_{j,i}/d_i)_{ca} + \theta_0 (u_{n,i}/d_i)_{ca} \right) / (\phi \Delta t)} \quad 3.59$$

Para un condensador total, dado que  $U_1$  y  $D$  se consideran constantes, se tiene :

$$u_{1,i}/d_i = U_1/D \quad 3.60$$

Esto hará que  $u_{j,i}/d_i$  sea constante, y por lo tanto  $Q_1=1$  de acuerdo con la ecuación 3.56, de aquí que la ecuación que se obtiene para  $d_i$  será :

$$d_i = \frac{-\sigma d_i^0 + (\sum_{i=1}^n u_{j,i}^0) / (\phi \Delta t)}{1 + (\sum_{j=2}^{n-1} \theta_j (u_{j,i} / d_i)_{ca} + \theta_0^c (u_{n,i} / d_i)_{ca}) / (\phi \Delta t)} \quad 3.61$$

Las funciones  $g$  estarán dadas por :

$$g_0(\theta_0, \theta_1^0, \theta_2, \dots, \theta_{n-1}) = \sum_{i=1}^{nc} d_i - D \quad 3.62$$

$$g_j(\theta_0, \theta_1^0, \theta_2, \dots, \theta_{n-1}) = \sum_{i=1}^{nc} u_{j,i} - U_j \quad 3.63$$

( $j=1, 2, \dots, n-1$ )

ono se aplica para un condensador total .

Para evitar problemas por división entre cero, se puede definir al factor  $p_i$  como :

$$p_i = d_i / (d_i)_{ca} \quad 3.64$$

por lo que :

$$p_i = \frac{-\sigma d_i^0 + (\sum_{j=1}^n u_{j,i}^0) / (\phi \Delta t)}{(d_i)_{ca} + (\sum_{j=1}^{n-1} \theta_j (u_{j,i})_{ca} + \theta_0^c (u_{n,i})_{ca}) / (\phi \Delta t)} \quad 3.65$$

donde :

$$i\ell = \begin{cases} 1 & \text{para condensador parcial} \\ 2 & \text{para condensador total} \end{cases}$$

y

$$g_0(\theta_0, \theta_1^0, \theta_2, \dots, \theta_{n-1}) = \sum_{i=1}^{nc} p_i (d_i)_{ca} - D \quad 3.66$$

$$g_j(\theta_0, \theta_1^0, \theta_2, \dots, \theta_{n-1}) = \sum_{i=1}^{nc} p_i \theta_j (u_{j,i})_{ca} - U_j \quad 3.67$$

( $j=1, 2, \dots, n-1$ )

ono se aplica para un condensador total .

Al igual que en la sección III.1.2 los valores de theta se pueden encontrar de tal manera, que las funciones g se vuelvan cero, para lo cual se puede utilizar el método Broyden. Los valores de las fracciones mol  $x_{j,i}$  se pueden evaluar por medio de :

$$x_{j,i} = (u_{j,i}/d_i)_{ca} d_i / \sum_{i=1}^{nc} ((u_{j,i}/d_i)_{ca} d_i) \quad 3.68$$

o

$$x_{j,i} = (u_{j,i})_{ca} p_i / \sum_{i=1}^{nc} ((u_{j,i})_{ca} p_i) \quad 3.69$$

### III.2.3 EVALUACION DE LOS BALANES DE ENTALPIA Y DE MATERIA TOTAL EN LA TORRE. METODO DE LA COMPOSICION CONSTANTE

Las ecuaciones que se obtienen al aplicar los balances de entalpia y de materia total a cada etapa de la torre son (las deducciones se encuentran en el apendice A.2) :

$$Q_c = V_2 \sum_{i=1}^{nc} Y_{2,i} (\hat{H}_{2,i} - \hat{h}_{1,i}) - D \sum_{i=1}^{nc} x_{d,i} (\hat{H}_{d,i} - \hat{h}_{1,i}) + \\ \sigma (V_2 \sum_{i=1}^{nc} Y_{2,i}^0 (\hat{H}_{2,i}^0 - \hat{h}_{1,i}^0) - L_1 \sum_{i=1}^{nc} x_{1,i}^0 (\hat{h}_{1,i}^0 - \hat{h}_{1,i}^0) - \\ D \sum_{i=1}^{nc} x_{d,i}^0 (\hat{H}_{d,i}^0 - \hat{h}_{1,i}^0) - Q_c^0) + U \sum_{i=1}^{nc} x_{1,i}^0 (\hat{h}_{1,i}^0 - \hat{h}_{1,i}^0) / (\phi \Delta t)$$

donde :

$$x_{d,i} = \begin{cases} x_{1,i} & \text{si se trata de un condensador total} \\ Y_{1,i} & \text{si se trata de un condensador parcial} \end{cases} \\ \hat{H}_{d,i} = \begin{cases} \hat{h}_{1,i} & \text{si se trata de un condensador total} \\ \hat{H}_{1,i} & \text{si se trata de un condensador parcial} \end{cases}$$

$$V_2 = L_1 + D$$

3.71

$$\begin{aligned}
 v_{j+1} = & \left\{ \sum_{i=1}^{nc} (v_{j,i} (\hat{H}_{j,i} - \hat{h}_{j,i}) - \ell_{j-1,i} (\hat{h}_{j-1,i} - \hat{h}_{j,i})) - \right. \\
 & \sum_{i=1}^{nc} (v_{j+1,i}^0 (\hat{H}_{j+1,i}^0 - \hat{h}_{j,i}) + \ell_{j-1,i}^0 (\hat{h}_{j-1,i}^0 - \hat{h}_{j,i}) - \\
 & v_{j,i}^0 (\hat{H}_{j,i}^0 - \hat{h}_{j,i}) - \ell_{j,i}^0 (\hat{h}_{j,i}^0 - \hat{h}_{j,i})) + \left( \sum_{i=1}^{nc} u_{j,i}^0 \right. \\
 & \left. (\hat{h}_{j,i} - \hat{h}_{j,i}^0) \right) / \sum_{i=1}^{nc} Y_{j+1,i} (\hat{H}_{j+1,i} - \hat{h}_{j,i}) \\
 & \left. (j=2,3,\dots,n) \right. \quad 3.42
 \end{aligned}$$

$$L_j = v_{j+1} + L_{j-1} - v_j \quad ; \quad (j=2,3,\dots,n-1) \quad 3.43$$

$$\begin{aligned}
 Q_r = & -v_n \sum_{i=1}^{nc} Y_{n,i} (\hat{h}_{n-1,i} - \hat{H}_{n,i}) - o(L_{n-1}^0 \sum_{i=1}^{nc} (\hat{h}_{n-1,i}^0 - \hat{h}_{n-1,i}) \\
 & x_{n-1,i}^0 - v_n \sum_{i=1}^{nc} (\hat{H}_{n,i} - \hat{h}_{n,i}) Y_{n,i} + Q_r^0) + (\bar{U}_n \sum_{i=1}^{nc} (\hat{h}_{n,i} - \\
 & \hat{h}_{n-1,i}) x_{n,i} - U_n^0 \sum_{i=1}^{nc} (\hat{h}_{n,i} - \hat{h}_{n-1,i}) x_{n,i}) / (\phi \Delta t) \quad 3.72
 \end{aligned}$$

Las acumulaciones de líquido en cada plato se consideran constantes a excepción del reboilador. La cantidad de producto que se extrae como destilado de la torre, repetirá en la retención de líquido de la etapa  $n$ , de la manera siguiente :

$$U_n = U_n^0 - D \Delta t \quad 3.73$$

### III.2.4 SOLUCION DEL PROBLEMA DE SIMULACION DE UNA TORRE DE DESTILACION POR LOTE DURANTE SU OPERACION EN EL PERIODO DE PRODUCTO

La simulación de una torre de destilación durante su operación en producto no es más que una extensión del algoritmo de cálculo explicado en la sección III.1.5, donde



una vez alcanzado el estado estacionario, se regresa a la etapa de cálculo 1 ; pero aplicando las secciones III .2.1, III.2.2 y III .2.3 en lugar de las secciones III .1.1, III.1.2 y III .1.4 respectivamente, para las etapas de cálculo 3,4 y 6 .

En este caso el método se detendrá cuando se haya obtenido la cantidad de destilado previamente especificada.

## CAPITULO IV

PROGRAMA DE COMPUTO PARA SIMULAR LA OPERACION DE UNA TORRE DE DESTILACION POR LOTE. PROGRAMA TDBA ( TORRE DE DESTILACION BATCH ).

Para lograr la simulación de una torre de destilación por lote se creó el programa de cómputo TDBA. Este programa se desarrolló en lenguaje Fortran 77 y se implementó en una computadora Sperry Univac de la serie 1100, a través del sistema Conversational Time Sharing (CTS) .

El programa TDBA puede predecir el comportamiento de una torre de destilación por lote, de tipo convencional (como la que se ilustra en la figura 2.1), con un total de hasta 20 platos (incluyendo el condensador y el rehervidor) y 20 componentes.

TDBA permite conocer los flujos totales y parciales de líquido y vapor, las temperaturas de equilibrio, composiciones y la situación de los acumulados líquidos en cada una de las etapas de la torre, así como las cargas térmicas tanto del condensador como del rehervidor durante el tiempo que dure toda la operación de la columna de destilación, indicando además el estado del destilado durante la etapa de producto.

El programa de cómputo requiere de la especificación de los siguientes datos :

- Número de etapas de la torre.
- Número de componentes así como su identificación.
- Cantidad de líquido que puede acumular cada una de las etapas de la torre.
- Carga térmica inicial del rehervidor.
- Temperaturas de ebullición de la mezcla alimentada y de los componentes más ligero y pesado de ésta.

- Composición de la mezcla alimentada.
- Tipo de condensador.
- Cantidad de destilado a obtener (como porcentaje del flujo de vapor que se obtiene del domo).
- Cantidad de mezcla alimentada.
- Presión de operación de la torre.

TDBA cuenta con las siguientes opciones de cálculo:

- Simulación de la torre de destilación por lote durante el período de arranque.
- Simulación, incluyendo el punto anterior más el período de producto con un condensador total.
- Simulación, incluyendo el primer punto más el período de producto con un condensador parcial.

La primer opción es concluida cuando la operación de la columna ha alcanzado el estado estacionario, o se ha completado el tiempo de operación previamente asignado. Las otras dos opciones de cálculo se terminan al obtener una cantidad específica de destilado total extraído de la columna, o cuando se haya agotado el líquido del rehervidor.

Las limitaciones y suposiciones del programa son las mismas que las impuestas al método de cálculo descrito en el capítulo tres.

Para dotar de mayor flexibilidad al programa TDBA, no se ha incluido un método para la determinación de los parámetros termodinámicos, de tal manera que el usuario pueda acoplarle el paquete termodinámico de su preferencia, o incluir a TDBA dentro de algún simulador de proceso. De acuerdo con esto TDBA generará las temperaturas de operación de la torre, pero requerirá que el paquete termodinámico escogido le provea con las constantes de equilibrio  $K$  y las entalpías de vapor y líquido parciales. (TDBA también suministrará la presión de la torre).

#### IV.1 CARACTERISTICAS DEL PROGRAMA

La figura 4.1 muestra la estructura general del programa TDBA .

TDBA está compuesto por un programa principal y 14 subrutinas, distribuidas en las siguientes categorías.

- a.- 4 subrutinas primarias, para el cálculo del modelo matemático. BALMAC, THETA, KAB, BALTOT.
- b.- 2 subrutinas para el ajuste de datos y criterios de convergencia. ASUM y PROS.
- c.- 4 subrutinas para la resolución de métodos numéricos. THOMAS, MN, BROYDE , e INVER.
- d.- 2 subrutinas secundarias o auxiliares de las categorías a y b. MINBT y FUNC.
- e.- 2 subrutinas para la entrada y salida de datos. LECTU e IMPRE.

a.1 Subrutina Balmac. (figura 4.2) tiene como objetivo la resolución de los balances de masa por componente a través del método implícito del doble punto tanto para arranque como para producto. Durante este proceso se genera un sistema de ecuaciones que forma una matriz tridiagonal la cual debe ser resuelta por medio de la subrutina Thomas.

a.2 Subrutina Theta. (figura 4.3) se encarga de encontrar los multiplicadores  $\theta$  que cumplen con las especificaciones de la torre en cualquiera de sus dos períodos de operación, corrige los valores de las retenciones parciales de líquido en cada plato así como las composiciones de las mismas. Para solucionar el sistema de ecuaciones no lineales requerido para encontrar las  $\theta$ 's utiliza a la subrutina Broyde .

a.3 Subrutina KAB. (figura 4.4) obtiene los valores de las temperaturas de equilibrio en cada etapa de la torre por medio del método Kb, y de acuerdo con los datos de las

composiciones líquidas encontrados por Theta. Las temperaturas las evalúa gracias al método numérico contenido en la subrutina MN, una vez que ha determinado la constante de equilibrio K para el componente base.

a.4 Subrutina Baltot (figura 4.5) determina los valores de los flujos totales de vapor y líquido en la torre por medio del método de la composición constante en base a los balances de entalpía y de masa totales en la columna, para cada plato. En caso de la simulación del período de arranque calcula la carga térmica del condensador total. Mientras que para la simulación del período de producto obtiene las cargas térmicas del condensador (total o parcial) y del rehevridor.

b.1 Subrutina Acum.(figura 4.6) asigna los valores iniciales de cada período de tiempo de los flujos parciales de vapor y líquido, volatilidades, constantes de equilibrio, composiciones, cargas térmicas, acumulados líquidos parciales, entalpías parciales de líquido y vapor, y de los flujos totales vapor y líquido, en base a los valores obtenidos en el período de tiempo anterior. También asume los valores de los flujos de vapor y líquido al final del período de tiempo en cuestión, con los cuales iniciará las iteraciones. Determina el valor del tamaño del período de tiempo que se va a emplear, y en el caso de estar en el período de producto, evalúa el valor del líquido que aún se encuentra en el rehevridor. Para obtener el primer estimado de los flujos de líquido en cada etapa emplea a la subrutina Minbt.

b.2 Subrutina Pros. (figura 4.7) determina los criterios de convergencia para cada período que concluye y cada período de operación. Durante el período de producto fija los valores de destilado, y los flujos de vapor en los platos

1 y 2 así como la cantidad de reflujo a la torre. Evalúa los valores de las volatilidades correspondientes al final del período analizado para cada plato. Activa a la subrutina de impresión de datos Impre.

c.1 Subrutina Thomas permite resolver sistemas de ecuaciones lineales los cuales tienen la forma de una matriz tridiana, por medio del método Thomas.

c.2 Subrutina Mn. emplea el método de Newton Raphson modificado para solucionar ecuaciones algebraicas no lineales sin necesidad de utilizar la derivada analítica de la función a tratar.

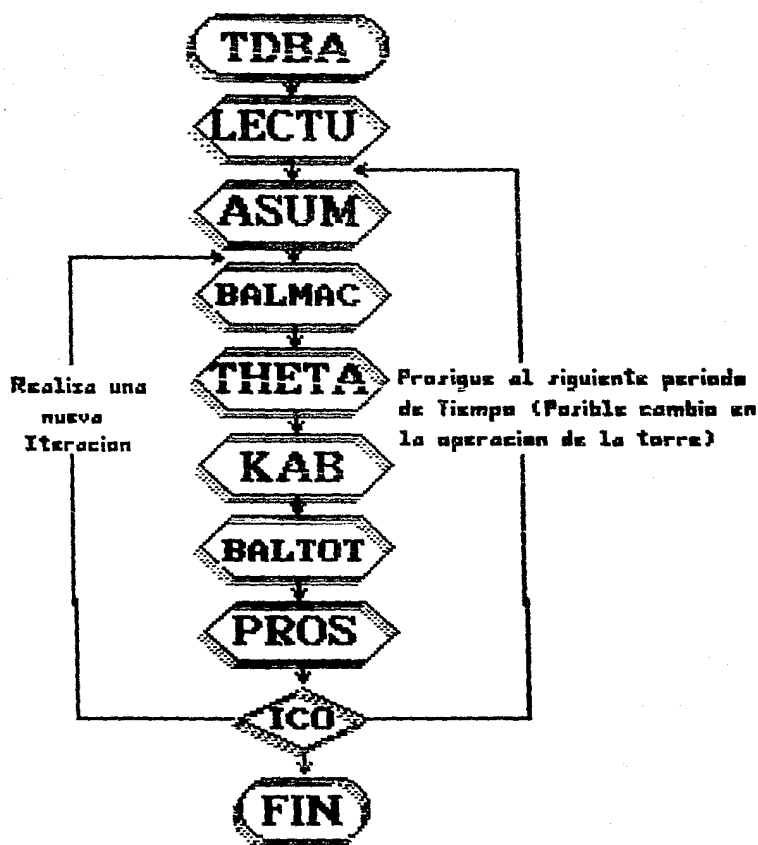
c.3 Subrutina Broyde. utiliza el método de Broyden para resolver sistemas de ecuaciones no lineales.

c.4 Subrutina Inver. es empleada por la subrutina Broyde para invertir la matriz del jacobiano y utilizarla como primer estimado de la función a resolver.

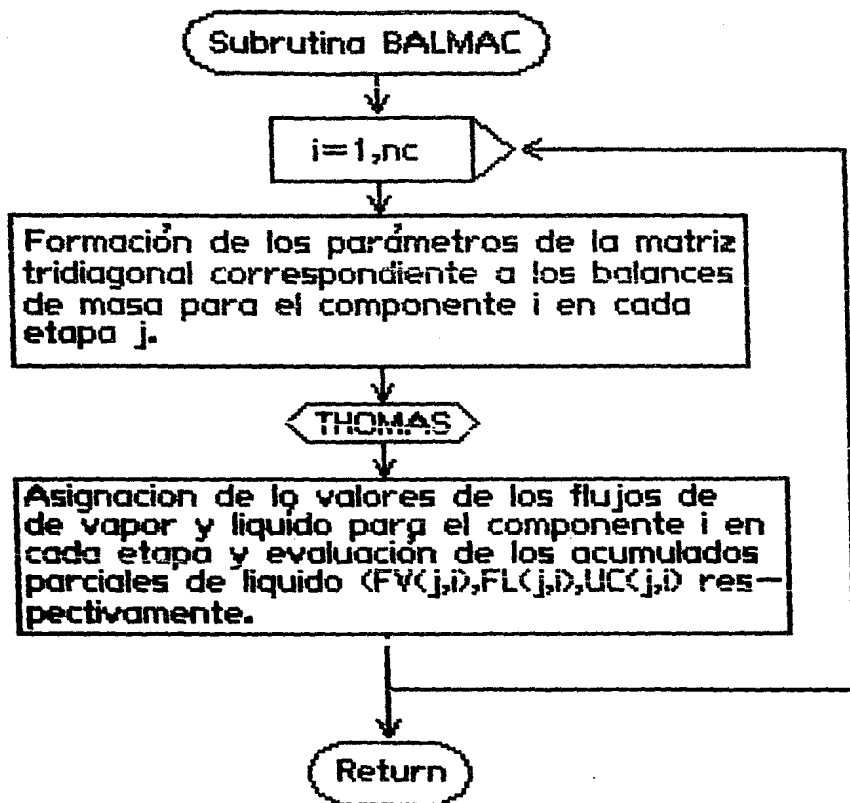
d.1 Subrutina Minbt. (figura 4.8) determina los valores del primer estimado de los flujos totales de líquido en la columna, de acuerdo a los valores de los flujos totales de vapor generados por la subrutina Asum, gracias al empleo de las relaciones obtenidas al realizar los balances de masa en la torre.

d.2 Subrutina Func. (figura 4.9) es una subrutina de apoyo al método Broyden, y en este caso realiza la evaluación de las funciones  $g_j(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \dots, \theta_n)$ , necesaria para el método Theta.

e.1 Subrutina Lectu. en esta se lleva a cabo la alimentación de los datos de la columna a simular.

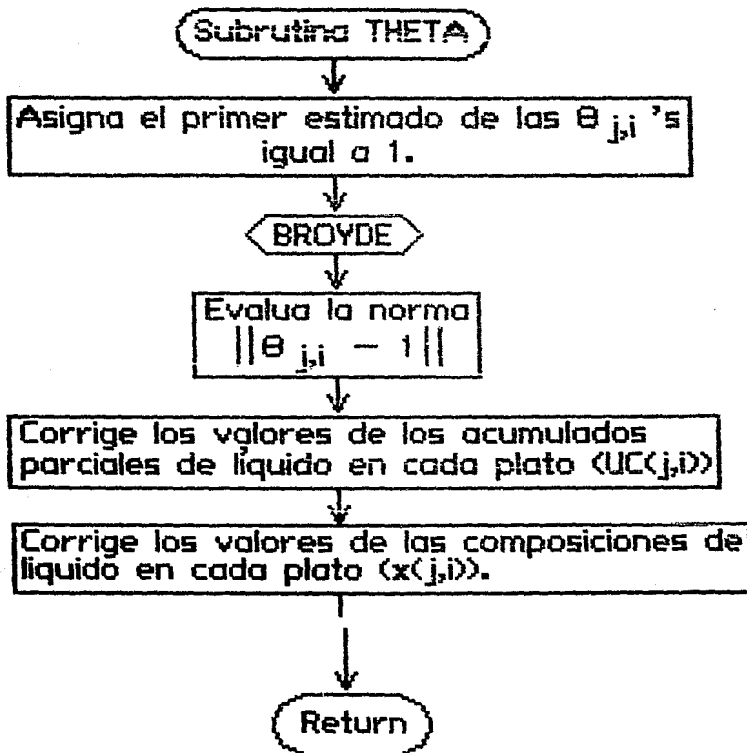


**Fig.4.1 Estructura general del programa TDBA**

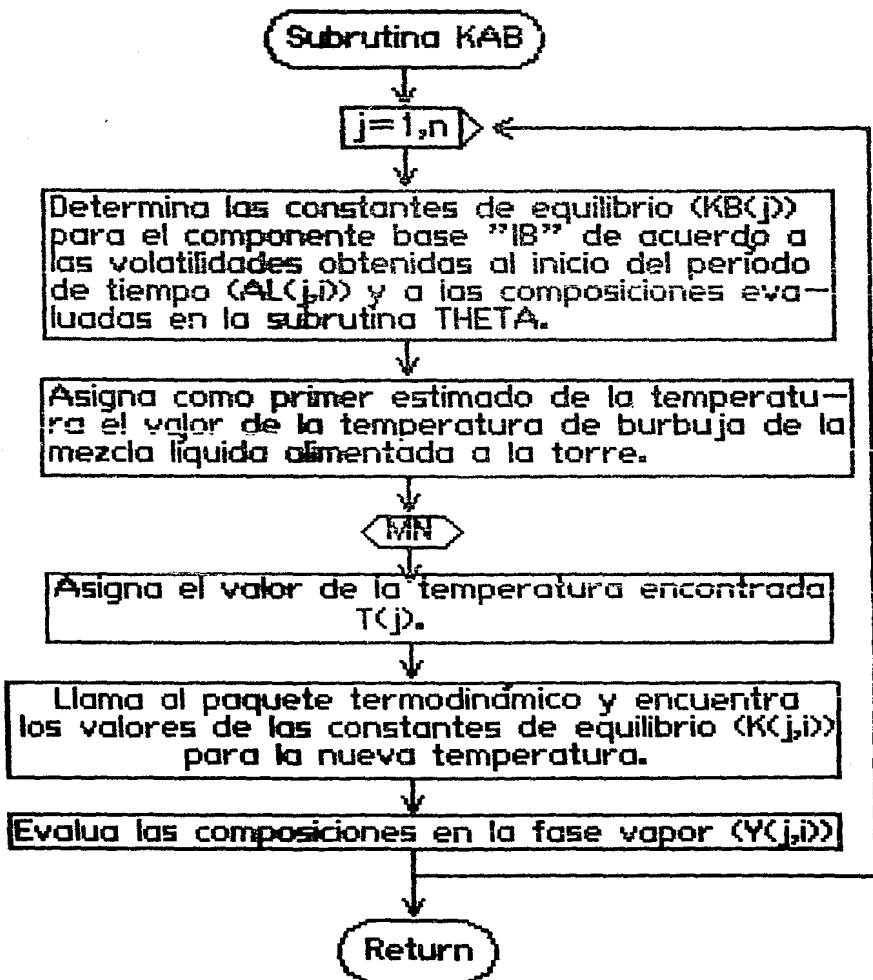


**Figura 4.2 Subrutina BALMAC.**





**Figura 4.3 Subrutina THETA.**



**Figura 4.4 Subrutina KAB.**

## Subrutina BALTOT

Llama al paquete termodinámico y determina las entalpías parciales de vapor y líquido ( $HV(j,i)$  y  $HL(j,i)$ ) correspondientes a las temperaturas evaluadas en KAB.

Modo de operación  
ID

Producto

Arranque

Evalua la carga térmica del Condensador (parcial o total)  $Q_c$ .

Evalua la carga térmica del Condensador total  $Q_c$ .

Evalua el flujo del vapor en el plato 2 ( $V(2)$ ).

Determinar los flujos totales de líquido y vapor en cada etapa ( $L(j)$  y  $V(j)$ ).

Producto

Modo de operación  
ID

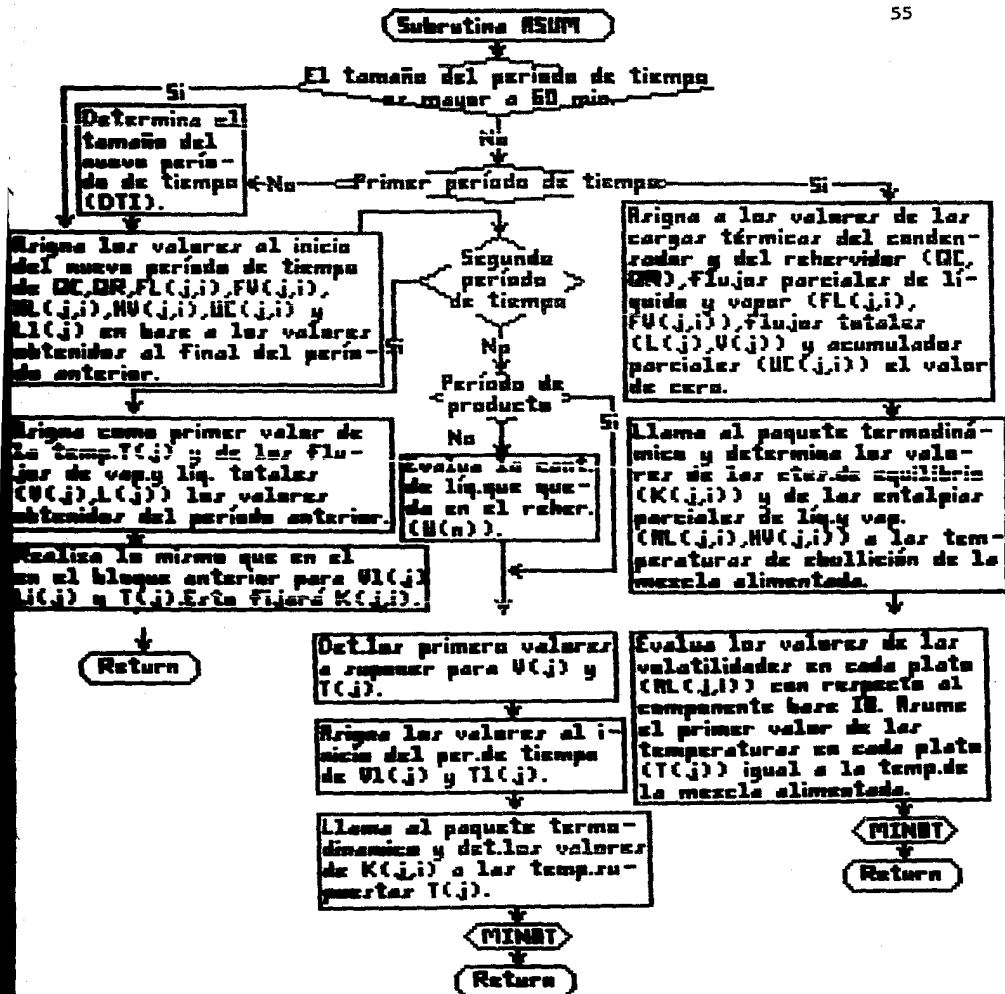
Arranque

Evalua la carga térmica del Rehervidor  $Q_R$ .

Corrige los valores de los flujos parciales de líquido y vapor ( $FL(j,i)$  y  $FV(j,i)$  respectivamente).

Return

Figura 4.5 Subrutina BALTOT.



**Figura 4.6 Subrutina ASUM.**

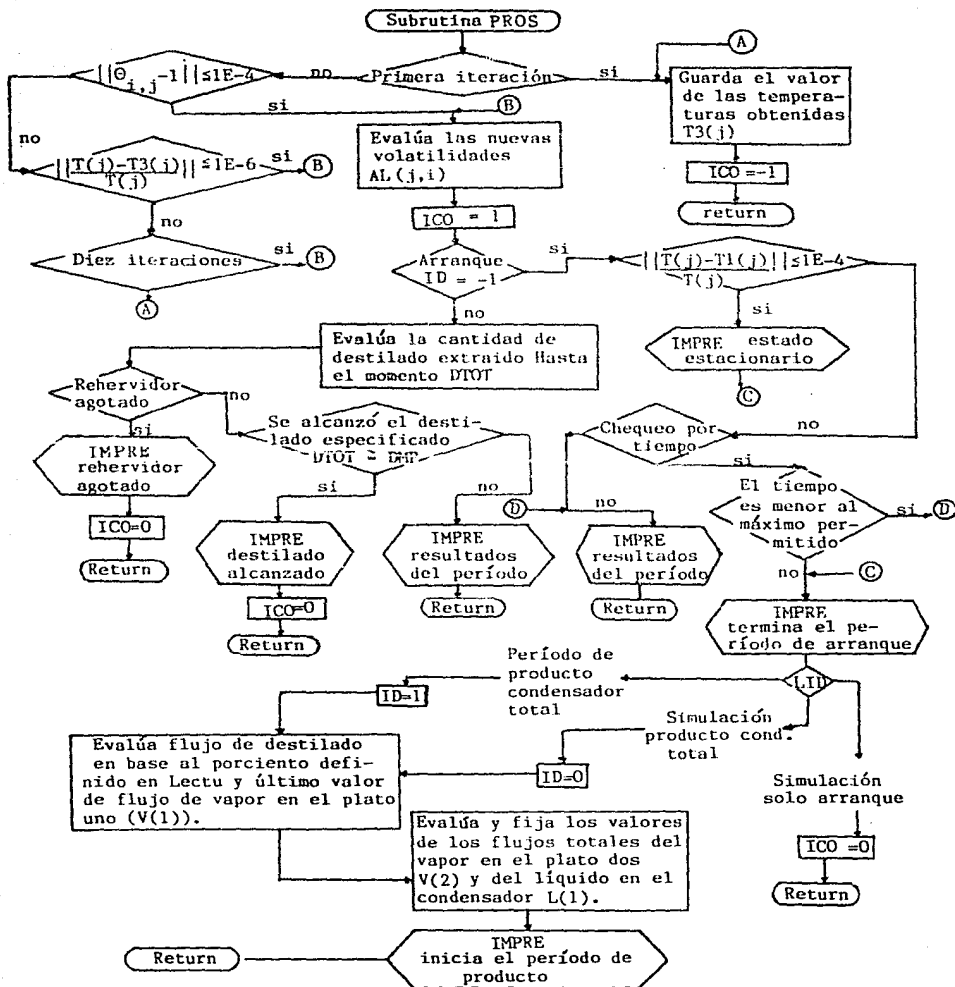
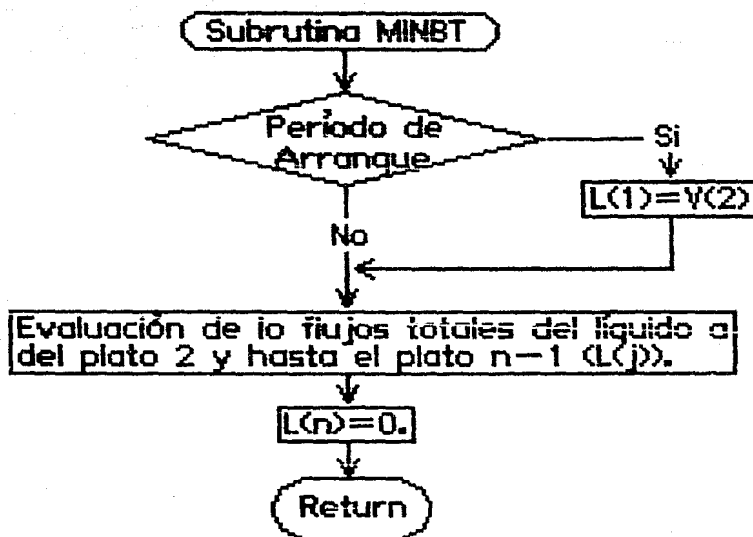
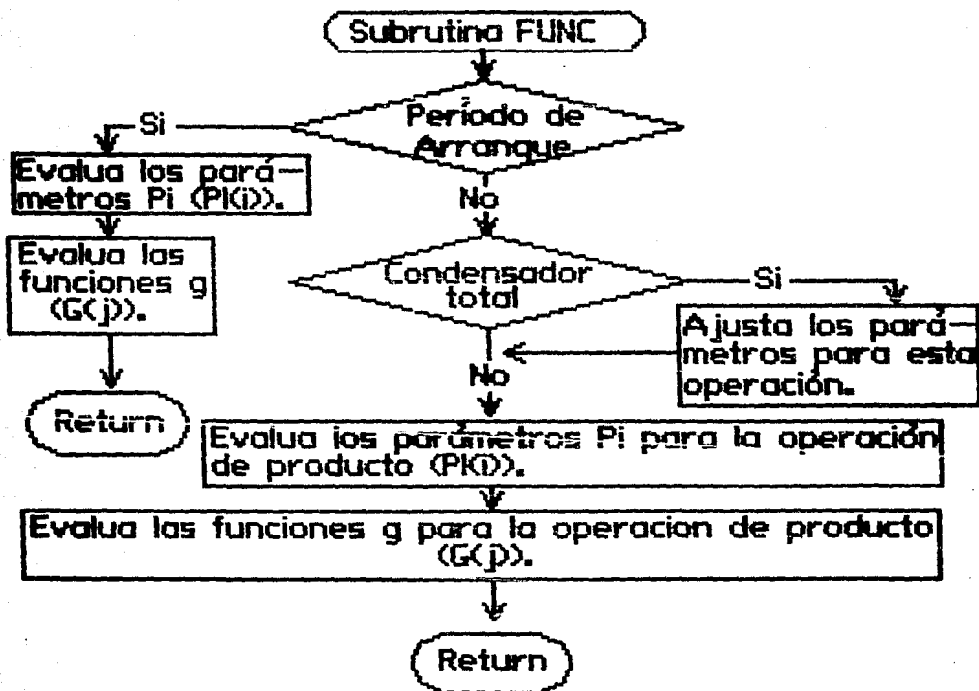


Figura 4.7 Subrutina PROS



**Figura 4.8 Subrutina MINBT.**



**Figura 4.9 Subrutina FUNC.**

e.2 Subrutina Impre. realiza la impresión de los resultados obtenidos por el programa, indicando cuando termina cada período de operación y la razón .

#### IV.1.1 DESCRIPCION DE LA ALIMENTACION DE DATOS AL PROGRAMA

Como ya se mencionó, la lactura de los datos requeridos por el programa TDBA se realiza através de la subrutina Lectu. Las variables se alimentan en formato libre, separando los datos de cada tarjeta por medio de comas. Las variables de tipo real deberán incluir un punto decimal, mientras que las que sean de tipo entero se escribirán sin el punto.

Los datos de alimentación al programa TDBA están divididos en cuatro bloques de tarjetas.

##### -Bloque 1.

	Tarjeta	Variables		
	1	UF, QR, P, PD		
	2	DTI, PHI, N, NC		
	3	IC, IB, LID, IM		
	4	TMP, DMP		
Variable	Descripción	Tipo	Unidades	
UF	Cantidad total de líquido alimentado a la torre.	Real	Moles	
QR	Carga térmica de arranque del rehervidor de la torre.	Real	Energ/Tiempo	
P	Presión de operación de la torre.	Real	Fuerza/Area	
PD	Fracción del flujo de vapor del domo que se extraerá como destilado.	Real	-	
DTI	Diferencia inicial de tiempo $t_c$ , con la cual comenzará los cálculos del programa.	Real	Tiempo	



Variable	Descripción	Tipo	Unidades
PHI	Parámetro de ajuste $\phi$ del método implícito de doble punto	Real	-
N	Número de platos o etapas teóricas de la torre, incluyendo el rehervidor y el condensador.	Entera	-
NC	Número de componentes de la mezcla alimentada.	Entera	-
IC	Variable que permite seleccionar el criterio de terminación del período de arranque. Si IC=1 el programa se detendrá cuando se alcance un cierto tiempo de operación especificado por la variable TMP, o cuando se alcance el estado estacionario. Si IC=0 el programa sólo se detendrá cuando se alcance el estado estacionario.	Entera	-
IB	Número asignado al componente base (compuesto cuyo punto de ebullición es intermedio en la mezcla o ligeramente superior.)	Entera	-
LID	Variable que permite seleccionar cualquiera de los tres modos de operación del programa. LID=-1, Simulación del período de arranque. LID=0, Simulación del período de arranque y del período de producto, empleando un condensador parcial. LID=1, Igual al anterior pero empleando un condensador total.	Entera	-
IM	Variable que selecciona los modos de impresión del programa. IM=1, Imprime los resultados de	Entera	-

Variable	Descripción	Tipo	Unidades
	todos los platos incluyendo el condensador y el rehervidor. IM=0, Imprime los resultados sólo de la primer etapa y el del rehervidor.		
TMP	Tiempo Máximo de operación en el período de arranque. Si IC=0, TMP deberá ser igual a cero.	Real	Tiempo
DMP	Cantidad máxima de destilado que se requiere extraer de la torre, durante el período de producto.	Real	Moles

## -Bloque 2.

Tarjeta                      Variables

1-N                      U(j), V(J)

Se debe alimentar una tarjeta por cada plato de la torre incluyendo al condensador y al rehervidor.

Variable	Descripción	Tipo	Unidades
U(J)	Cantidad de líquido que se acumula en cada plato.	Real	Moles
V(J)	Flujo de vapor supuesto en cada plato, para iniciar la primer iteración del método de simulación.	Real	Moles/Tiempo

## -Bloque 3.

Tarjeta                      Variables

1-NC                      IX(I), AN(I)

Se debe alimentar una tarjeta por cada componente de la mezcla alimentada a la torre.

Variable	Descripción	Tipo	Unidades
IX(I)	Composición líquida del componente I en la mezcla de alimentación.	Real	-
AN(I)	Nombre del componente I en la mezcla de alimentación. El nombre se escribe entre comillas empleando hasta 11 caracteres alfanuméricos.	Alfanum.	

## Bloque 4.

Variable	Tarjeta	Variable	Tipo	Unidades
	1	TE(1),TE(2),TE(3)		
TE(1)		Descripción Temperatura de ebullición del componente más ligero de la mezcla alimentada, a la presión de operación de la torre.	Real	F
TE(2)		Descripción Temperatura de ebullición de la mezcla alimentada, a la presión de la torre.	Real	F
TE(3)		Descripción Temperatura de ebullición del componente más pesado de la mezcla alimentada, a la presión de operación de la torre.	Real	F

En la tabla IV.1 y IV.2 se muestra un ejemplo de los datos alimentados al programa.

Componente	Flujo de alimentación (lbmol)	Composición de alimentación	Etapas	Acumulados (lbmol)
1 Propano	9.5	0.5	1(condensador)	4.0
2 Isobutano	9.5	0.5	2	1.0
Total	19.0		3	1.0
			4(rehervidor)	13.0
			Total	19.0

QR(BTU/hr) = 72,000.0

Presión op. = 300.0 psia

Condensador tipo = total

No. platos = 2

1 rehervidor

T<sub>alim.mezc.</sub> = 169.508 F

T<sub>eb.</sub> | p.op propano = 125 F

T<sub>eb.</sub> | p.op isobutano = 214.23 F

$\Delta t_{inicial}$  = 0.1 min.

$\phi_{sel.}$  = 0.6

opción para arranque = edo. estac.

opción simulación = arranque, producto

opción impresión datos = parcial.

destilado máximo a extraer = 7.0 lbmol

Componente clave = isobutano  
%destilado a extraer = 20%

Tabla IV.1 Ejemplo de datos para alimentación

DATOS DE PROGRAMA PARA EJEMPLO BINARIO	
10	19.,1200.,300.,0.2
12	0.1,0.6,4.2
13	0.2,1.0
14	0.00,7.
20	4.,0.0
30	1.,0.62
40	1.,0.62
60	13.,10.
70	.5,*PROPANO*
80	.5,*ISOBUTANO*
90	125.,169.508,214.23

Tabla IV.2 Ejemplo de la alimentación de datos.

#### IV.1.2 DESCRIPCIÓN DE LA SALIDA DE RESULTADOS DEL PROGRAMA

La impresión de los resultados generados por TDBA se presenta en cuatro diferentes tipos de reportes de salida.

-Reporte 1. Página de Presentación y Encabezado Principal. La tabla IV.3 muestra un ejemplo de este tipo de salida. La hoja muestra los datos alimentados al programa, especificaciones, valores supuestos, etc. Además, imprime el encabezado principal del programa.

-Reporte 2. Encabezado Secundario.

La tabla IV.4 muestra los distintos tipos de encabezados secundarios generados por TDBA. Esta hoja permite conocer al usuario a que tipo de operación corresponden los resultados del programa durante la simulación.

-Reporte 3. Resultado de la Simulación en cada Período de Tiempo.

La tabla IV.5 Muestra un ejemplo de este tipo de impresión. La hoja se divide en cuatro partes. La primera indica el tiempo transcurrido de operación de la torre durante la simulación, y las cargas térmicas de la torre. La segunda muestra el plato al cual corresponden los resultados, su temperatura de equilibrio, tipo de condensador de la torre y cantidad de destilado extraído en ese período de tiempo. La tercera parte corresponde a los flujos de líquido y vapor en la torre, así como las composiciones, para cada componente en el plato correspondiente. La última parte imprime las constantes de equilibrio  $K$ , las volatilidades y las entalpías parciales del líquido y el vapor, para cada componente, en el plato correspondiente. Durante el período de producto, los resultados de la fase vapor del primer plato, corresponden a los valores de los datos del destilado extraído de la torre.

-Reporte 4. Encabezado de Terminación del Programa.

La tabla IV.6 muestra los distintos tipos de encabezados de terminación del programa, para los dos períodos de operación de la torre.

.....

: TORRE DE DESTILACION POR LOTE :

: SIMULACION :

.....

: ELAB. POR : MAPCO ANTONIO RUIZ G. ; VICTOR MANUEL CORONA S. :

.....

: LUGAR : ENEP ZARAGOZA UNAH. MEXICO, D.F., FECHA: 1987 :

.....

: DATOS PARA SIMULACION : ALIMENTACION A LA TORRE :

.....

: TERMICOS :

: TEMPERATURA T : 269.1450 :

: CAPGA DEL REHEVIDOR BTU/MIN: 5833.3330 :

: FLUJO :

: ALIMENTACION TOTAL LB/MIN : 50.0000 :

: NUMERO DE COMPUESTOS : 5 :

: RETENCION POR PLATO LB : 1.0000 :

: RETENC.DEL REHEVIDOR LB : 34.0000 :

: RETENC.DEL CONDENSAD. LB : 4.0000 :

: NC. COMPOSICION :

: COMP. NOMBRE ALIMENTACION :

: 1 PROPANO .0500 :

: 2 ISOBUTANO .1500 :

: 3 BUTANO .2500 :

: 4 ISOPENTANO .2000 :

: 5 PENTANO .3500 :

: PROCESO :

: NO.PLATOS : 14 DIF-TIEMPO: .100 PRES.PSIA : 300.000 :

.....

TablaIV.3 Pagina de Presentación y Encabezado Principal.

.....  
:                    RESULTADO DEL PERIODO DE ARRANQUE  
: .....

.....  
:                    RESULTADO DEL PERIODO DE PRODUCTO  
: .....

TablaIV.4 Presentación de Encabezado Secundario.



```

: : : : :
: TIEMPO TRANSCURRIDO MINUTOS: 39.1121 :
: CARGA DEL REHEVADOR BTU/MIN: 5835.3330 :
: CARGA DEL CONDENSADOR BTU/MIN: 5456.5283 :
: : : : :
: PLATO NO. : 1 CONDENSADOR TOTAL :
: TEMP. F : 167.5989 DEST.(LBMOL) = .0000 :
: : : : :
: COMPOSICIONES FLUJOS Y RETENCIONES :
: NO.COMP. X(I) Y(I) L(I) V(I) U(I) :
: 1 .365 .000 .3216 .0000 1.4616 :
: 2 .343 .000 .3021 .0000 1.3733 :
: 3 .267 .000 .2351 .0000 1.0684 :
: 4 .013 .000 .0114 .0000 .0520 :
: 5 .011 .000 .0098 .0000 .0447 :
: TOTALES X= 1.000 Y= .000 L= .8801 V= .0000 U= 4.0000 :
: : : : :
: DATOS TERMODINAMICOS :
: NO.COMP. K(I) ALFA HL(I) HV(I) :
: 1 1.5183 2.4312 10313.6819 14966.0687 :
: 2 .7978 1.2775 12159.6466 18227.4751 :
: 3 .6245 1.0000 12649.9521 19451.1880 :
: 4 .3111 .4982 14457.1338 23337.2656 :
: 5 .2594 .4153 14919.8829 24279.7546 :
: : : : :

```

Tabla IV.5 Presentación de Resultados para cada Período de Tiempo.

```

: : : : :
: RESULTADO DEL PERIODO DE ARRANQUE :
: SIMULACION TERMINADA :
: SE ALCANZO EL ESTADO ESTACIONARIO :
: : : : :

```

```

: : : : :
: RESULTADO DEL PERIODO DE ARRANQUE :
: SIMULACION TERMINADA :
: LIMITE DEL TIEMPO DE PROCESO EXCEDIDO :
: TIEMPO TRANSCURRIDO MINUTOS: 20.0000 :
: : : : :

```

```

: : : : :
: RESULTADO DEL PERIODO DE PRODUCTO :
: SIMULACION TERMINADA :
: PRODUCCION DE DESTILADO ALCANZADA :
: DESTIL. LB: .0000 :
: : : : :

```

```

: : : : :
: RESULTADO DEL PERIODO DE PRODUCTO :
: SIMULACION TERMINADA :
: CARGA DEL REHARVIDOR AGOTADA :
: TIEMPO TRANSCURRIDO MINUTOS: 20.0000 :
: : : : :

```

Tabla IV.6 Diagnostico de Terminación de la Corrida.

## ANALISIS DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Para demostrar el funcionamiento del programa TDBA, este se probó con un problema presentado por Holland y Liapis. La tabla V .1 muestra el planteamiento de este ejemplo.

Componente	Cantidad alimen.lbmol	Composición de alimen.	Etapa	Acumulación (lbmol)
1 Propano	2.5	0.05	1(cond.)	4.0
2 Isobutano	7.5	0.15	2	1.0
3 N-Butano	12.5	0.25	3	1.0
4 Isopentano	10.0	0.2	4	1.0
5 N-pentano	<u>17.5</u>	0.35	5	1.0
Total	50.0		6	1.0
			7	1.0
QR inicial = 350,000 BTU/hr			8	1.0
Presión de Op. = 300 Psia			9	1.0
No. platos = 12			10	1.0
Condensador tipo = total			11	1.0
1 rehervidor			12	1.0
Temp.alim. = 269.145 F			13	1.0
Teb p.op. Propano = 125 F			14(reherv.)	<u>34.0</u>
				Total 50.0

Teb p.op. N-Pentano = 342 F

Componente clave = N-Butano

% destilado a extraer = 20% (relación de reflujo 5)

$\Delta t_{inicial}$  = 0.1 min. opción paro arranque = por tiempo máximo 3hrs

$\Phi$ seleccionado = 0.6 opción simulación = arranque, producto

Destilado maximo = 20 lbmol a extraer opción de impresión datos = parcial

Tabla V .1 Planteamiento del problema.

Los valores de las constantes  $K$  y de las entalpías se calcularon por medio de relaciones polinomiales dependientes de la temperatura para la presión de operación, reportada por Holland y Liapis.<sup>17</sup>

La tabla V .2 muestra la hoja de alimentación de datos al programa.

Los resultados obtenidos por la simulación del programa TDBA se encuentran reportados en el apéndice A.6. Las figuras V .1 ,V .2, y V .3 corresponden a las composiciones de los períodos de arranque y de producto.

Los datos reportados por TDBA son idénticos a los valores dados por Holland y Liapis<sup>17</sup> tanto para el período de arranque como para el de producto.

Los resultados calculados muestran la eficacia del programa de cómputo para simular una torre de destilación por lote a través del método implícito del doble punto y del método Theta.

Aunque hasta el momento el programa TDBA está limitado a la simulación de una torre de destilación por lote convencional, se podría ampliar al caso de torres más complejas modificando los balances y los parámetros theta correspondientes. De igual forma podría modificarse para simular una torre de destilación continua.(Holland y Liapis).<sup>17</sup>

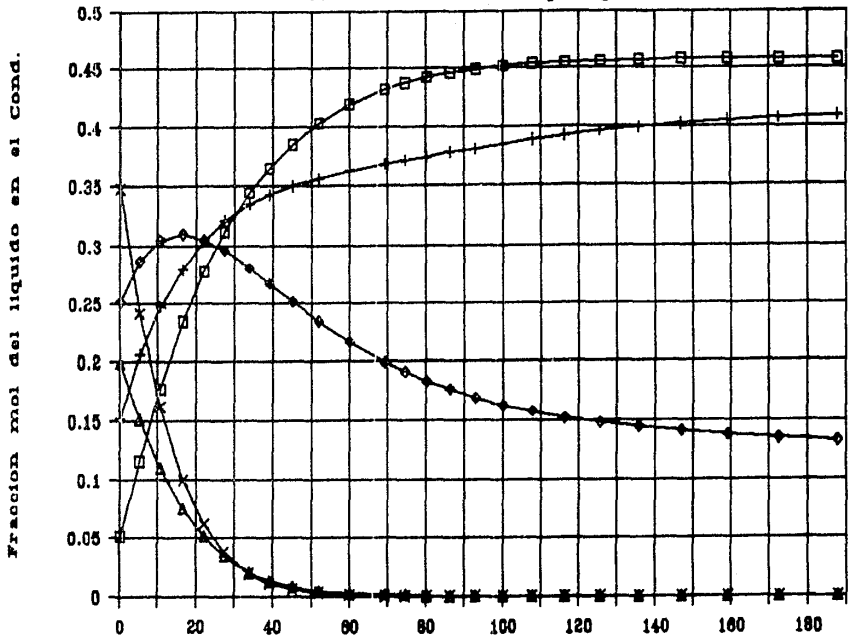
DATOS PARA EL PROGRAMA, TDBA. EJEMPLO, HOLLAND, . . . . .

10	50.	58	33.333	300.	0.2
11	0.	1.	0.6	14.	5
12	1.	3.	0.	0	
13	180.	20.			
20	4.	0.	0		
30	1.	0.	0.67		
40	1.	0.	0.67		
50	1.	0.	0.67		
60	1.	0.	0.67		
70	1.	0.	0.67		
80	1.	0.	0.67		
90	1.	0.	0.67		
100	1.	0.	0.67		
110	1.	0.	0.67		
120	1.	0.	0.67		
130	1.	0.	0.67		
140	1.	0.	0.67		
150	34.	23.			
160	.05.		*PROPANO*		
170	.15.		*ISOBUTANO*		
180	.25.		*BUTANO*		
190	.2.		*ISOPENTANO*		
200	.35.		*PENTANO*		
210	125.	269.	145.	342.	

Tabla V .2 Datos alimentados al programa TDBA.

# Grafica V.1 Cond.durante el arranque

Fraccion. mol contra Tiempo.Prog.TDBA



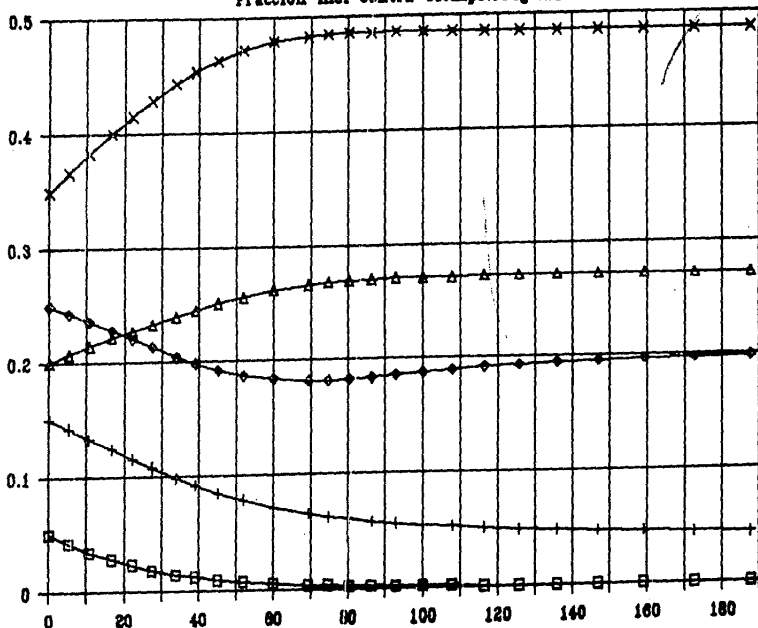
C3H8     
  iC4H10     
  C4H10     
  iC5H12     
  C5H12

Ejemplo de la Tabla V.1 Tiempo (min)

## Grafica V.2 Rehev.durante el arranque

Fraccion mol contra Tiempo.Prog.TDBA

Fraccion mol del liquido en el Rehev.



□ C2H6

+ 1C4H10

Ejemplo de la Tabla V.1

◇ C4H10

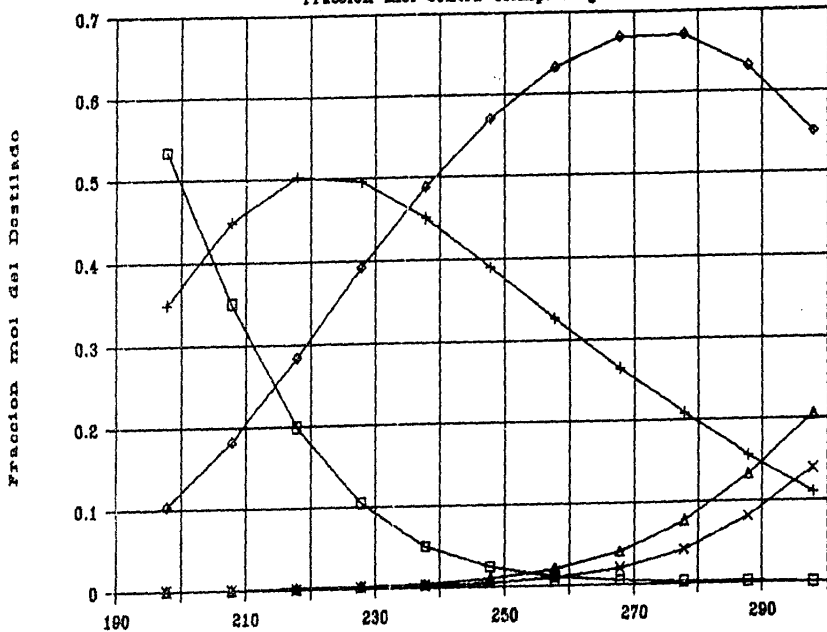
△ 1C5H12

× C5H12

Tiempo (min)

# Grafica V.3 Dest. durante el producto

Fraccion mol contra Tiempo.Prog.TDBA



Ejemplo de la Tabla V.1 Tiempo (min)

□ C3H8

+ iC4H10

◇ C4H10

△ iC5H12

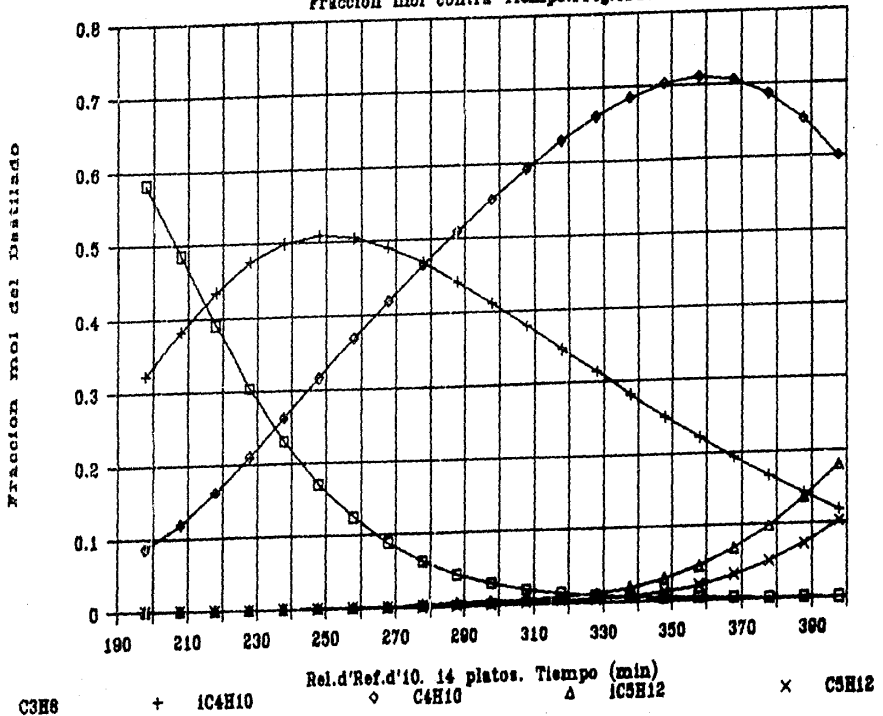
× C5H12



Dentro de las aplicaciones más importantes del programa TDBA, tenemos su empleo en el análisis del comportamiento de las torres de destilación por lote respecto al cambio en sus relaciones de reflujo (figuras V.4, V.5), variación en el número de etapas de separación de las columnas (fig.V.6) o el estudio de diferentes mezclas a separar para geometrías definidas. Esto permite la comparación entre distintas configuraciones y condiciones de operación de las columnas, permitiendo la elección del sistema más adecuado, sin necesidad de operar los equipos en campo.

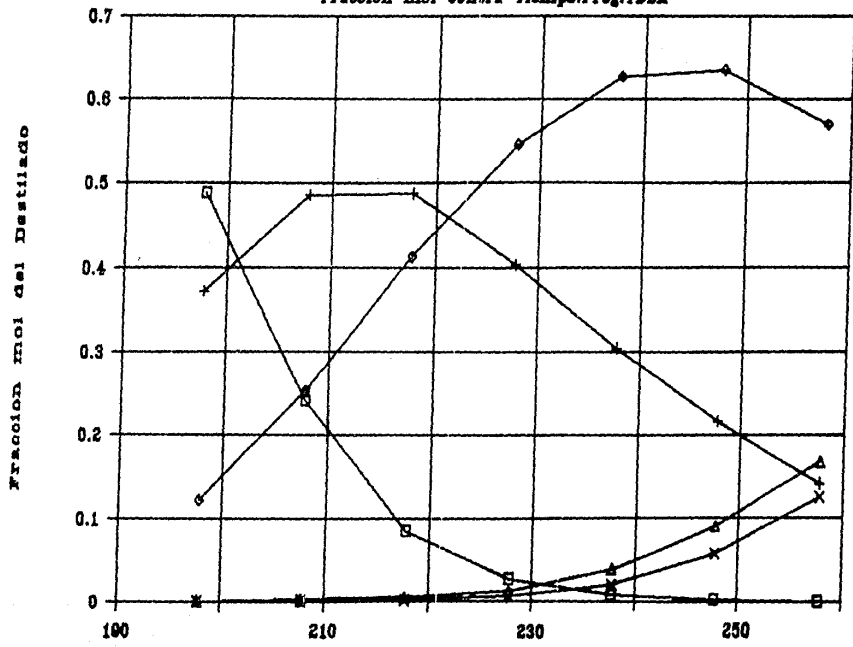
También se le puede usar en la determinación de los tiempos de operación en la etapa de arranque. Lo cual es necesario para poder obtener el mejor grado de separación en la etapa de producto sin la necesidad de requerir de tiempos de operación muy largos en la etapa previa, lo cual incrementaría los costos, o en el caso contrario, que se tengan tiempos de arranque tan largos que no permita cumplir con las especificaciones del destilado.

Grafica V.4 Dest.durante el producto  
 Fraccion mol contra Tiempo.Prog.TDBA



### Grafica V.5 Dest.durante el producto

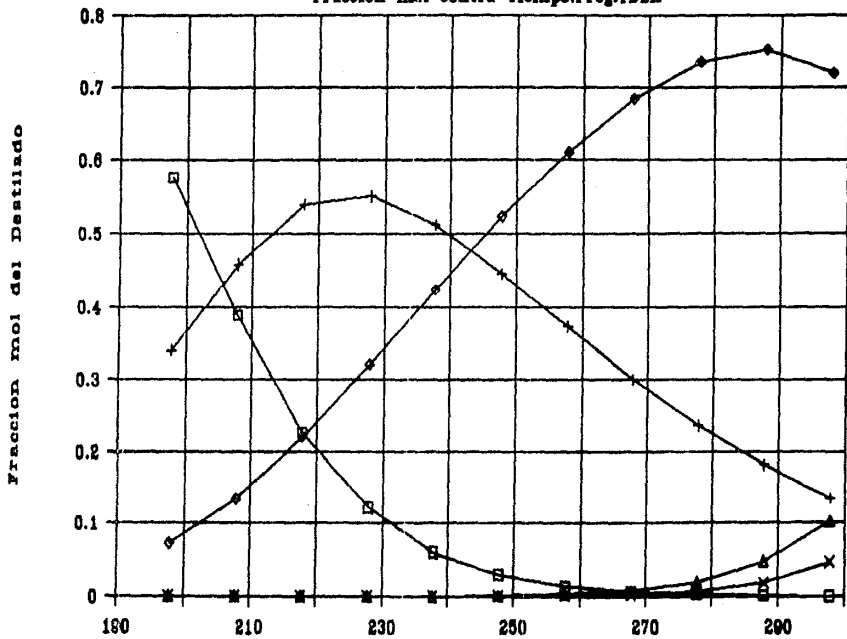
Fraccion mol contra Tiempo.Prog.TDBA



□ C3H8      + IC4H10      ◇ C4H10      △ IC5H12      × C5H12  
 Rel.d'Ref.d'3.3 14 platos. Tiempo (min)

# Grafica V.6 Dest. durante el producto

Fraccion mol contra Tiempo.Prog.TDBA



□ C3H6

+ 1C4H10

◇ C4H10

△ 1C5H12

× C5H12

Rel.d'Ref.d'5. 20 platos. Tiempo (min)

## A P E N D I C E S

## A.1 DETERMINACION DE LOS BALANCES DE MASA POR COMPONENTE

### A.1.1 ARRANQUE

Balance de masa para cada componente  $i$  en el condensador

$$\int_{t_n}^{t_n+\Delta t} (v_{2,i} - x_{1,i}) dt = (u_{1,i}^U + u_{1,i}^L) |_{t_n+\Delta t} - (u_{1,i}^U + u_{1,i}^L) |_{t_n} \quad A.1.1$$

Resolviendo la integral por el método implícito del doble punto y despreciando  $u_{1,i}^U$ :

$$v_{2,i} - x_{1,i} + \sigma(v_{2,i}^0 - x_{1,i}^0) = (u_{1,i} - u_{1,i}^0) / (\phi \Delta t) \quad A.1.2$$

sustituyendo la ecuación 4.7 en A.1.2

$$v_{2,i} - x_{1,i} - (x_{1,i}^U) / (\tau_1 \phi \Delta t) = -\sigma(v_{2,i}^0 - x_{1,i}^0) - u_{1,i}^0 / (\phi \Delta t) \quad A.1.3$$

si definimos:

$$\rho_{1,i} = 1 + \tau_1 \quad A.1.4$$

Donde  $\tau_1$  está definida por la ecuación 4.10, tendremos que A.1.3 queda como:

$$-\rho_{1,i} x_{1,i} + v_{2,i} = -\sigma(v_{2,i}^0 - x_{1,i}^0) - u_{1,i}^0 / (\phi \Delta t) \quad A.1.5$$

Balance de masa para cada componente  $i$  en el rehervidor.

$$\int_{t_n}^{t_n+\Delta t} (x_{n-1,i} - v_{n,i}) dt = (u_{n,i}^U + u_{n,i}^L) |_{t_n+\Delta t} - (u_{n,i}^U + u_{n,i}^L) |_{t_n} \quad A.1.6$$

Resolviendo en forma similar a la ecuación A.1.2:

$$x_{n-1,i} - v_{n,i} + \sigma(x_{n-1,i}^0 - v_{n,i}^0) = (u_{n,i} - u_{n,i}^0) / (\phi \Delta t) \quad A.1.6$$

si

$$u_{n,i} = U_n x_{n,i} \quad A.1.7$$

$$x_{n,i} = Y_{n,i} / K_{n,i} \quad \text{A.1.8}$$

$$Y_{n,i} = v_{n,i} / V_n \quad \text{A.1.9}$$

entonces

$$u_{n,i} = (v_{n,i} U_n) / (V_n K_{n,i}) \quad \text{A.1.10}$$

y si definimos :

$$\rho_{n,i} = 1 + (U_n / V_n) / (K_{n,i} \phi \Delta t) \quad \text{A.1.11}$$

sustituyendo 3.5 ,A.1.10 y aplicamos la definición A.1.11 a A.1.6 se obtiene :

$$A_{n-1,i} v_{n-1,i} - \rho_{n,i} v_{n,i} = -\sigma (\ell_{n-1,i}^0 - v_{n,i}^0) - u_{n,i}^0 / (\phi \Delta t) \quad \text{A.1.12}$$

A.1.2

Balace de masa para el componente i en el condensador :

$$\int_{t_n}^{t_n + \Delta t} (v_{2,i} - \ell_{1,i} - d_i) dt = (u_{1,i}^U + u_{1,i}^L) |_{t_n + \Delta t} - (u_{1,i}^U - u_{1,i}^L) |_{t_n} \quad \text{A.1.13}$$

resolviendo en forma similar a A.1.1

$$v_{2,i} - \ell_{1,i} - d_i + \sigma (v_{2,i}^0 - \ell_{1,i}^0 - d_i^0) = (u_{1,i}^U - u_{1,i}^L) / (\phi \Delta t) \quad \text{A.1.14}$$

a. CONDENSADOR PARCIAL

b. CONDENSADOR TOTAL

De la ecuación 3.6

$$\ell_{1,i} = v_{1,i} A_{1,i} \quad \text{A.1.15a}$$

$$\ell_{1,i} = d_i A_{d,i} \quad \text{A.1.15b}$$

donde :

$$A_{1,i}^0 = (L_1 / V_1) / K_{1,i}$$

$$A_{d,i} = L_1 / D$$

$$\phi V_1 = D$$

Sustituyendo A.1.15 y 3.8 en A.1.14

$$v_{2,i}^{-1} v_{1,i}^A \lambda_{1,i}^{-d_i} (U_1 v_{1,i} \quad v_{2,i}^{-d_i} A_{d,i}^{-d_i} - U_1 d_i A_{d,i} / (\phi \Delta t L_1) \\ A_{1,i}) / (L_1 \phi \Delta t) = -\sigma (v_{2,i}^0 - \lambda_{1,i}^c) \quad = -\sigma (v_{2,i}^0 - \lambda_{1,i}^0 - d_i^0) - u_{1,i}^0 / \\ -d_i^0) - u_{1,i}^0 / (\phi \Delta t) \quad A.1.16a \quad (\phi \Delta t) \quad A.1.16b$$

Sustituyendo las ecuaciones 3.10 y 3.11 en A.1.16 :

$$v_{2,i}^{-d_i} \rho_{1,i}^0 = -\sigma (v_{2,i}^0 - \quad v_{2,i}^{-d_i} \rho_{1,i}^0 = -\sigma (v_{2,i}^0 - \\ \lambda_{1,i}^c - d_i^0) - u_{1,i}^0 / (\phi \Delta t) \quad A.1.17a \quad \lambda_{1,i}^0 - d_i^0) - u_{1,i}^0 / (\phi \Delta t) \quad A.1.17b$$

ε en este caso  $d_i = v_{1,i}$  y  $\phi V_i = D$

Balance de masa para cada componente i en el plato j : En este caso la ecuación resultante es igual a la ecuación 3.12

Balance de masa para el componente i en el rehervidor: En este caso la ecuación resultante es igual a la ecuación A.1.12

## A.2. DETERMINACION DE LOS BALANCES DE MATERIA TOTAL Y DE ENTALPIA .

### A.2.1 ARRANQUE

Balance de entalpia en el plato j.

$$\int_{t_n}^{t_n + \Delta t} \sum_{i=1}^{nc} (v_{j+1,i} \hat{H}_{j+1,i} + \lambda_{j-1,i} \hat{h}_{j-1,i} - v_{j,i} \hat{H}_{j,i} - \lambda_{j,i} \hat{h}_{j,i}) dt = \\ \sum_{i=1}^{nc} (u_{j,i}^U \hat{H}_{j,i} + u_{j,i}^L \hat{h}_{j,i}) |_{t_n + \Delta t} - \sum_{i=1}^{nc} (u_{j,i}^U \hat{H}_{j,i} + u_{j,i}^L \hat{h}_{j,i}) |_{t_n} \quad A.2.1$$



Por medio del método implícito del doble punto y despreciando  $u_{j,i}$

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^{nc} (v_{j+1,i} \hat{H}_{j+1,i} + \lambda_{j-1,i} \hat{H}_{j-1,i} - v_{j,i} \hat{H}_{j,i} - \lambda_{j,i} \hat{H}_{j,i}) + \\ & \sigma \sum_{i=1}^{nc} (v_{j+1,i}^0 \hat{H}_{j+1,i}^0 + \lambda_{j-1,i}^0 \hat{H}_{j-1,i}^0 - v_{j,i}^0 \hat{H}_{j,i}^0 - \lambda_{j,i}^0 \hat{H}_{j,i}^0) = \\ & \sum_{i=1}^{nc} (u_{j,i} \hat{h}_{j,i} - u_{j,i}^0 \hat{h}_{j,i}^0) / (\Phi \Delta t) \end{aligned} \quad A.2.2$$

Despejando  $\lambda_{j,i}$  de la ecuación 3.2 para sustituirlo en la ecuación A.2.2 y reagrupando tenemos :

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^{nc} v_{j+1,i} (\hat{H}_{j+1,i} - \hat{h}_{j,i}) + \sum_{i=1}^{nc} \lambda_{j-1,i} (\hat{H}_{j-1,i} - \hat{h}_{j,i}) - \sum_{i=1}^{nc} v_{j,i} (\hat{H}_{j,i} - \\ & \hat{h}_{j,i}) + \sigma \sum_{i=1}^{nc} (v_{j+1,i}^0 (\hat{H}_{j+1,i}^0 - \hat{h}_{j,i}^0) + \lambda_{j-1,i}^0 (\hat{H}_{j-1,i}^0 - \hat{h}_{j,i}^0) - v_{j,i}^0 (\hat{H}_{j,i}^0 - \\ & \hat{h}_{j,i}^0) - \lambda_{j,i}^0 (\hat{h}_{j,i}^0 - \hat{h}_{j,i}^0)) = \sum_{i=1}^{nc} u_{j,i} (\hat{h}_{j,i} - \hat{h}_{j,i}^0) / (\Phi \Delta t) \end{aligned} \quad A.2.3$$

Si  $v_{j,i} = v_j^y y_{j,i}$  y  $\lambda_{j,i} = L_j^x x_{j,i}$  sustituyendo estas relaciones en A.2.3 y despejando  $v_{j+1}$  :

$$\begin{aligned} v_{j+1} &= (v_j \sum_{i=1}^{nc} (\hat{H}_{j,i} - \hat{h}_{j,i}) y_{j,i} - L_{j-1} \sum_{i=1}^{nc} (\hat{H}_{j-1,i} - \hat{h}_{j,i}) x_{j-1,i} - \\ & \sigma \sum_{i=1}^{nc} (v_{j+1,i}^0 (\hat{H}_{j+1,i}^0 - \hat{h}_{j,i}^0) + \lambda_{j-1,i}^0 (\hat{H}_{j-1,i}^0 - \hat{h}_{j,i}^0) - v_{j,i}^0 (\hat{H}_{j,i}^0 - \hat{h}_{j,i}^0) - \\ & \lambda_{j,i}^0 (\hat{h}_{j,i}^0 - \hat{h}_{j,i}^0)) + \sum_{i=1}^{nc} u_{j,i} (\hat{h}_{j,i} - \hat{h}_{j,i}^0) / (\Phi \Delta t)) / \sum_{i=1}^{nc} y_{j+1,i} (\hat{H}_{j+1,i} - \hat{h}_{j,i}) \end{aligned} \quad A.2.4$$

Balace de materia en el plato  $j$  .

$$\int_{t_n}^{t_n + \Delta t} (v_{j+1} + L_{j-1} - v_j - L_j) dt = (U_j^U + U_j^L) |_{t_n + \Delta t} - (U_j^U + U_j^L) |_{t_n} \quad A.2.5$$

Por medio del método implícito del doble punto y despreciando  $U_j^U$  :

$$v_{j+1} + L_{j-1} - v_j - L_j + \tau (v_{j+1}^0 + L_{j-1}^0 - v_j^0 - L_j^0) = (U_j - U_j^0) / (\Phi \Delta t) \quad A.2.6$$

Considerando que la acumulación de líquido en cada plato es constante y dado que el término multiplicado por  $\sigma$  se anula tenemos que :

$$L_j = V_{j+1} + L_{j-1} - V_j \quad A.2.7$$

### A.2.2. PRODUCTO

Balace de entalpía en el condensador (etapa 1) :

$$\int_{t_n}^{t_n + \Delta t} \sum_{i=1}^{nc} (v_{2,i} \hat{H}_{2,i} - \ell_{1,i} \hat{h}_{1,i} - d_i \hat{H}_{d,i}) - Q_c) dt = \sum_{i=1}^{nc} (u_{1,i}^u \hat{H}_{1,i} + u_{1,i}^l \hat{h}_{1,i}) |_{t_n + \Delta t} - \sum_{i=1}^{nc} (u_{1,i}^u \hat{H}_{1,i} + u_{1,i}^l \hat{h}_{1,i}) |_{t_n} \quad A.2.8$$

Por medio del método implícito del doble punto y despreciando  $u_{1,i}^u$  :

$$\sum_{i=1}^{nc} (v_{2,i} \hat{H}_{2,i} - \ell_{1,i} \hat{h}_{1,i} - d_i \hat{H}_{d,i}) - Q_c + \sigma \left( \sum_{i=1}^{nc} (v_{2,i} \hat{H}_{2,i}^0 - \ell_{1,i}^0 \hat{h}_{1,i}^0 - d_i \hat{H}_{d,i}^0) - Q_c \right) = \sum_{i=1}^{nc} (u_{1,i} \hat{h}_{1,i} - u_{1,i}^0 \hat{h}_{1,i}^0) / \Phi \Delta t \quad A.2.9$$

Despejando  $\ell_{1,i}$  de la ecuación A.1.14 y sustituyendo en A.2.9

$$\sum_{i=1}^{nc} (v_{2,i} \hat{H}_{2,i} - v_{2,i} \hat{h}_{1,i} + d_i \hat{h}_{1,i} - \sigma (v_{2,i}^0 - \ell_{1,i}^0 - d_i^0) \hat{h}_{1,i} + (u_{1,i} - u_{1,i}^0) \hat{h}_{1,i} / (\Delta t) - d_i \hat{H}_{d,i}) - Q_c + \sigma \left( \sum_{i=1}^{nc} (v_{2,i}^0 \hat{H}_{2,i}^0 - \ell_{1,i}^0 \hat{h}_{1,i}^0 - d_i \hat{H}_{d,i}^0) - Q_c^0 \right) = \sum_{i=1}^{nc} (u_{1,i} \hat{h}_{1,i} - u_{1,i}^0 \hat{h}_{1,i}^0) / \Phi \Delta t \quad A.2.10$$

Reagrupando y despejando  $Q_c$  :

$$Q_c = v_{2,i} \sum_{i=1}^{nc} Y_{2,i} (\hat{H}_{2,i} - \hat{h}_{1,i}) - D \sum_{i=1}^{nc} x_{d,i} (\hat{H}_{d,i} - \hat{h}_{1,i}) + \sigma (v_{2,i}^0 \sum_{i=1}^{nc} Y_{2,i}^0 (\hat{H}_{2,i}^0 - \hat{h}_{1,i}^0) - L_{1,i}^0 \sum_{i=1}^{nc} x_{1,i}^0 (\hat{h}_{1,i}^0 - \hat{h}_{1,i}^0) - D \sum_{i=1}^{nc} x_{d,i}^0 (\hat{H}_{d,i}^0 - \hat{h}_{1,i}^0) - Q_c^0) + u_{1,i}^0 \sum_{i=1}^{nc} x_{1,i}^0 (\hat{h}_{1,i}^0 - \hat{h}_{1,i}^0) / \Phi \Delta t \quad A.2.11$$

Si el condensador es total  $x_{d,i} = x_{1,i}$  y  $\hat{H}_{d,i} = \hat{h}_{1,i}$

Si el condensador es parcial  $x_{d,i} = Y_{1,i}$  y  $\hat{H}_{d,i} = \hat{H}_{1,i}$

Balance de materia en la etapa dos :

$$\int_{t_n}^{t_n + \Delta t} (V_2 - L_1 - D) dt = (U_1^U + U_1^I) |_{t_n + \Delta t} - (U_1^U + U_1^I) |_{t_n} \quad A.2.12$$

Aplicando el método implícito del doble punto y despreciando  $U_1^U$  :

$$V_2 - L_1 - D + \alpha (V_2^0 - L_1^0 - D^0) = (U_1 - U_1^I) / (\phi \Delta t) \quad A.2.13$$

Dado que la acumulación de líquido en la etapa 1 es constante y que el término multiplicado por  $\alpha$  se anula tenemos :

$$V_2 = L_1 + D \quad A.2.14$$

Balance de entalpía y materia en el plato  $j$  ( $j=2,3,\dots,n-1$ )

El desarrollo es similar al empleado para las ecuaciones A.2.4 y A.2.7 .

Balance de entalpía en el rehervidor (etapa  $n$ ).

$$\int_{t_n}^{t_n + \Delta t} \left( \sum_{i=1}^{nc} (L_{n-1,i} \hat{h}_{n-1,i} - v_{n,i} \hat{H}_{n,i}) + Q_r \right) dt = \sum_{i=1}^{nc} (u_{n,i} \hat{H}_{n,i} + u_{n,i}^I \hat{h}_{n,i}) |_{t_n + \Delta t} - \sum_{i=1}^{nc} (u_{n,i} \hat{H}_{n,i} + u_{n,i}^I \hat{h}_{n,i}) |_{t_n} \quad A.2.15$$

Aplicando el método implícito del doble punto y despreciando  $u_{n,i}^U$  :

$$\sum_{i=1}^{nc} L_{n-1,i} \hat{h}_{n-1,i} - \sum_{i=1}^{nc} v_{n,i} \hat{H}_{n,i} + Q_r + \sigma \left( \sum_{i=1}^{nc} L_{n-1,i}^0 \hat{h}_{n-1,i}^0 - \sum_{i=1}^{nc} v_{n,i}^0 \hat{H}_{n,i}^0 \right) + Q_r^0 = \sum_{i=1}^{nc} (u_{n,i} \hat{h}_{n,i} - u_{n,i}^0 \hat{h}_{n,i}^0) / (\phi \Delta t) \quad A.2.16$$

Despejando  $\varepsilon_{n-1,i}$  de la ecuación A.1.6 y sustituyendo en A.2.16

$$\sum_{i=1}^{nc} (v_{n,i} - \sigma(\varepsilon_{n-1,i} - v_{n,i}^0) + (u_{n,i} - u_{n,i}^0) / (\phi \Delta t)) \hat{h}_{n-1,i} - \sum_{i=1}^{nc} v_{n,i} \hat{h}_{n,i} + Q_r + \sigma(\sum_{i=1}^{nc} (\varepsilon_{n-1,i} - \hat{h}_{n-1,i}^0 - v_{n,i}^0 \hat{h}_{n,i}^0) + Q_r^0) = \sum_{i=1}^{nc} (u_{n,i} \hat{h}_{n,i} - u_{n,i}^0 \hat{h}_{n,i}^0) / (\phi \Delta t)$$

A.2.17

Reagrupando y despejando  $Q_r$  :

$$Q_r = -v_{n,i} \sum_{i=1}^{nc} Y_{n,i} (\hat{h}_{n-1,i} - \hat{h}_{n,i}^0) - \sigma(\sum_{i=1}^{nc} (\hat{h}_{n-1,i} - \hat{h}_{n-1,i}^0)) x_{n-1,i}^0 - v_{n,i}^0 \sum_{i=1}^{nc} (\hat{h}_{n,i}^0 - \hat{h}_{n,i}^0) Y_{n,i} + Q_r^0 + (u_{n,i} \sum_{i=1}^{nc} (\hat{h}_{n,i} - \hat{h}_{n-1,i}^0) x_{n,i} - u_{n,i}^0 \sum_{i=1}^{nc} (\hat{h}_{n,i}^0 - \hat{h}_{n-1,i}^0) x_{n,i}^0) / (\phi \Delta t)$$

A.2.18

Los criterios que deben satisfacerse para que exista un estado de equilibrio para sistemas de multifase y multicomponente fueron deducidos por Gibbs.<sup>33</sup>

Para un sistema cerrado, el estado de equilibrio es aquel en el que la energía libre total de Gibbs es un mínimo respecto a todos los cambios posibles a la temperatura y presión dados.

$$(dG^t)_{t,p} \leq 0 \quad \text{A.3.1}$$

en donde:

$G^t$  = energía libre total de Gibbs.

$T$  = temperatura

$P$  = presión

En un estado de equilibrio pueden presentarse variaciones diferenciales en el sistema a temperatura y presión constante, sin producir ningún cambio de  $G^t$ . A esto corresponde el significado en la igualdad de la ecuación (A.3.1). Por lo tanto, otro criterio general para que un sistema esté en equilibrio es:

$$(dG^t)_{t,p} = 0 \quad \text{A.3.2}$$

Para aplicar este criterio se desarrolla una expresión para  $dG^t$  como función de las moles de los componentes en las diversas fases, igualandola a cero. La ecuación que define la energía libre de Gibbs, para un sistema fluido homogéneo, ya sea abierto o cerrado es:

$$dG^t = (\partial G / \partial T)_{p, n_i} dT + (\partial G / \partial P)_{t, n_i} dP + \sum_{i=1}^c (\partial G / \partial n_i)_{p, t, n_{j \neq i}} dn_i \quad \text{A.3.3}$$

en donde :

- $n$  = número de moles  
 $i, j$  = número de componente  
 $c$  = número total de componentes

De la termodinámica clásica

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{P, n_i} = -S \quad \text{A.3.4}$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_{T, n_i} = V \quad \text{A.3.5}$$

en donde :

$S$  = entropía molar

$V$  = volumen molar

y definiendo el potencial químico de la especie ( $i$ ) como :

$$\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i}\right)_{P, T, n_j} = G_i \quad \text{A.3.6}$$

Sustituyendo (A.3.4), (A.3.5), y (A.3.6) en (A.3.3) tenemos :

$$d(nG) = -(nS)dT + (nV)dP + \sum (\mu_i dn_i) \quad \text{A.3.7}$$

Esta ecuación es aplicable a cambios entre estados de equilibrio. Si escribimos esta ecuación para dos fases  $\alpha$  y  $\beta$  obtenemos:

$$d(nG)^\alpha = -(nS)^\alpha dT + (nV)^\alpha dP + \sum (\mu_i^\alpha dn_i^\alpha) \quad \text{A.3.8}$$

$$d(nG)^\beta = -(nS)^\beta dT + (nV)^\beta dP + \sum (\mu_i^\beta dn_i^\beta) \quad \text{A.3.9}$$

Para un sistema a presión y temperatura constante la suma de las ecuaciones (A.3.6) y (A.3.7) proporcionan

$$(dG^t)_{t,p} = \sum(\mu_i^\alpha dn_i^\alpha) + \sum(\mu_i^\beta dn_i^\beta) = 0 \quad \text{A.3.10}$$

Y si el sistema es cerrado y sin reacción química, los balances de materia requieren que :

$$dn_i^\beta = -dn_i^\alpha \quad \text{A.3.11}$$

obteniendo como resultado :

$$(\mu_i^\alpha - \mu_i^\beta) dn_i^\alpha = 0 \quad \text{A.3.12}$$

En donde para cumplir la igualdad es necesario que cada término sea separadamente cero, lo que implica :

$$\mu_i^\alpha = \mu_i^\beta \quad \text{A.3.13}$$

Esto se puede generalizar para sistemas de más de dos fases :

$$\mu_i^\alpha = \mu_i^\beta = \dots = \mu_i^\pi \quad \text{A.3.14}$$

con  $i=1,2,\dots,n$

La ecuación (A.3.14) es un criterio general para el equilibrio de fases y establece que para un sistema de múltiples fases que se encuentran a la misma presión y temperatura se satisface la condición de equilibrio cuando el potencial químico ( $\mu_i$ ) de cada especie química es el mismo en todas las fases presentes.

Ahora bien, si expresamos la energía libre de Gibbs en términos de la fugacidad ( $\hat{f}_i$ ), a temperatura constante :

$$dG_i = RT \, d \ln \hat{f}_i \quad \text{A.3.15}$$

De la ecuación (A.3.6)  $\mu_i \equiv G_i$ , entonces la ecuación (A.3.15) se puede escribir de la siguiente forma :

$$d\mu_i = RT \, d \ln \hat{f}_i \quad \text{A.3.16}$$

en donde :

$R$  = constante de la ley de los gases  
 $\hat{f}_i$  = fugacidad del componente (i)

Integrando la ecuación (A.3.16) se tiene que :

$$\mu_i = RT \ln \hat{f}_i + c \quad \text{A.3.17}$$

En donde  $c$  es una constante que sólo depende de la temperatura. Como todas las fases están a la misma temperatura, de la ecuación (A.3.14), y de la ecuación (A.3.17) obtenemos :

$$\hat{f}_i^{\alpha} = \hat{f}_i^{\beta} = \dots = \hat{f}_i^{\pi} \quad \text{A.3.18}$$

Este último criterio de equilibrio requiere que para un sistema multifases a una presión y temperatura dada, la fugacidad de cada componente debe ser la misma para todas las fases.

En resumen, los criterios del equilibrio entre fases, se pueden sintetizar con las siguientes condiciones para el sistema que se muestra en el siguiente esquema.

fase vapor
fase líquida I
fase líquida II

Para un sistema cerrado en equilibrio, que consta de dos fases líquidas y una vapor, se cumple:



$$T_v = T_{LI} = T_{LII} \quad A.3.19$$

$$P_v = P_{LI} = P_{LII} \quad A.3.20$$

$$\hat{f}_{iv} = \hat{f}_{jI.I} = \hat{f}_{iLII} \quad A.3.21$$

Los criterios de equilibrio aquí mencionados son de suma importancia para la predicción del comportamiento de un sistema.

Por definición del coeficiente de fugacidad<sup>33</sup>( $\phi$ ), la fugacidad en la fase vapor puede expresarse como:

$$\hat{f}_{iv} = Y_i \phi_{iv} P \quad A.3.22$$

en donde :

$Y_i$  = composición del componente  $i$  en fase vapor  
 $\phi_{iv}$  = coeficiente de fugacidad del componente  $i$  en la fase vapor

La fugacidad en la fase líquida puede expresarse en términos del coeficiente de fugacidad  $\phi_{iL}$  o el coeficiente de actividad  $\gamma_i$  como :

$$\hat{f}_{iL} = x_i \phi_{iL} P \quad A.3.23$$

$$\hat{f}_{iL} = x_i \gamma_i \hat{f}_i^o \quad A.3.24$$

en donde :

$\hat{f}_i^o$  = fugacidad del componente  $i$  evaluada a condiciones estándar  
 $x_i$  = composición del componente  $i$  en fase líquida

Igualando las ecuaciones (A.3.22) y (A.3.23) por medio de la ecuación (A.3.21), y reagrupando :

$$Y_i/x_i = (\gamma_i \hat{f}_i^0) / (\phi_{iV} P) = \phi_{iL} / \phi_{iV} \quad A.3.25$$

Esta última relación proporciona la composición del componente  $i$  en ambas fases, como función de parámetros que se pueden evaluar por métodos termodinámicos a partir de poca información experimental.

En la tabla A.3.1 se resumen las propiedades termodinámicas que son útiles para definir los estados de equilibrio entre fases.

La relación de equilibrio o valor  $K$ , es ampliamente utilizada en los cálculos del equilibrio líquido-vapor.<sup>11</sup> El valor de  $K$  es la relación entre las composiciones de las fases líquido-vapor de un componente a las condiciones de equilibrio. Entonces la ecuación (A.3.25) se expresa de la siguiente forma:

$$K_i = Y_i/x_i = (\gamma_i f_i^0) / (\phi_{iV} P) = \phi_{iL} / \phi_{iV} \quad A.3.26$$

Es importante para los fines de separación, que se tengan los valores de  $K$  a las condiciones de presión y temperatura a la que los procesos requieren operar, ya que dichos valores se pueden relacionar para los componentes que forman una mezcla a través del concepto de volatilidad relativa.

Esta es una medida cuantitativa del grado de separación que se puede dar entre un componente y otro. La volatilidad relativa se define como:

$$\alpha_{i,j} = K_i/K_j \quad A.3.27$$

Otra propiedad útil, como indicador del grado de separación, es la temperatura de ebullición de las sustancias puras que forman la mezcla. Mientras mayor diferencia exista entre las temperaturas, habrá mayor oportunidad para lograr la separación a través de vaporizaciones y condensaciones.

Cuando la volatilidad relativa se aproxima a la unidad y la diferencia entre las temperaturas de ebullición es mínima,

no se puede lograr una buena separación por medio de la destilación. El éxito en la simulación o diseño de equipo de separación por destilación, depende en su mayor parte de poseer suficiente información sobre los datos del equilibrio termodinámico para el sistema involucrado.

Hay diversas formas para calcular el equilibrio termodinámico, y todo depende de la información obtenida ya sea experimentalmente, o por medio de correlaciones termodinámicas o empíricas. Existen principalmente tres diferentes modelos que se emplean para evaluar las relaciones de equilibrio.

- a) Ecuaciones de estado
- b) Modelos de coeficientes de actividad
- c) Métodos de contribución de grupos

Además del continuo desarrollo de estos tres modelos, han surgido otros más, así como nuevos parámetros y algoritmos más seguros y eficientes para su implementación en los simuladores. Fredenslund et al<sup>10,21</sup> ha realizado el análisis de estos y otros modelos para poder seleccionar el más apropiado dependiendo de la mezcla multicomponente que se requiera separar.

#### A. 4 METODOS NUMERICOS

La simulación de una torre de destilación por lote involucra en su modelado la solución de un sistema de ecuaciones algebraicas lineales muy grande. Aunado a esto, el problema se complica al tratarse de un fenómeno transiente. Tanto el modelo físico como las técnicas para resolver los sistemas de ecuaciones, requieren de una herramienta matemática capaz de proveer soluciones confiables y prácticas.

En este apéndice se proporcionarán las técnicas y métodos numéricos empleados para resolver los modelos matemáticos utilizados en la simulación de una torre de destilación por lote.

##### A.4.1 SISTEMA DE ECUACIONES LINEALES

En la determinación del balance de masa en una torre de destilación por lote, el modelo matemático a resolver es un sistema de ecuaciones de tipo lineal, el cual tiene la característica de poder representarse a través de una matriz tridiagonal.

Si bien existen diversas técnicas para resolver este tipo de sistemas, la mayoría de éstas derivan del método de eliminación Gaussiana.<sup>6</sup>

##### A.4.1.1 METODO DE THOMAS

Este método fue desarrollado para dar solución al sistema de ecuaciones lineales que en su forma sea representado a través de una matriz tridiagonal.<sup>4,17</sup>

Dentro del método, se emplea una serie de fórmulas, llamadas de recurrencia, que simplifican el manejo de la matriz para encontrar la solución.

La determinación de las ecuaciones de recurrencia es la siguiente:

$$\begin{array}{rcl}
 & b_1 x_1 + C_1 x_2 & = d_1 \\
 a_2 x_1 + & b_2 x_2 + C_2 x_3 & = d_2 \\
 a_2 x_2 + & b_3 x_3 + C_3 x_4 & = d_3 \\
 \hline
 a_{n-1} x_{n-2} + & b_{n-1} x_{n-1} + C_{n-1} x_n & = d_{n-1} \\
 & a_n x_{n-1} + b_n x_n & = d_n
 \end{array}$$

A.4.1

la cual se puede expresar en forma matricial como:

$$\bar{A} \bar{X} = \bar{D}$$

A.4.2.1.

en donde :

$\bar{A}$  = matriz de coeficientes del sistema de ecuaciones lineales

$\bar{X}$  = vector de incógnitas a determinar

$\bar{D}$  = vector de restricciones

La ecuación A.4.2. también se puede expresar como:

$$\begin{array}{r}
 \left[ \begin{array}{cccccc}
 b_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 a_2 & b_2 & C_2 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & a_3 & b_3 & C_3 & 0 & 0 \\
 \hline
 0 & 0 & a_{n-1} & b_{n-1} & 0 & C_{n-1} \\
 0 & 0 & 0 & a_n & 0 & b_n
 \end{array} \right]
 \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \hline x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \hline d_{n-1} \\ d_n \end{bmatrix}
 \end{array}$$

A.4.2.2

De la matriz A.4.1 se toma la primer ecuación :

$$b_1 x_1 + C_1 x_2 = d_1$$

A.4.3

Dividiendo entre  $b_1$  y reagrupando para  $x_1$  :

$$x_1 = d_1 / b_1 - x_2 C_1 / b_1 \quad A.4.4$$

de A.4.4, definimos  $F_1$  y  $g_1$  para A.4.3, y tenemos :

$$F_1 = C_1 / b_1 \quad A.4.5$$

$$g_1 = d_1 / b_1 \quad A.4.6$$

sustituyendo  $F_1$  y  $g_1$  en la segunda ecuación de la matriz (A.4.2) :

$$a_2 x_1 + b_2 x_2 + C_2 x_3 = d_2$$

$$a_2 (d_1 / b_1 - C_1 / b_1 x_2) + b_2 x_2 + C_2 x_3 = d_2$$

$$a_2 d_1 / b_1 + x_2 (b_2 - a_2 C_1 / b_1) + C_2 x_3 = d_2 \quad A.4.7$$

dividiendo A.4.7 entre  $(b_2 - a_2 F_1)$  :

$$x_2 + \frac{C_2}{b_2 - F_1 a_2} x_3 = \frac{d_2 - a_2 g_1}{b_2 - a_2 F_1} \quad A.4.8$$

de aquí se define  $F_2$  y  $g_2$  como :

$$F_2 = \frac{C_2}{b_2 - F_1 a_2} \quad A.4.9$$

$$g_2 = \frac{d_2 - a_2 g_1}{b_2 - F_1 a_2} \quad A.4.10$$

las ecuaciones A.4.9, y A.4.10 se generalizan para dar :

$$F_k = \frac{C_k}{b_k - F_{k-1} a_k} \quad A.4.11$$

$$g_k = \frac{d_k - a_k g_{k-1}}{b_k - F_{k-1} a_k} \quad A.4.12$$

finalmente, por medio de las ecuaciones de recurrencia A.4.11 y A.4.12 se obtiene la solución al sistema de ecuaciones como:

$$x_n = g_n \quad \text{A.4.13}$$

$$x_k = g_k - F_k x_{k+1} \quad \text{A.4.14}$$

con  $k = n-1, n-2, \dots, 2, 1$

cuya representación matricial es :

$$\begin{bmatrix} 1 & F_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & F_2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & F_3 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & 1 & \dots & F_{n-1} & \dots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \dots & 1 & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \dots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ g_3 \\ \dots \\ g_{n-1} \\ g_n \end{bmatrix} \quad \text{A.4.15}$$

#### A. 4.1.2 METODO DE GAUSS JORDAN PARA INVERSION DE MATRICES<sup>20</sup>

Una de las herramientas del método Broyden, es la inversión de una matriz. Para que una matriz pueda invertirse debe asegurarse que no sea singular. (Se dice que una matriz cuadrada cuyo determinante es diferente de cero es no singular).

Así se define la inversa de una matriz  $A$ , como la transpuesta de la matriz de cofactores (adjunta), de una matriz singular, dividida entre el determinante de esta.

$$\bar{A}^{-1} = \text{adj } \bar{A}^T / |\bar{A}| \quad \text{A.4.16}$$

El producto de una matriz  $A$  y su inversa, en cualquier orden, siendo  $A$  no singular, es una matriz identidad :

$$\bar{A}^{-1} \bar{A} = \bar{A} \bar{A}^{-1} = \bar{I} \quad \text{A.4.17}$$

Si definimos  $X = A^{-1}$  y sustituimos en la ecuación anterior obtenemos.

$$\bar{A}X = \bar{I} \quad \text{A.4.18}$$

Se puede considerar que esta ecuación matricial representa un sistema de ecuaciones simultaneas, en donde no hay solo un vector de términos independientes sino  $n$ , los  $n$  vectores básicos que forman la matriz unitaria  $I$ .

Además, no existe un solo vector de incógnitas, sino  $n$ , los que corresponden a cada columna de la matriz unitaria.

Por lo anterior, es posible determinar la inversa de una matriz con el método de Gauss-Jordan<sup>20</sup> de eliminación completa.

Para lograrlo, bastará con aplicar las operaciones elementales sobre los renglones de la matriz ampliada  $(A, I)$  de manera de transformar  $A$  en  $I$ . Cuando se haya hecho, se obtendrá la matriz ampliada  $(I, A^{-1})$ , con lo que se tendrá la matriz inversa buscada.



## PROCEDIMIENTO DE CALCULO PARA INVERSION DE MATRICES

Para una matriz de la siguiente forma :

$$\begin{aligned} A &= a(i,j) \\ I &= Id(i,j) \quad , \quad \begin{matrix} i=j & Id(i,j) = 1 \\ i \neq j & Id(i,j) = 0 \end{matrix} \end{aligned} \quad A.4.19$$

en donde :

A = matriz a invertir  
 I = matriz identidad  
 i = índice de renglón (1,2,...m)  
 j = índice de columna (1,2,...m)  
 a,Id = coeficientes de las matrices

### 1.- Normalización del primer renglón y definición del elemento pivote.

sea:  $b = a(i,j)$ , si  $i=j$  (pivote)

entonces :

$$a_n(i,j) = a(i,j)/b \quad ; \quad Id_n(i,j) = Id(i,j)/b$$

A.4.20

en donde :

b = elemento pivote  
 n = significa normalizado

### 2.- Eliminación de elementos en columna que no pertenecen a la diagonal principal :

$$a_{2,j} = a_n(1,1) * a(2,j) - a(2,1) * a_n(1,j)$$

$$a_{3,j} = a_n(1,1) * a(3,j) - a(3,1) * a_n(1,j)$$

---


$$a_{n,j} = a_n(1,1) * a(n,j) - a(n,1) * a_n(1,j)$$

A.4.21

3.- Para el proceso en paralelo sobre la matriz identidad tenemos :

$$\begin{array}{l}
 \text{Id}_{2,j} = a_{n(1,1)} * \text{Id}_{(2,j)} - \text{Id}_{(2,1)} * a_{n(1,j)} \\
 \text{Id}_{3,j} = a_{n(1,1)} * \text{Id}_{(3,j)} - \text{Id}_{(3,1)} * a_{n(1,j)} \\
 \hline
 \text{Id}_{m,j} = a_{n(1,1)} * \text{Id}_{(m,j)} - \text{Id}_{(m,1)} * a_{n(1,j)}
 \end{array}
 \quad \text{A.4.22}$$

4.- Regresar al primer paso para normalizar el siguiente elemento de la diagonal y seguir eliminando elementos, como lo indica el paso 2 y 3, hasta lograr :

$$\bar{A} + \bar{I} \quad ; \quad \bar{I} + \bar{A}^{-1}
 \quad \text{A.4.23}$$

## A.4.2 ECUACIONES NO LINEALES

### A.4.2.1 ECUACIONES UNIVARIABLES

Para determinar el perfil de temperaturas a través de la torre se emplea una aproximación por el método de Newton, dando como límites las temperaturas de ebullición de los componentes, más ligero y más pesado de la mezcla, para evitar desviaciones de la solución.

El planteamiento consiste en encontrar la raíz de la ecuación :

$$F(x) = 0 \quad \text{A.4.24}$$

Se han desarrollado diversos métodos para encontrar convergencia a la solución. La mayoría de estos métodos, se encuentran en textos de análisis numérico y en libros de computación para ingeniería química. Algunos de estos métodos son : el método de la bisección, el de regula falsi, el de la secante, el método de Wegstein y el método Newton.

#### A.4.2.1.1 METODO DE NEWTON<sup>6,20</sup>

Supóngase que requiere encontrarse la solución de  $f(x)=0$  si  $f(x)$  es una función derivable y continua en el intervalo de búsqueda, ésta puede expandirse en series de Taylor, alrededor de un punto  $x_0$ , truncando hasta el término lineal.

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0) * (x_1 - x_0) \quad \text{A.4.25}$$

en donde  $f'(x_0)$  es la primer derivada de la función si se sustituye A.4.24 en A.4.25 y se reagrupa para  $x_1$  tenemos:

$$x_1 = x_0 - f(x_0) / f'(x_0) \quad \text{A.4.26}$$

Si aplicamos a A.4.26 un algoritmo de solución iterativo obtenemos :

$$x_{k+1} = x_k - f(x_k) / f'(x_k) \quad \text{A.2.27}$$

Se puede usar ahora  $x_{k+1}$  como el nuevo estimado de la raíz de  $f(x)$  y repetir el cálculo hasta satisfacer una tolerancia dada ( $\epsilon$ ).

Una dificultad en el uso de este método es el requerir la evaluación de  $f(x)$  y su derivada para cada iteración en el punto ( $k$ ). La evaluación de la derivada de una función en ingeniería química es frecuentemente un problema complicado.

La modificación al método Newton<sup>37</sup>, proporciona la aproximación numérica a la  $f'(x_k)$ , como sigue :

$$f'(x_k) = \frac{f(x_k + \delta_k) - f(x_k)}{\delta_k} \quad \text{A.4.28}$$

aplicando esta aproximación a la ecuación A.4.28 :

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\delta_k}{((f(x_k + \delta_k)/f(x_k)) - 1)} \quad \text{A.4.29}$$

En donde  $\delta_k$  se puede tomar como  $\delta_k \ll \epsilon > |x_{k+1} - x_k|$ . El valor de  $\delta_k$  debe ser pequeño para una buena aproximación de la derivada, pero no tanto que cause un error. En el caso en que  $\epsilon = 10^{-4}$  que es una tolerancia satisfactoria, se puede usar la siguiente expresión :

$$\delta_k = x_k * 10^{-5} \quad ; \quad \text{si } |x_k| < 10 \quad \text{A.4.30}$$

Este método incrementa la eficiencia del cálculo y da una rápida convergencia, en relación a otros métodos.

El procedimiento de cálculo es el siguiente :

- 1.- Suponer el valor inicial para ( $x_k$ ).
- 2.- Evaluar la función  $f(x)$  en  $x = x_k$ .
- 3.- Si el valor de  $|f(x)|$  es menor que una tolerancia dada  $\epsilon$ , se encontró la solución , de no ser así pasar al inciso 4.
- 4.- Calcular  $f'(x_k)$ .
- 5.- Calcular  $x_{k+1}$  de la ecuación A.4.29 e ir al inciso 2;

## A.4.2.2 SISTEMAS MULTIVARIABLES

Para la simulación de una torre de destilación por lote, en este trabajo se utiliza el método hasta el cual genera un sistema de ecuaciones no lineales que deben ser resueltas.

El sistema de ecuaciones que se va a resolver es del tipo:

$$\bar{F}(\bar{X}) = 0 \quad \text{A.4.31}$$

en donde :

$\bar{F}(\bar{X})$  = vector de funciones no lineales.

$\bar{X}$  = es el vector de variables

A.4.2.2.1 METODO DE BROYDEN<sup>17,5</sup>

La forma de Newton para dar solución al sistema de ecuaciones no lineales, consiste en hacer una aproximación lineal del vector de funciones  $\bar{F}(X)$ , por series de Taylor en un punto  $\bar{X}_k$ , e irse aproximando a la solución por medio de  $\Delta\bar{X}$ , esto es :

$$\bar{F}(X) = \bar{F}(X_k + X) = \bar{F}(X_k) + \bar{J}(X_k) X + O\|\bar{F}\|^2 \quad \text{A.4.32}$$

en donde :

$\bar{F}(X)$  = sistema de ecuaciones no lineales a resolver.

$\bar{J}(X)$  = matriz del Jacobiano para el sistema de ecuaciones.

$\bar{P}$  = términos superiores de la serie.

$k$  = punto de evaluación (iteración).

Para encontrar la solución al sistema se aplica un algoritmo iterativo a la ecuación A.4.32

$$\bar{J}_k \Delta\bar{X}_k = -\bar{F}(X_k) \quad \text{A.4.33}$$

$$\bar{x}_{k+1} = \bar{x}_k + S_k \Delta x_k \quad A.4.34$$

en donde :

$S_k$  = es un escalar definido para reducir el error entre iteraciones

y el Jacobiano  $\bar{J}_k$  tiene la forma :

$$\bar{J} = \begin{bmatrix} \partial f_1 / \partial x_1 & \partial f_1 / \partial x_2 & \text{-----} & \partial f_1 / \partial x_n \\ \partial f_2 / \partial x_1 & \partial f_2 / \partial x_2 & \text{-----} & \partial f_2 / \partial x_n \\ \text{-----} & \text{-----} & & \text{-----} \\ \partial f_n / \partial x_1 & \partial f_n / \partial x_2 & \text{-----} & \partial f_n / \partial x_n \end{bmatrix} \quad A.4.35$$

La modificación propuesta por Broyden al método Newton evita la evaluación constante del Jacobiano en cada nueva iteración tan sólo lo emplea como la primer aproximación, y posteriormente calcula la inversa en cada iteración por medio de la aproximación de la secante para las derivadas parciales. De esta manera, conforme la inversa evaluada se aproxima a la real, el método numérico comienza a converger en forma cuadrática al igual que el método Newton. Sin embargo esto incrementa el número de iteraciones.

El algoritmo de solución es el siguiente :

- 1.- Asumir un grupo inicial de valores a la variable  $\bar{x}_k$  y calcular  $\bar{f}(x_k)$
- 2.- Calcular la matriz H definida como:

$$H_k = -\bar{J}_k^{-1} \quad A.4.36$$

Broyden obtiene la primera aproximación a  $\bar{J}_k$  por medio de la fórmula :

$$\partial f_i / \partial x_j = (f_i(x_j + h_j) - f_i(x_j)) / h_j \quad A.4.37$$

en donde :

$i$  = elemento del vector

$j$  = elementos del vector diferentes a  $i$

$h$  = tamaño de la perturbación a la variable  
se recomienda ( $h=0.001x_j$ ).

3.- Calcular la dirección de convergencia de la ecuación  
A.4.33

$$\Delta \bar{x}_k = -\bar{F}(x_k) \bar{J}_k^{-1} = \bar{F}(x_k) H_k \quad A.4.38$$

4.- Calcular  $S_k$  tal que la norma eucladiana de  $F(x_k + S_k \Delta x_k)$   
sea menor que  $F(x_k)$ . Para la primer iteración  $S_k = 1$   
si :

$$\sum_{i=1}^n \bar{F}_i^2(x_k + S_k \Delta x_k) < \sum_{i=1}^n \bar{F}_i^2(x_k) \quad A.4.39$$

Proceder al paso 5 ; de otra forma calcular  $S_k$  de acuer  
do a la fórmula desarrollada por Broyden :

$$S_k = \frac{(1+6\eta)^{1/2} - 1}{3\eta} \quad A.4.40$$

en donde :

$$\eta = \frac{\sum_{i=1}^n \bar{F}_i^2(x_k + S_k \Delta x_k)}{\sum_{i=1}^n \bar{F}_i^2(x_k)} \quad A.4.41$$

Si la norma no se reduce en un número específico de  
iteraciones, el procedimiento completo se repite desde el  
paso 2, evaluando el Jacobiano en base a  $x_k$ .

5.- Evaluar el vector :

$$\bar{x}_{k+1} = x_k + S_k \Delta x_k \quad A.4.42$$

Probar la convergencia, evaluando  $F(x_{k+1})$ , de no lo-  
grarse, calcular :

$$Y_k = F_{k+1} - F_k \quad A.4.43$$

6.- Calcular :

$$H_{k+1} = H_k - \frac{(H_k Y_k + S_k \Delta x_k) \Delta x_k^T H_k}{\Delta x_k^T H_k Y_k} \quad A.4.44$$

y regresar al paso 3.

Como puede observarse, la ventaja de Broyden sobre Newton es, el evitar la evaluación e inversión del Jacobiano para cada iteración.



### A.4.3 ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS <sup>21</sup>

Uno de los problemas básicos a resolver en la simulación de una torre de destilación por lote, es la dependencia del proceso de separación con respecto al tiempo.

Toda situación que se refiera a la rapidez de cambio de una variable con respecto a otra, conduce a una ecuación diferencial de la forma :

$$F(x, y, dy/dx, d^2y/d^2x, \dots, d^ny/d^n x) = 0 \quad A.4.45$$

La ecuación A.4.45 es de orden  $n$  porque su derivada mayor es de este orden, y es ordinaria porque contiene solo una variable independiente.

En general, resolver la ecuación A.4.45 significa pasar de la representación diferencial, a la relación algebraica entre las variables, es decir, el problema es encontrar la relación algebraica  $y=y(x)$ , que sea consistente con la ecuación diferencial y sus valores en alguna condición dada. La relación  $y=y(x)$  debe ser al menos  $n$  veces diferenciable para ser una solución a la ecuación.

Para obtener una solución única, necesita proporcionarse alguna información adicional (por ejemplo valores  $y(x)$  o de sus derivadas en un valor específico de  $x$ ). Para determinar una solución única de orden  $n$  se requiere  $n$  condiciones.

Cuando las  $n$  condiciones son especificadas en el mismo valor de  $x$ , el problema es llamado "de valor inicial".

Cuando se involucran más de un valor de  $x$ , el problema se llama "de valores en la frontera".

Para resolver una ecuación diferencial a través de un método numérico, se debe determinar el intervalo  $(a, b)$ , en la variable independiente  $x$ , sobre el cual se desea la solución y dividirlo en subintervalos o pasos.

El valor de la solución es aproximado en  $m+1$  valores igualmente espaciados de  $x$ . El tamaño de paso está dado por:

$$h = (b - a) / m \quad A.4.46$$

en donde :

a, b = límite inferior y superior de x  
 m = número de intervalos o pasos

Existen diversos métodos de solución , como son: las Series de Taylor, Runge-Kutta, Predictor-corrector, Método Implícito, Método de Gear, Método de Euler.

Estos métodos están basados en las Series de Taylor, y cada uno impone ciertas simplificaciones que llevan a una evaluación práctica, pero con la consecuente pérdida de precisión.

#### A.4.3.1 METODO IMPLICITO DEL DOBLE PUNTO.

El método implícito<sup>17</sup> contiene un parámetro ajustable, el que se puede seleccionar de tal forma que reduzca el método a uno del tipo predictor, como Euler o a un corrector.

Este método es aplicable a ecuaciones del tipo:

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y)dx = y_{n+1} - y_n \quad A.4.47$$

La cual se puede reducir a la ecuación diferencial:

$$dy/dx = f(x,y) \quad A.4.48$$

El método implícito consiste en aproximar la integral utilizando un factor de calibración aplicado en los puntos  $x_{n+1}, x_n$  :

$$\phi f(x_{n+1}, y_{n+1}) + (1-\phi)f(x_n, y_n) h = y_{n+1} - y_n \quad A.4.49$$

en donde :

$\phi$  = factor de ajuste  $(0 \leq \phi \leq 1)$   
 h = tamaño de paso  
 $\sigma$  = definido como  $(1-\phi)/\phi$  A.4.50

Sustituyendo A.4.50 en A.4.49 y reagrupando :

$$f(x_{n+1}, y_{n+1}) + \phi f(x_n, y_n) = (y_{n+1} - y_n) / \phi h \quad \text{A.4.51}$$

Cuando  $\phi = 0$  la ecuación A.4.51 se reduce al método Euler (predictor) y si toma el valor de  $\phi = 0.5$  en el método corrector del trapecio.

**A.5 LISTADO GENERAL DEL PROGRAMA TDBA  
Y UN EJEMPLO DE LOS RESULTADOS DEL  
PROGRAMA .**

```

10 program idba
20 real l,lt,k
30 common/tlap/dti,n,nc,phi,sig,ld/cal/hv(20,20),hl(20,20),hv0(2
40 0,20),h10(20,20)/eq/k(20,20),sl(20,20)/lf/x(20,20),t(20)/fl/v(20
50 0,20),fl(20,20),fv0(20,20),f10(20,20)/ret/uc(20,20),uc0(20,20)/ft/l
60 t(20),v(20),l1(20),v1(20)/fe/uf,u(20)/ct/qr,qc,qr0,qc0/frac/te(3
70 2),ib/ugh/th
80 call lectu(ic,p,tmp,PD,LID,DMP,im)
90 400 call asum(it)
100 ITER=0
110 2000 call balsac
120 call theta(th)
130 call kab
140 call bal tot
150 - ,15-
160 IF(IC0)2000,3000,400
170 3000 end
180 subroutine lectu(ic,p,tmp,PD,LID,DMP,im)
190 character*11 anc(20)
200 real ix,lt,k
210 common/tlap/dti,n,nc,phi,sig,ld/cal/hv(20,20),hl(20,20),hv0(20,20),
220 v1(20)/eq/k(20,20),sl(20,20)/lf/x(20,20),t(20)/ct/qr,qc,qr0,qc0/ft/
230 l/ix(20)/re/te(3),ib/nom/an
240 read(5,1)uf,qr0,pD
250 READ(5,1)DTI,PHI,N,NC
260 READ(5,1)IC,IB,LID,im
270 READ(5,7)TMP,pMP
280 do 100 j=1,n
290 100 read(5,5)u(j),v(j)
300 do 200 i=1,nc
310 read(5,9)ix(i),an(i)
320 do 200 j=1,n
330 200 x(j,i)=ix(i)
340 read(5,7)(te(i),i=1,3)
350 sig=(1.-phi)/phf
360 ib=-1
370 1 format()
380 3 format()
390 5 format()
400 7 format()
410 9 format()
420 return
430 end
440 subroutine asum(it)
450 real ki,kb,l,lt,k
460 dimension u0(20)
470 common/tlap/dti,n,nc,phi,sig,ld/cal/hv(20,20),hl(20,20),hv0(2
480 0,20),h10(20,20)/eq/k(20,20),sl(20,20)/lf/x(20,20),t(20)/fl/v(20
490 0,20),fl(20,20),fv0(20,20),f10(20,20)/ret/uc(20,20),uc0(20,20)/ft/l
500 t(20),v(20),l1(20),v1(20)/fe/uf,u(20)/ct/qr,qc,qr0,qc0/ft/te(3)
510 t/frac/te(3),ib
520 dti=dti
530 if(id.ne.-1)go to 50
540 IF(DTI .GE. 60.)GO TO 30
550 if(it.eq.1)go to 10
560 dti=1.07*dti-1.+dti
570 go to 30
580 50 dti=10.
590 30 qc=qc
600 qr0=qr

```

```

610      do 100 j=1,n
620      t1(j)=t(cj)
630      do 100 i=1,nc
640      uc0(j,i)=uc(i,i)
650      fl0(j,i)=f(cj,i)
660      fv0(j,i)=fv(cj,i)
670      ht0(j,i)=h(cj,i)
680 100  hv0(j,i)=hv(cj,i)
690      if (it-eq-2) go to 20
700      if (IR-ER--1) GO TO 40
710      GO(4)=B(C4)
720      U(N)=U0(N)-V(1)*DT1
730 40    do 110 i=1,n
740      dt=(t(i)-t1(i))/dt1
750      t2=t(i)
760      t(i)=t1(i)+2.*dt*i*dt
770 110  t1(i)=t2
780      if (ID-ER--1) GO TO 113
790      JO=1
800      GO TO 115
810 113  JO=1
820 115  DO 130 J=JO,N
830      dt=(v(j)-v1(j))/dt1
840      t2=v(j)
850      v(j)=v1(j)+2.*dt*i*dt
860 130  v1(j)=t2
870      DO 160 J=1,N
880      DO 160 I=1,NC
890      ca=c(cj)
900      call sk(tm,I,KI)
910 160  k(j,i)=ki
920      call minbt(n,IO)
930      return
940 20   do 120 j=1,n
950      t1(j)=t(cj)
960 120  v1(j)=v(cj)
970      IT=1
980      return
990 10   qe0=0.0
1000    qe0=0.0
1010    fa=1
1020    TM=TE(2)
1030    CALL SK(TM,IB,KB)
1040    do 140 j=1,nc
1050    call sk(tm,I,KI)
1060    call entalp(tm,i,ev,el)
1070    do 140 j=1,n
1080    k(j,i)=ki
1090    at(j,i)=k(i)/kb
1100    uc0(j,i)=v(cj,i)*u(j)
1110    hv0(j,i)=ev
1120    ht0(j,i)=el
1130    fl0(j,i)=0.0
1140 140  fv0(j,i)=0.0
1150    do 150 j=1,n
1160    t1(j)=0.0
1170    t(j)=te(2)
1180 150  v1(j)=0.0
1190    call minbt(n,IO)
1200    IT=2

```

```

1210 return
1220 end
1230 subroutine sk(t,I,AK)
1240 dimension a(4,5)
1250 data a/-14.512474e-2,53.638924e-5,-5.3051604e-8,-173.58329e-12,-1
1260 88.967451e-2,61.239667e-5,-17.891649e-8,-90.855512e-12,-14.781715e
1270 2,-2.36.866353e-5,16.521412e-8,-248.23843e-12,-7.548840e-2,5.2623631
1280 8e-5,8.507340e-6,-414.92323e-12,-7.543539e-2,2.0584231e-5,59.13834
1290 84e-8,-413.12409e-12/
1300 t=t+460.
1310 ak=(a(1,i)+a(2,i)*t+a(3,i)*t**2+a(4,i)*t**3)**3.*t
1320 t=t+460.
1330 return
1340 end
1350 subroutine entalp(t,i,hsg)
1360 dimension c(3,5),e(3,5)
1370 data c/-14.50006,-19802223,-2.9048837e-5,-76.553405,2161865,-3-1
1380 8676209e-5,-20.29811,-23005743e-3,8663477e-5,-23.35646,-25077453,-4
1390 8-3917897e-5,-24.37154,-256762,-4.4499694e-5/,-81.79521,389.81919e
1400 8-4,36.6709e-6,147.65414,-1185.2942e-4,152.87778e-6,152.66798,-1153
1410 8-4842e-4,146.64125e-6,130.9667e,-197.98604e-6,82.549947e-6,128.901
1420 852,-2.0590603e-4,84.501496e-6/
1430 t=t+460.
1440 g=(c(1,i)+c(2,i)*t+c(3,i)*t**2)/a**2
1450 h=(e(1,i)+e(2,i)*t+e(3,i)*t**2)**2.
1460 t=t+460.
1470 return
1480 end
1490 subroutine minbt(n,IO)
1500 real L,I
1510 common/t/(L(20),v(20),L1(20),v1(20))
1520 ni=n-1
1530 IF(IO-EO,-1)L(1)=V(2)
1540 do 10 j=2,ni
1550 jf=j-1
1560 jv=j+1
1570 10 L(j)=v(jv)+L(jf)-v(jf)
1580 L(N)=0.
1590 return
1600 end
1610 subroutine balnac
1620 dimension a(20),f(20),ro(20),vt(20),c(20)
1630 real L,I,k
1640 common/t/ap/dti,nc,phi,ysig,lb/flu/fv(20,20),fl(20,20),fw(20,20)
1650 f=fl(20,20)/ret/uc(20,20),uc(20,20)/f/(20),v(20),L1(20),v1(20)
1660 B=eq/k(20,20),a(20,20)/fe/ufsu(20)
1670 FA(B1,B2,B3,B4)=b1/(b2+b3+b4)
1680 ik=n-1
1690 do 10 j=1,n
1700 10 c(j)=1.
1710 TA=FA(U(1),L(1),PHI,dti)
1720 do 20 i=1,nc
1730 IF(IO)100,200,300
1740 100 A(2)=1.0
1750 RO(1)=-(-1.+TA)
1760 DI=0.
1770 GO TO 400
1780 200 A(2)=L(1)/V(1)+K(1,I)
1790 GO TO 500
1800 300 A(2)=L(1)/V(1)

```

```

1810 500 RO(I)=(-1.+A(2)*(1.+TA))
1820 BI=EV0(I,1)
1830 400 f(i)=-c*sig*(fv0(2,i)-f(0(i,i)-d(i)+uc0(i,i)/(phiedt(i))
1840 do 30 j=2,ik
1850 ij=j+1
1860 a(ij)=L(j)/(k(i,j)+v(j))
1870 im=j-1
1880 f(j)=-c*sig*(fv0(ij,i)+f(0(i,i)-fv0(i,i)-f(0(i,i)+uc0(i,i)/(phied
1890 6t(i))
1900 30 ro(i)=-c*(a(ij)+c*(1.+FAUC(j)+L(j)+PHI+DTI))
1910 f(n)=-c*sig*(f(0(i,ik)+fv0(n,i)+uc0(n,i)/(phiedt(i))
1920 ro(n)=-c*(1.+u(n)/v(n))/(phiedt(i)+k(n,i))
1930 call thomas(n,a,b,c,d,x)
1940 if(cid-ne,-1)go to 600
1950 fl(1,i)=wt(i)
1960 fv(1,i)=0.0
1970 go to 700
1980 600 FV(I,1)=V(I)
1990 FL(I,1)=A(2)*FV(I,1)
2000 700 uc(I,i)=u(i)+f(L(I,i))/L(I)
2010 do 40 j=2,ik
2020 ij=j+1
2030 fv(i,j)=vt(j)
2040 f(i,j)=a(ij)+fv(i,j)
2050 40 uc(i,i)=u(i)+f(L(i,i))/L(i)
2060 fv(n,i)=vt(n)
2070 20 uc(n,i)=u(n)+fv(n,i)/(k(n,i)+v(n))
2080 return
2090 end
2100 subroutine thomas(n,a,b,c,d,x)
2110 dimension a(20),b(20),c(20),d(20),f(20),g(20),x(20)
2120 a(1)=0.
2130 do 10 k=1,n
2140 j=k-1
2150 f(k)=c(k)/(b(k)-a(k)+f(j))
2160 10 g(k)=(d(k)-a(k)*g(j))/(b(k)-a(k)+f(j))
2170 x(n)=g(n)
2180 l=n-1
2190 do 20 k=1,l
2200 m=n-k
2210 ij=m+1
2220 20 x(m)=g(m)-f(m)*x(ij)
2230 return
2240 end
2250 subroutine theta(th)
2260 real ix
2270 DIMENSION TX(20),UT(20,20)
2280 common/tlap/dti,n,nc,phi,sig,fd/fe/uf,u(20)/ret/uc(20,20),uc0(20,
2290 20)/eq/k(20,20),a(20,20)/L/x(20,20),t(20)/fa/ix(20)/PI/PI(20)
2300 k/FLU/FV(20,20),FL(20,20),fv0(20,20),f(0(20,20)
2310 nid=id
2320 if(id.eq.1)id=0
2330 if(id.eq.0)go to 5
2340 lp=1
2350 go to 7
2360 5 lp=0
2370 7 nt=n-lp
2380 do 10 j=1,nt
2390 10 tx(j)=1.
2400 call broyde(nt,tx)

```



```

2410      th=0.
2420      do 20 j=1,nt
2430 20      th=th+(tx(j)-1.)**2.
2440      th=sqrt(th)
2450      if(id.eq.0)go to 100
2460      do 30 i=1,nc
2470      do 40 j=1,n
2480 40      ut(j,i)=uc(j,i)/fv(t,i)
2490 70      fv(t,i)=pi(i)+fv(t,i)
2500      lp=1
2510      if(id.eq.1)lp=2
2520      do 70 i=1,nc
2530      do 80 j=l,nt
2540      ij=j+1
2550      if(id.eq.1)ij=j
2560 80      uc(j,i)=tx(ij)*ut(j,i)+fv(t,i)
2570 70      uc(n,i)=tx(1)*ut(n,i)+fv(t,i)
2580 130      do 50 j=1,n
2590      su2=0.0
2600      do 60 i=1,nc
2610 60      su2=su2+uc(j,i)
2620      do 50 i=1,nc
2630 50      x(j,i)=uc(j,i)/su2
2640      fd=ntd
2650      return
2660 100      do 200 j=2,n
2670      do 200 i=1,nc
2680 200      ut(j,i)=uc(j,i)/uc(1,i)
2690      do 300 i=1,nc
2700      uc(1,i)=pi(i)+uc(1,i)
2710      do 300 j=2,n
2720      ij=j-1
2730 300      uc(j,i)=uc(1,i)+tx(ij)*ut(j,i)
2740      go to 130
2750      end
2760      subroutine broyde(n,x)
2770      dimension b(20,20),u(20,20),a(20,20),c(20),h(20,20)
2780      dimension f(20),v(20),af(20),y(20),sax(20)
2790      dimension x(20),z(20)
2800      real med1,med2,nu
2810      pa=0.001
2820      i1=1
2830      i2=0
2840 420      do 10 i=1,n
2850 10      z(i)=x(i)
2860      do 12 i=1,n
2870      z(i)=z(i)+pa
2880      call func(x,n,f)
2890      do 13 j=1,n
2900      a(i,j)=0.
2910 13      b(j,i)=f(j)
2920 12      x(i)=z(i)
2930      call func(x,n,f)
2940      do 14 i=1,n
2950      do 14 j=1,n
2960 14      a(i,j)=(b(i,j)-f(i))/pa
2970      call inver(a,20,n,h)
2980      med1=0.
2990      do 100 i=1,n
3000      med1=(abs(f(i)))+2.*med1

```

```

3010 do 100 j=1,n
3020 h(i,j)=-h(i,j)
3030 100 continue
3040 2 s=1.0
3050 do 16 i=1,n
3060 do 16 j=1,n
3070 16 b(i,j)=0.
3080 do 17 i=1,n
3090 do 17 j=1,n
3100 17 b(i,1)=b(i,1)+h(i,i)*f(j)
3110 do 505 j=1,4
3120 do 310 i=1,n
3130 310 x(i)=x(i)+s*b(i,1)
3140 call func(x,n,a1)
3150 med2=0.
3160 do 21 i=1,n
3170 21 med2=abs(a1(i))*2.*med2
3180 if(med2-[e-1s-10])go to 50
3190 if(med2-[1t-med1])go to 320
3200 nu=med2/med1
3210 s=((1.+6.*nu)**.5-1.)/(3.*nu)
3220 505 continue
3230 go to 420
3240 320 do 23 i=1,n
3250 sax(i)=0.
3260 w(i)=0.
3270 c(i)=0.
3280 y(i)=a1(i)-f(i)
3290 do 23 j=1,n
3300 23 u(i,j)=0.
3310 do 24 i=1,n
3320 do 24 j=1,n
3330 w(i)=w(i)+h(i,j)*y(j)
3340 24 c(i)=c(i)+b(j,1)*h(j,i)
3350 sax=0.
3360 do 26 i=1,n
3370 sax=sax+c(i)*y(i)
3380 26 sax(i)=w(i)+s*b(i,1)
3390 med1=med2
3400 do 27 i=1,n
3410 f(i)=a1(i)
3420 x(i)=x(i)
3430 do 27 j=1,n
3440 27 u(i,j)=(u(i,j)+sax(i)*c(j))/sax
3450 do 28 i=1,n
3460 do 28 j=1,n
3470 28 h(i,j)=h(i,j)-u(i,j)
3480 i1=i+1
3490 go to 8
3500 50 return
3510 end
3520 subroutine inver(a,no,n,ld
3530 dimension a(no,no),c(20,20
3540 real ld(no,no)
3550 do 5 i=1,n
3560 do 5 j=1,n
3570 if(i.eq.j)go to 4
3580 ld(i,j)=0.
3590 go to 5
3600 4 ld(i,j)=1.

```

```

3610 5 continue
3620 do 6 i=1,n
3630 b=a(f,i)
3640 do 7 j=1,n
3650 a(i,j)=a(i,j)/b
3660 7 id(i,j)=id(i,j)/b
3670 do 8 k=1,n
3680 do 8 j=1,n
3690 8 c(k,j)=a(k,j)
3700 do 9 l=1,n
3710 if(l=eq-1)go to 9
3720 do 15 j=1,n
3730 a(l,j)=c(i,i)*a(l,j)-c(l,i)*a(i,j)
3740 15 id(l,j)=c(i,i)*id(l,j)-c(l,i)*id(i,j)
3750 9 continue
3760 6 continue
3770 return
3780 end
3790 subroutine func(th,nt,g)
3800 real ix,t,1
3810 dimension g(20),th(20)
3820 common/lap/dti,n,nc,phi,si,q,10/fe/fu,u(20)/re/uc(20),uc(20),
3830 s20/ra/ix(20)/pi/fi(20)/flu/fv(20),FL(20),FV(20),FLO(
3840 s20,20)/FT/L(20),V(20),L1(20),V1(20)
3850 s1=0
3860 if(id=nc-1)go to 50
3870 do 10 i=1,nc
3880 s0=0
3890 do 20 j=2,n
3900 ij=j-1
3910 20 s0=s0+th(ij)*uc(j,i)
3920 pi(i)=u+ix(i)/(uc(1,i)+s0)
3930 10 s1=s1+pi(i)*uc(1,i)
3940 g(1)=s1/u(1)-1
3950 do 30 j=2,nt
3960 s2=0
3970 ij=j-1
3980 do 40 i=1,nc
3990 40 s2=s2+th(ij)*pi(i)*uc(i,j)
4000 30 g(j)=s2/u(j)-1
4010 100 return
4020 50 LP=1
4030 IF(ID=EQ-1)LP=0
4040 DO 60 I=1,NC
4050 S0=0
4060 S2=0
4070 DO 70 J=1,N
4080 70 S0=S0+UC0(J,I)
4090 DO 80 J=2,NT
4100 IJ=J-1P
4110 80 S2=S2+TH(IJ)*UC(IJ,I)
4120 PI(I)=[-SIG+FV0(I,I)+S0/(PHI+DTI)]/CFV(I,I)+CS2+TH(I)*UC(N,I)]/CPH
4130 81=DTI)
4140 60 S1=S1+PI(I)+FV(1,I)
4150 G(1)=S1/V(1)-1
4160 DO 90 J=2,NT
4170 s1=0
4180 ij=j-1p
4190 DO 110 I=1,NC
4200 110 s1=s1+PI(I)+TH(IJ)*UC(IJ,I)

```

Programme. I D B A

```

4210 90      G(J)=S2/U(J)-1.
4220      GO TO 100
4230      END
4240      subroutine kab
4250      real kb(20),k
4260      common/rea/te(3),ib/eq/k(20,20),al(20,20)/l(f/x(20,20),s(20)/w/y(2
4270      0,20)/t/lap/dti,n,h,c,phi,sig,ib/cal/hw(20,20),hl(20,20),hw0(20,20)
4280      do 10 j=1,n
4290      s1=0.
4300      do 20 i=1,nc
4310 20      s1=s1+al(j,i)*x(i,j)
4320      kb(j)=t./s1
4330      BK=KB(J)
4340      TA=TE(2)
4350      CALL MN(TA,BK,TA)
4360      T(J)=TM
4370      do 10 i=1,nc
4380      call sk(tm,i,AK)
4390      k(j,i)=ak
4400 10      y(j,i)=x(j,i)*k(j,i)
4410      DO 30 I=1,NC
4420      IF(ID)100,TO,200
4430 100      v(I,i)=0.
4440      GO TO 30
4450 200      v(I,i)=x(I,i)
4460 30      CONTINUE
4470      return
4480      end
4490      subroutine ballot
4500      real l,l1
4510      common/tlap/dti,n,nc,phi,sig,ib/cal/hw(20,20),hl(20,20),hw0(20,20)
4520      s,hL0(20,20)/l(f/x(20,20),t(20)/w/y(20,20)/ct/qr,qc,qr0,qc0/ret/uc(
4530      k(20,20),uc0(20,20)/ft/l(20),w(20),l1(20),wt(20)/ft/uf/v(20,20),fl(20
4540      l,20),fv0(20,20),f10(20,20)/FE/UF,U(20)
4550      do 10 i=1,nc
4560      call entalp(tm,i,ev,el)
4570      IF (I)7,7,9
4580 5      HV(1,i)=0.
4590      GO TO 10
4600 7      HV(1,i)=EV
4610      GO TO 10
4620 9      HV(1,i)=EL
4630 10      HL(1,i)=EL
4640      DO 15 J=2,n
4650      TM=T(J)
4660      DO 15 I=1,NC
4670      CALL ENTALP(TM,I,EV,EL)
4680      HV(J,i)=EV
4690 15      HL(J,i)=EL
4700      s2=0.0
4710      s3=0.0
4720      s4=0.0
4730      s5=0.0
4740      IF(ID=EQ.-1)60 TO 25
4750      s1=0.
4760      s6=0.
4770      DO 80 I=1,NC
4780      S1=S1+Y(2,I)*(HV(2,I)-HL(1,I))
4790      S2=S2+Y(1,I)*(HV(1,I)-HL(1,I))
4800      S3=S3+FV0(2,I)*(HV0(2,I)-HL(1,I))

```

```

4820 S4=S4+FLO(1,I)*(HLO(1,I)-HL(1,I))
4830 S5=S5+FVO(1,I)*(HVO(1,I)-HL(1,I))
4830 20 S6=S6+UCO(1,I)*(HLO(1,I)-HL(1,I))
4840 QR=V(2)*S1-V(1)*S2+SIG*(S3-S4-S5-QR0)+S6/(PHI*DTI)
4850 GO TO 45
4860 25 DO 20 J=1,N
4870 X1=0.0
4880 DO 30 I=1,NC
4890 S1=S1+UC(J,I)*HL(J,I)-UCO(J,I)*HL(I,J,I)
4900 20 S2=S2+S1
4910 QR=QR+SIG*(QR0-QR0)-S2/(PHI*DTI)
4920 DO 40 I=1,NC
4930 S3=S3+FVO(2,I)*(HVO(2,I)-HL(I,I,I))-FLO(1,I)*(HLO(1,I)-HL(1,I,I))
4940 S4=S4+UCO(1,I)*(HLO(1,I)-HL(1,I,I))
4950 40 S5=S5+Y(2,I)*(HVO(2,I)-HL(1,I,I))
4960 V(2)=(QR-SIG*(S3-QR0)+S4/(PHI*DTI))/S5
4970 L(I)=V(2)
4980 45 IK=N-1
4990 DO 50 J=2,IK
5000 IJ=J+1
5010 IM=J-1
5020 DO 60 I=1,NC
5030 S1=S1+Y(I,I)*(HVO(I,I)-HL(I,I,I))
5040 S2=S2+X(IM,I)*(HLO(I,I)-HL(IM,I,I))
5050 S3=S3+FVO(IJ,I)*(HVO(IJ,I)-HL(IJ,I,I))+FLO(IM,I)*(HLO(IM,I)-HL(IJ,I,I))-
5060 FVO(I,I)*(HVO(I,I)-HL(I,I,I))-FLO(I,I)*(HLO(I,I)-HL(I,I,I))
5070 S4=S4+UCO(I,I)*(HLO(I,I)-HL(I,I,I))
5080 60 S5=S5+Y(IJ,I)*(HVO(IJ,I)-HL(I,I,I))
5090 50 V(IJ)=(V(IJ)*S1+L(IM)*S2-SIG*(S3+S4/(PHI*DTI)))/S5
5100 DO 70 J=2,IK
5110 IJ=J+1
5120 IM=J-1
5130 70 L(IJ)=V(IJ)+L(IM)-V(IJ)
5140 IF(IN-EQ.-1)GO TO 120
5150 S1=0.0
5160 S2=0.0
5170 S3=0.0
5180 S4=0.0
5190 S5=0.0
5200 DO 100 I=1,NC
5210 S1=S1+Y(N,I)*(HLO(IK,I)-HVO(N,I))
5220 S2=S2+FLO(IK,I)*(HLO(IK,I)-HL(IK,I,I))
5230 S3=S3+FVO(N,I)*(HVO(N,I)-HL(N,I,I))
5240 S4=S4+UC(N,I)*(HLO(N,I)-HL(IK,I,I))
5250 100 S5=S5+UCO(N,I)*(HLO(N,I)-HL(IK,I,I))
5260 QR=-V(N)*S1-SIG*(S2-S3+QR0)+(S4-S5)/(PHI*DTI)
5270 120 DO 130 I=1,NC
5280 IF(CID-EQ.-1)GO TO 140
5290 FV(1,I)=V(1)*Y(1,I)
5300 GO TO 130
5310 140 FV(1,I)=0.0
5320 130 F(I,I)=L(I)*X(1,I)
5330 DO 150 J=2,IK
5340 DO 150 I=1,NC
5350 FV(J,I)=V(J)*Y(J,I)
5360 150 F(I,J)=L(J)*X(J,I)
5370 FV(N,I)=V(N)*Y(N,I)
5380 F(N,I)=0.0
5390 RETURN
5400 END

```

```

5430 SUBROUTINE MN(X,BK,KR)
5420 COMMON/REC/TE(3),IB
5430 DX=1.E-3
5440 TO=1.E-6
5450 20 CALL SK(X,IB,BK)
5460 AK=AK-BK
5470 IF(CABS(AK).LE.TO)GO TO 10
5480 X1=X+DX
5490 CALL SK(X1,IB,BK)
5500 BK=BK-BK
5510 X=X-DX/(BK/AK-1.)
5520 GO TO 20
5530 10 KR=X
5540 RETURN
5550 END
5560 subroutine PROC(TH,IC,TRP,P,ITER,IC0,P,D,LI,D,DRP,t,t1,dtot,
5570 E)
5580 real L,LI,k
5590 DIMENSION T3(20)
5600 common/tlap/def,n,nc,phi,sig,I0,t0,t1(20),f(x(20,20),t(20)/T)
5610 &L(20),V(20),L1(20),y1(20)/f1/fv(20,20),fL(20,20),fv(20,20)
5620 t1,f1D(20,20)/y1/y(20,20)/f1uf,u(20)/rec/te(3),ib/eq/k(20,20)
5630 E,yt(20,20)
5640 ITER=ITER+1
5650 IF(ITER.EQ.1)GO TO 700
5660 if(th.le.1.e-4)go to 100
5670 TO=0.0
5680 DO 20 J=1,N
5690 20 TO=TO+((T(J)-T1(J))/T(J))**2.
5700 TO=SQRT(TO)
5710 IF(TO.LE.1.E-6)GO TO 100
5720 IF(ITER.EQ.10)GO TO 100
5730 GO TO 700
5740 100 DO 105 J=1,n
5750 DO 105 I=1,nc
5760 105 a1(i,i)=k(j,i)/k(j,ib)
5770 tco=t
5780 ti=dti+ti
5790 IF(Ib.EQ.-1)GO TO 480
5800 dtot=dtot+v(1)*dti
5810 if(u(n).le.0.) go to 800
5820 IF(dtot.GE.DMP)GO TO 450
5830 IPR=0
5840 call impre(1,0,im,ipr,p,dtot,t,ti)
5850 RETURN
5860 450 IPR=1
5870 tco=0
5880 call impre(i,0,im,ipr,p,dtot,t,ti)
5890 RETURN
5900 800 ipr=-1
5910 tco=0
5920 call impre(1,0,im,ipr,p,dtot,t,ti)
5930 return
5940 480 if(ti.eq.dti)go to 272
5950 tea=0.
5960 DO 10 J=1,n
5970 10 tea=tea+((t(j)-t1(j))/T(J))**2.
5980 tea=SQRT(tea)
5990 if(tea.le.1.e-4)go to 300
6000 if(tc.eq.t)go to 400

```

```

6010 100  ipr=0
6020 200  call fapre(1,1,im,ipr,p,dtot,t,i)
6030      return
6040 100  ipr=1
6050      go to 2020
6060 400  if(t1.LE=tmp)go to 500
6070      ipr=-1
6080 1020  call imre(1,1,im,ipr,p,dtot,t,i)
6090      go to 2000
6100 700  iff=-1
6110      DO 70 J=1,N
6120 70   T3(J)=T(J)
6130      RETURN
6140 2000  IF(L1D)60,80,90
6150 60   ICO=0
6160      GO TO 200
6170 80   ID=0
6180      GO TO 2100
6190 90   ID=1
6200 2100  IPR=0
6210      V(1)=PD*L(1)
6220      V(2)=L(1)
6230      L(1)=(1.-PP)*L(1)
6240      call imre(1,1,im,ipr,p,dtot,t,i)
6250      RETURN
6260 212  call impre(0,0,im,0,p,dtot,t,i)
6270      return
6280      END
6290      subroutine pre(t1,dtot)
6300      DIMENSION IM(3)
6310      real L,L1,k
6320      common /t1ap/dt1,n,nc,phi,sign,IO/cal/hv(20,20),hL(20,20),hv0(2
6330 80,20),hL0(20,20)/eq/k(20,20),al(20,20)/lf/x(20,20),z(20)/ftu/fv(20
6340 L,20),fl(20,20),fv0(20,20),f(20,20)/ret/uc(20,20),uc0(20,20)/ft/L
6350 t(20),v(20),t1(20),v1(20)/fe/uf,u(20)/ct/qr,qc,qf0,qc0/ret/te(
6360 8),ib/ugh/zh/wf/y(20,20)
6370      IM(1)=1
6380      IM(2)=2
6390      IM(3)=N
6400      print 5,dt1,sign,t1
6410      print 6,tb,dtot
6420      print 8,qc,qr
6430      do 30 J=1,n
6440      print 100,(J),v(J)
6450      print 110,t1(J),v1(J)
6460      print 120,t(J),u(J)
6470      sx=0
6480      print 130,(hv0(J,i),hL0(J,i),i=1,nc)
6490      print 140,(hv(J,i),hL(J,i),i=1,nc)
6500      print 150,(fL0(J,i),fv0(J,i),i=1,nc)
6510      print 160,(fL(J,i),fv(J,i),i=1,nc)
6520      print 170,(al(J,i),k(J,i),i=1,nc)
6530      print 180,(uc(J,i),uc0(J,i),i=1,nc)
6540 70   print 190,(x(J,i),y(J,i),i=1,nc)
6550      forst(1)
6560      forst(2x,"dt1,sign",4x,2(f10.4,2x),"t1empo (min)",2x,f10.4)
6570 100  format(2x,"l(J),v(J)",4x,2(f10.4,2x))
6580 110  format(2x,"t1(J),v1(J)",2x,2(f10.4,2x))
6590 120  format(2x,"t(J),u(J)",4x,2(f10.4,2x))
6600 130  format(2x,"hv0(j,i),hL0(j,i)",2x,6(f10.4,2x))

```

```

6610 140 format(2x,'hw(j,i),hl(j,i)',4x,6(f10.4,2x))
6620 150 format(2x,'f10(j,i),fv(j,i)',2x,6(f10.4,2x))
6630 160 format(2x,'f1(j,i),fv(j,i)',4x,6(f10.4,2x))
6640 170 format(2x,'al(j,i),ak(j,i)',5x,6(f10.4,2x))
6650 180 format(2x,'uc(j,i),uc0(j,i)',3x,6(f10.4,2x))
6660 6 format(2x,'th= ',12x,g10.4,2x,'dest-tot= ',2x,f10.4)
6670 190 format(2x,'x(j,i),y(j,i)',2x,6(f10.4,2x))
6680 8 format(2x,'qc,qr',2g10.4)
6690 return
6700 end
6710 subroutine inpre(ep,es,ew,ex,fp,Padtot,t)
6720 character*11 en(20)
6730 real l,i,j,k,ix
6740 integer ep,es
6750 common/llap/delan,ot,phisig,ld/cst/hw(20,20),hl(20,20),hw0(2
6760 0,20),h10(20,20)/eq/k(20,20),a1(20,20)/f/x(20,20),t(20)/fluffv(20
6770 0,20)/f1(20,20)/fv0(20,20)/f10(20,20)/ret/uc(20,20),uc0(20,20)/fe/f
6780 x(20),w(20),t1(20),w1(20)/fe/uf,au(20)/ct/qr,qc,qr0,uc0/ret/te(5
6790 0),ib/ugh/th/vfy(20,20)/fa/ix(20)/nom/zn
6800 character*50 s0(5)
6810 character*11 s1(9)
6820 character*30 s2(7)
6830 if(ep.eq.1)go to 1000
6840 s1(1)='Elab. por ='
6850 s1(2)='
6860 s1(3)='Lugar ='
6870 s1(4)='FERRICOS ='
6880 s1(5)='FLUJO ='
6890 s1(6)='PROCESO ='
6900 s1(7)='no.platos ='
6910 s1(8)='dif.tiempo ='
6920 s1(9)='pres.psa ='
6930 s2(1)='temperatura F'
6940 s2(2)='carga del rehervidor btu/min'
6950 s2(3)='alimentacion total l6/min'
6960 s2(4)='numero de compuestos'
6970 s2(5)='retencion por plato lb'
6980 s2(6)='retenc.del rehervidor lb'
6990 s2(7)='retenc.del condensad. lb'
7000 s0(1)=' MARCO ANTONIO RUIZ G. ; VICTOR MANUEL CORONA S.'
7010 s0(2)='
7020 s0(3)=' ENEP ZARAGOZA UNAM. MEXICO, D.F., Fecha= 1987'
7030 s0(4)=' TORRE DE DESTILACION POR LOTE'
7040 s0(5)=' Datos para simulacion : Alimentacion a la torre'
7050 tt=0.
7060 print 20
7070 print 21,s0(4)
7080 print 22
7090 print 20
7100 print 23,(s1(i),s0(i),i=1,9)
7110 print 20
7120 print 21,s0(5)
7130 print 20
7140 print 24,s1(4)
7150 print 26,s2(1),te(2)
7160 print 26,s2(2),qr
7170 print 24,s1(5)
7180 print 26,s2(3),uf
7190 print 33,s2(4),nc
7200 print 26,s2(5),uc(2)

```



```

7210 print 26,s2(6),su(n)
7220 print 26,s2(7),su(1)
7230 print 27
7240 print 28
7250 do 5 i=1,nc
7260 5 print 19,i,an(i),ix(i)
7270 print 24,s1(6)
7280 print 25,s1(7),s1(8),dti,s1(9),p
7290 go to 1005
7300 1000 tt2=abs(tt1-tt)
7310 if(tt2<tt5)go to 3200
7320 tt1=tt
7330 1005 if(id-ne-1)go to 1500
7340 if(es.eq.7) go to 2000
7350 s0(1)=" Resultado del Periodo de Arranque
7360 1100 print 20
7370 print 21,s0(1)
7380 go to 2000
7390 1500 s0(1)=" Resultado del Periodo de Producto
7400 if(es.eq.0) go to 2000
7410 go to 1100
7420 2000 s2(3)="carga del condensador btu/min:"
7430 s2(4)="tiempo transcurrido minutos:"
7440 print 20
7450 print 20
7460 print 20
7470 print 26,s2(4),ti
7480 print 26,s2(2),qr
7490 print 26,s2(3),qc
7500 if(ii.eq.1) go to 2500
7510 j=1
7520 2100 call pres(j,dtot)
7530 if(j.eq.n) go to 3000
7540 j=n
7550 go to 2100
7560 2500 do 2600 i=1,n
7570 2600 call pres(j,dtot)
7580 3000 if(i.pr) 3100,3200,3300
7590 3100 if(id.eq.-1) go to 3150
7600 s0(3)="Carga del rehervidor agotada
7610 go to 3160
7620 3150 tt1=0
7630 s0(3)="Lisite del tiempo de proceso excedido
7640 3160 print 20
7650 s0(1)=" Resultado del Periodo de Arranque
7660 print 21,s0(1)
7670 s2(5)=" simulacion terminada :
7680 print 22,s2(5)
7690 print 21,s0(3)
7700 s2(4)="tiempo transcurrido minutos:"
7710 print 26,s2(4),ti
7720 print 20
7730 go to 3400
7740 3200 return
7750 3300 if(id.eq.-7) go to 3350
7760 print 20
7770 print 21,s0(1)
7780 s2(5)=" simulacion terminada :
7790 s0(3)="produccion de destilado alcanzada
7800 s1(3)="destil. lb."

```

```

7210 print 26,s2(6),u(n)
7220 print 26,s2(7),u(1)
7230 print 27
7240 print 28
7250 do 5 i=1,nc
7260 5 print 19,i,an(i),ix(i)
7270 print 24,s1(6)
7280 print 25,s1(7),n,s1(8),dti,s1(9),p
7290 go to 1005
7300 1000 tt2=abs(ti-tt1)
7310 if(tt2<(tt-5))go to 3200
7320 tt1=ti
7330 1005 if(id-ne=-1)go to 1500
7340 if (es=eq-1) go to 2000
7350 s0(1)=" Resultado del Periodo de Arranque
7360 1100 print 20
7370 print 21,s0(1)
7380 go to 2000
7390 1500 s0(1)=" Resultado del Periodo de Producto
7400 if(es=eq-0) go to 2000
7410 go to 1100
7420 2000 s2(3)="carga del condensador btu/min="
7430 s2(4)="tiempo transcurrido minutos="
7440 print 20
7450 print 20
7460 print 20
7470 print 26,s2(4),ti
7480 print 26,s2(2),qr
7490 print 26,s2(3),qc
7500 if(i=cc-1) go to 2500
7510 j=1
7520 2100 call pres(j,dtot)
7530 if(j=eq-n) go to 3000
7540 j=n
7550 go to 2100
7560 2500 do 2600 j=1,n
7570 2600 call pres(j,dtot)
7580 3000 i(ipr) 3100,3200,3300
7590 3100 if(id=eq-1) go to 3150
7600 s0(3)="carga del rehervidor agotada
7610 go to 3160
7620 3150 tt1=0
7630 s0(3)=" Limite del tiempo de proceso excedido
7640 3160 print 20
7650 s0(1)=" Resultado del Periodo de Arranque
7660 print 21,s0(1)
7670 s2(5)=" simulacion terminada =
7680 print 22,s2(5)
7690 print 21,s0(3)
7700 s2(4)=" tiempo transcurrido minutos="
7710 print 26,s2(4),ti
7720 print 20
7730 go to 3600
7740 return
7750 3200 if(id=eq-1) go to 3350
7760 print 20
7770 print 21,s0(1)
7780 s2(5)=" simulacion terminada =
7790 s0(3)=" produccion de destilado alcanzada
7800 s1(3)=" destil- lb="

```

Programa

T D B A

```

7810 print 32,s2(5)
7820 print 21,s0(3)
7830 print 30,s1(7),dtot
7840 print 20
7850 go to 3400
7860 3350 ttf=0
7870 print 20
7880 s0(1)="Resultado del Periodo de Arranque"
7890 print 21,s0(1)
7900 s2(5)="simulacion terminada ="
7910 s0(3)="se alcanza el estado estacionario"
7920 print 32,s2(5)
7930 print 21,s0(3)
7940 print 20
7950 19 format (/,"Tx,Th=","t17,"i2,5x,"a17,5x,"f10,4,"t80,Th=)
7960 20 format (/,"40(2h=)")
7970 21 format (/,"Tx=","t17,"a50,"t80,"=")
7980 22 format (/,"ix=","t15,"SIMULACION,"t70,"=")
7990 23 format (/,"ix=","t7,"a11,"a50,"t80,"=")
8000 24 format (/,"ix=","t7,"a11,"t80,"=")
8010 25 format (/,"ix,Th=","t17,"a11,"f3,2("x,"a11,"f9,3),"t80,Th=)
8020 26 format (/,"ix,Th=","t17,"a30,"f10,4,"t80,Th=)
8030 27 format (/,"ix,Th=","t17,"a30,"f3,"t80,Th=)
8040 27 format (/,"ix,Th=","t17,"no,"t27,"composicion,"t80,Th=)
8050 28 format (/,"ix,Th=","t16,"comp," nombre,"t37,"alimentacion,"t80,Th=)
8060 29 format (/,"ix,Th=","t17,"i2,t22,"a10,"t34,"f9,4,"t80,Th=)
8070 30 format (/,"ix,Th=","t7,"a11,"f10,4,"t80,Th=)
8080 31 format (/,"ix,Th=","t3,"a50,"a30)
8090 32 format (/,"ix,Th=","t17,"a30,"t80,Th=)
8100 3400 end
8110 subroutine pres(j,dtot)
8120 character*61 a0(2)
8130 character*11 a1(2)
8140 character*35 a2(2)
8150 character*30 s
8160 real L,L1,k
8170 common/tlap/dt,n,nc,phi,sig,ld/cat/hv(20,20),hl(20,20),hv0(2
8180 20,20),shl0(20,20)/eq/k(20,20),a1(20,20)/f/x(20,20),t(20)/f(u/fv(20
8190 ,20),f1(20,20),fv0(20,20),f10(20,20)/ret/uac(20,20),uc0(20,20)/f/(
8200 &(20),v(20),l1(20),v1(20)/fe/uf,u(20)/ct/qr,qc,qr0,qc0/rec/te(3
8210 8),ib/ugh/th/vf/y(20,20)
8220 if (id.eq.0) s="condensador parcial"
8230 if (id.ne.0) s="condensador total"
8240 sumx=0.0
8250 sumy=0.0
8260 suml=0.0
8270 sumv=0.0
8280 sumu=0.0
8290 a1(1)="plato no ="
8300 a1(2)="temp. F ="
8310 a0(1)="No,comp," x(5) Y(5) L(5) V(5) UC
8320 &(1)
8330 a0(2)="no.comp," K(5) ALFA HL(1) HV(5)
8340 s"
8350 a2(1)="COMPOSICIONES FLUJOS Y RETENCIONES"
8360 a2(2)="DATOS TERMODINAMICOS"
8370 print 20
8380 print 35,a1(1),j,s
8390 print 30,a1(2),t(j),dtot
8400 print 20

```

Programa

T D B A

```

8410 print 40,a2(1)
8420 print 45,a0(1)
8430 do 15 i=1,nc
8440 print 50,i,x(j,i),y(j,i),FL(j,i),FV(j,i),uc(j,i)
8450 sumx=x(j,i)+sumx
8460 sumy=y(j,i)+sumy
8470 suml=fl(j,i)+suml
8480 sumv=fv(j,i)+sumv
8490 sumu=uc(j,i)+sumu
8500 print 55,sumx,sumy,al(i),v(i),sumu
8510 print 20
8520 print 40,a2(2)
8530 print 45,a0(2)
8540 do 21 i=1,nc
8550 print 60,i,x(j,i),al(j,i),bl(j,i),hv(j,i)
8560 format(/,ix,1h=:t7,a11,f10.4,6x,"best=(bnol)=",f10.4,t80,1h=)
8570 format(/,ix,1h=:t7,a11,i5,t7x,a50,t80,1h=)
8580 format(/,ix,1h=:t25,a35,t80,1h=)
8590 format(/,40(2h=))
8600 format(/,ix,1h=:t15,i3,2(3x,t6.3),7(3x,t10.4),t80,1h=)
8610 format(/,ix,1h=:t11,a61,t80,1h=)
8620 format(/,ix,1h=:t11,"TOTALES x=",t6.3,1x,"y=",t6.3,1x,"L=",
8630 f10.4,1x,"V=",f10.4,1x,"U=",f10.4,t80,1h=)
8640 format(/,ix,1h=:t15,i3,2x,4(3x,t10.4),t80,1h=)
8650 return
8660 end

```

TORRE DE DESTILACION POR LOTE  
SIMULACION

ELAB. POR : MARCO ANTONIO RUIZ G. : VICTOR MANUEL CORONA S.

LUGAR : ENEP ZARAGOZA UNAM- MEXICO, D.F., FECHA: 1987

DAIOS PARA SIMULACION : ALIMENTACION A LA TORRE

TECNICOS :

TEMPERATURA F = 269-1450

CARGA DEL REMERVIDOR STU/MIN: 5033.3330

FLUJO :

ALIMENTACION TOTAL LBHOL : 50.0000

NUMERO DE COMPUESTOS : 5

RETENCION POR PLATO LBHOL : 1.0000

RETENC-DEL REMERVIDOR LBHOL : 34.0000

RETENC-DEL CONDENSAD. LBHOL : 4.0000

NO. COMPOSICION

COMP.	NOMBRE	ALIMENTACION
1	PROPANO	-0500
2	ISOBUTANO	-1500
3	BUTANO	-2500
4	ISOPENTANO	-2000
5	PENTANO	-3500

PROCESO :

NO-PLATOS = 14 DIF-TIEMPO = 100 PRES-PSIA = 300.000



PLATO NO. = 14 CGNOCENSADOR TOTAL

TEMP. F = 269-1683 DEST. BLEM X = .0000

COMPOSICIONES FLUJOS Y RETENCIONES

NO. COMP.	X(I)	Y(I)	L(I)	V(I)	U(I)
1	.050	.124	.0000	-.0975	1.6965
2	.150	.221	.0000	-.1740	5.0966
3	.250	.304	.0000	-.2390	8.4974
4	.200	.140	.0000	-.1697	6.4079
5	.350	.211	.0000	-.1654	11.9066
TOTALES	X = 1.000	Y = 1.000	L = .0000	V = .8068	U = 34.0000

DATOS TERMODINAMICOS

NO. COMP.	K(I)	ALFA	HL(I)	HV(I)
1	2.4854	2.0428	13098.7380	16799.5854
2	1.4767	1.2137	15463.1404	20309.4910
3	1.2167	1.0000	16203.3916	21470.6604
4	.6973	.5731	18418.8481	25735.5705
5	.6027	.4553	18999.8121	26584.7266

TIEMPO TRANSCURRIDO MINUTOS: 187.7677

CARGA DEL REFRIGERANTE BTU/MIN: 5833.3330

CARGA DEL CONDENSADOR BTU/MIN: 5031.0590

PLATO NO. = 1

CONDENSADOR TOTAL

TEMP. F = 175.3447

DEST. (LEACL) = .0000

COMPOSICIONES FLUJOS Y RETENCIONES

NO. COMP.	X(I)	Y(I)	L(I)	V(I)	U(I)
1	.458	.000	.4431	.0000	1.8319
2	.409	.000	.3956	.0000	1.4356
3	.133	.000	.1288	.0000	.5329
4	.000	.000	.0001	.0000	.0003
5	.000	.000	.0000	.0000	.0001
TOTALES X=	1.000	Y=	.000	L=	.9675
				V=	.0000
				U=	4.0000

DATOS TERMODINAMICOS

NO. COMP.	K(I)	ALFA	HL(I)	HV(I)
1	1.3873	2.5119	9917.4475	14710.0066
2	.7123	1.2897	11664.2629	17971.5981
3	.5523	1.0000	12157.4170	19203.1985
4	.2600	.4253	13691.5885	23015.9858
5	.2218	.4016	14336.8298	23965.5400



PLATO NO. - 14		CONDENSADOR TOTAL			
TEMP. F = 302.2468		DIST. (L)MCL I = -0000			
COMPOSICIONES FLUJOS Y RETENCIONES					
NO. COMP.	X (I)	Y (I)	L (I)	V (I)	U (I)
1	.000	.000	.0000	.0000	.0017
2	.099	.079	.0000	.0678	1.5014
3	.198	.297	.0000	.2547	6.7390
4	.272	.243	.0000	.2089	9.3331
5	.485	.381	.0000	.3764	16.4246
TOTALES X =	1.000	Y = 1.000	L = .0000	V = .8574	U = 34.0000
DATOS TERMODINAMICOS					
NO. COMP.	K (I)	ALFA	HL (I)	HV (I)	
1	2.8958	1.9336	14295.5011	17609.1120	
2	1.7904	1.1955	16885.8992	21354.1372	
3	1.5975	1.0000	17562.2852	22483.6204	
4	1.5905	.5986	20113.2234	26803.0718	
5	1.7829	.5228	20792.9280	27429.1070	
RESULTADO DEL PERIODO DE ARRANQUE					
SIMULACION TERMINADA					
LIMITE DEL TIEMPO DE PROCESO EXCEDIDO					
TIEMPO TRANSCORRIDO MINUTOS = 187.7677					

RESULTADO DEL PERIODO DE PRODUCTO

TIEMPO TRANSCURRIDO MINUTOS: 207.7677

CARGA DEL REFRIGERADOR BTU/MIN: 5978.6487

CARGA DEL CONDENSADOR BTU/MIN: 4639.3542

PLATO NO. : 1

CONDENSADOR PARCIAL

TEMP. F : 197.1193

DEST. USMOL : 3.8699

COMPOSICIONES FLUJOS Y RETENCIONES

NO. COMP.	X (I)	Y (I)	L (I)	V (I)	U (I)
1	-216	-351	-1672	-0678	-8639
2	-518	-449	-4007	-0869	2.7710
3	-266	-182	-2055	-0351	1.7622
4	-001	-000	-0004	-0000	-0023
5	-000	-000	-0001	-0000	-0007
TOTALES	X = 1.000	Y = .982	L = .7740	V = .1935	U = 4.0000

DATOS TERMODINAMICOS

NO. COMP.	K (I)	ALFA	HL (I)	HV (I)
1	1.6234	2.3737	10625.6504	15168.4027
2	-8676	1.2685	12525.0558	18436.1323
3	-6839	1.0000	13037.5455	19653.8844
4	-3473	.5078	14902.0981	23593.6768
5	-2931	.0256	15376.5162	24529.8624

PLATO NO. : 1A		CONDENSADOR PARCIAL				
TEMP. F : 328.6021		DEST. (LB/MCL) : 19.3497				
COMPOSICIONES FLUJOS Y RETENCIONES						
NO. COMP.	X(I)	Y(I)	L(I)	V(I)	U(I)	
1	.000	.000	.0000	.0000	.0000	
2	.002	.005	.0000	.0007	.0350	
3	.030	.052	.0000	.0528	.4655	
4	.294	.313	.0000	.3223	1.3407	
5	.674	.632	.0000	.6526	10.4231	
TOTALES X= 1.000 Y= 1.002 L=			.0000 V=	.9886 U=	15.4643	
DATOS TERMODINAMICOS						
NO. COMP.	K(I)	ALFA	HL(I)	HV(I)		
1	3.2150	1.8593	15275.8262	10285.945		
2	2.0472	1.1839	18051.7717	22277.1311		
3	1.7294	1.0000	18792.2401	23376.1862		
4	1.0670	.6171	21497.2659	27785.8319		
5	.9384	.5427	22164.7264	28511.2738		

TIEMPO TRANSCURRIDO MINUTOS: 297.7677

CARGA DEL REHEVADOR LTU/MIN: 6552.5716

CARGA DEL CONDENSADOR ETU/MIN: 5293.5560

PLATO NO. : 1 CONDENSADOR PARCIAL

TEMP- F : 276.3478 DEST. (LBMCL) : 21.2847

COMPOSICIONES FLUJOS Y RETENCIONES

NO. COMP.	X(I)	Y(I)	L(I)	V(I)	U(I)
1	.000	.005	.0001	.0001	.0005
2	.071	.110	.0551	.0213	.0848
3	.432	.551	.3342	.1066	1.7273
4	.277	.205	.2148	.0397	1.1100
5	.219	.146	.1698	.0272	.4775
TOTALES	X= 1.000	Y= 1.007	L= .7790	V= .1935	U= 4.0000

DA TOS TERMODINAMICOS

NO. COMP.	K(I)	ALFA	HL(I)	HV(I)
1	2.5745	2.0174	13354.7294	16971.5696
2	1.5434	1.2094	15767.4225	20525.3853
3	1.2762	1.0000	16420.0027	21680.0599
4	.7387	.5788	18781.7075	25968.4790
5	.6400	.5015	19375.1733	26805.4604

PLATO NO. : 14		CONDENSADOR PARCIAL					
TEMP. F : 330.2959		DEST. (LBMCL) = 21.2847					
COMPOSICIONES FLUJOS Y RETENCIONES							
NO. COMP.	X(I)	Y(I)	L(I)	V(I)	U(I)		
1	.000	.000	.0000	.0000	.0000		
2	.001	.002	.0000	.0025	.0157		
3	.019	.033	.0000	.0349	.2588		
4	.285	.307	.0000	.3250	3.8531		
5	.695	.659	.0000	.6998	9.3994		
TOTALES X =		1.000	Y = 1.002	L =	.0000	V = 1.0126	U = 13.9270
DATOS TERMODINAMICOS							
NO. COMP.	K(I)	ALFA	HL(I)	HW(I)			
1	3.2351	1.8549	15339.5974	18328.2053			
2	2.0638	1.1833	18127.6260	22339.2869			
3	1.7441	1.0000	18869.8049	23438.3750			
4	1.0782	.6182	21587.1741	27848.2847			
5	.9086	.5439	22257.0854	28569.4414			
RESULTADO DEL PERIODO DE PRODUCTO							
SIMULACION TERMINADA :							
PRODUCCION DE DESTILADO ALCANZADA							
DESTIL. LB:		21.2847					
END PROGRAM EXECUTION							

N O T A C I O N  
(para el programa TDBA)

AL(j,i)	Volatilidad del componente i en el plato j con respecto al componente clave IB
AN(I)	Nombre del componente I
DMP	Cantidad máxima de destilado extraído de la torre (lbmol)
DTI	Diferencial de tiempo, o tamaño del período de tiempo en estudio (min)
DTOT	Cantidad de destilado extraído hasta el tiempo TI(lbmol)
EP	Parámetro de selección de página
ES	Parámetro de selección de encabezado secundario en la subrutina (IMPRE)
FLO(J,I)	Flujo parcial de líquido del componente I en el plato J al inicio del período de tiempo (lbmol/min)
FL(J,I)	Flujo parcial de líquido del componente I en el plato J al final del período de Tiempo (lbmol/min)
FVO(J,I)	Flujo de vapor del componente I en el plato J al inicio del período de tiempo (lbmol/min)
FV(J,I)	Flujo de vapor del componente I en el plato J al final del período de tiempo (lbmol/min)
G(J)	Función g del método Theta
HLO(J,I)	Entalpía parcial de líquido para el componente I en el plato J al inicio del período de tiempo (btu/min)
HL(J,I)	Entalpía parcial de líquido para el componente I en el plato J al final del período de tiempo (btu/min)

N O T A C I O N  
(para el programa TDBA continuación)

HVO(J,I)	Entalpía parcial de vapor para el componente I en el plato J al inicio del período de tiempo (btu/min)
HV(J,I)	Entalpía parcial de vapor para el componente I en el plato J al final del período de tiempo (btu/min)
I	Identificación del componente i'esimo
IB	Identificación del componente clave seleccionado
IC	Parámetro de selección de terminación del período de arranque
ID	Parámetro de selección del tipo de operación simulada (-1 = arranque, 0 = producto con condensador parcial, 1 = producto con condensador total)
IM	Parámetro de selección de impresión (IM=1 impresión de todos los platos, IM=0 impresión de los platos 1 y N)
IPR	Parámetro que indica la terminación del período de tiempo, del de operación o del proceso global
IX(I)	Composición de la mezcla alimentada a la torre
J	Identificación del plato j'esimo
K(J,I)	Constante de equilibrio del componente I en el plato J a la temperatura T(J)
KB(J)	Constante de equilibrio del componente clave IB en el plato J a la temperatura T(j)
L(J)	Flujo de líquido total en el plato J al final del período de tiempo (lbmol/min)
L1(J)	Flujo total de líquido en el plato J al inicio del período de tiempo (lbmol/min)
LID	Igual que ID pero empleado en la lectura de datos

N O T A C I O N  
(para el programa TDBA continuación)

N	Número total de platos de la torre incluyendo el condensador y el rehevridor
NC	Número total de componentes en la mezcla a separar
P	Presión absoluta de operación en la torre(psia)
PD	Fracción del vapor del domo al final del período de arranque que se extraerá como destilado (PD=1/(relación de reflujo))
PHI	Parámetro de ajuste $\phi$ del método implícito del doble punto (valor recomendado = 0.6)
PI(I)	Parámetro Pi del método Thctz
QCO	Carga térmica del condensador al inicio del período de tiempo (btu/min)
QC	Carga térmica del condensador al final del período de tiempo (btu/min)
QRO	Carga térmica del rehevridor al inicio del período de tiempo (btu/min)
QR	Carga térmica del rehevridor al final del período de tiempo (btu/min)
SIG	Parámetro definido como $(1-\phi)/\phi$
T(J)	Temperatura de equilibrio en el plato J al final del período de tiempo (F)
TI(J)	Temperatura de equilibrio en el plato J al inicio del período de tiempo (F)
TE(3)	Temperatura de ebullición de 1=componente más ligero, 2=mezcla alimentada, 3=componente más pesado, (F)
TH	Norma del vector $\Theta_j$
TI	Tiempo acumulado (min)
TMP	Tiempo máximo permitido para la operación de arranque
U(j)	Acumulación total de líquido en el plato J (lbmol)



N O T A C I O N  
(para el programa TDBA continuación)

UCO(J,I)	Acumulación de líquido para el componente I en el plato J al inicio del período de tiempo (lbmol)
UC(J,I)	Acumulación de líquido para el componente I en el plato J al final del período de tiempo (lbmol)
UF	Cantidad de mezcla a separar alimentada a la torre (lbmol)
V(J)	Flujo total de vapor en el plato J al final del período de tiempo (lbmol/min)
VI(J)	Flujo total de vapor en el plato J al inicio del período de tiempo (lbmol/min)
X(J,I)	Composición líquida del componente I en el plato J
Y(J,I)	Composición vapor del componente I en el plato J

Las unidades dimensionales empleadas en esta notación corresponden al sistema inglés, sin embargo, TDBA puede trabajar con cualquier sistema de unidades.

## N O M E N C L A T U R A

$\bar{A}_i$	Matriz definida por la ecuación 3.14
A	Flujo de alimentación a las columnas de destilación continua (moles/tiempo)
$A_{j,1}$	Parámetro definido por la ecuación 3.5
a	Coefficiente de regresión lineal definido por 3.31
a'	Coefficiente de regresión lineal definido por 3.29
b	Término constante de regresión lineal definido en la ecuación 3.29
D	Flujo de destilado total, (moles/tiempo).
$d_i$	Flujo parcial de destilado, (moles/tiempo).
$\bar{F}_i$	Vector definido por las ecuaciones 3.14 y 3.15
$f_i$	Fugacidad parcial (psia)
G	Energía libre de Gibbs.
$g_j$	Funciones del método Theta definidos en 3.23, 3.62, 3.66 y 3.67
$\hat{H}_{j,1}$	Valor virtual de la entalpía molar parcial del vapor (btu/mol).
$\hat{h}_{j,1}$	Valor virtual de la entalpía molar parcial del líquido (btu/mol).
Qr	Carga térmica del rehervidor (btu/tiempo).
R	Constante de la ley de los gases.
S	Entropía.
$S_k$	Factor escalar del método Broyden definido por la ecuación A.4.43
T	Temperatura de operación de la torre de destilación R
T'	Temperatura absoluta, (R)
t	Tiempo en unidades consistentes
$U_j$	Retención total de líquido (moles)
$u_{j,1}$	Retención parcial de líquido (moles)
$U_a$	Cantidad de líquido saturado alimentado a la torre de destilación por lote, (moles)
$V_j$	Flujo molar total de vapor que sale del plato j (moles/tiempo).

$V_i$	Vector definido por las ecuaciones 3.14 y 3.15
$v_{j,i}$	Flujo molar parcial de vapor que sale del plato j. (moles/tiempo).
$X_{j,i}$	Facción mol en fase líquida.
$X_{ai}$	Facción mol en el flujo de alimentación a tiempo $t=0$
$Y_{j,i}$	Facción mol en la fase vapor

## LETRAS GRIEGAS

$\alpha_{j,i}$	Volatilidad relativa del componente i respecto al j
$\gamma_i$	Coefficiente de actividad
$\Delta t$	Tamaño del período de tiempo
$\rho_{j,i}$	Parámetro definido por la ecuación 3.11
$\mu_i$	Potencial químico.
$\sigma$	$(1-\phi)/\phi$
$\phi$	Parámetro de ajuste del método implícito del doble punto (0.6)
$\phi_i$	Coefficiente de fugacidad.
$\Theta_j$	Parámetro del método Theta.
$\tau_j$	Parámetro definido por la ecuación 3.10

## SUBINDICES

a	Alimentación
ca	Valor calculado por el balance de masa por componente
c	Condensador
d	Destilado
i	Identificación del componente i'esimo en la mezcla a separar.
j	Identificación del plato o etapa j'esima.
jb	Identificación del componente base cuya temperatura de ebullición es intermedia en la mezcla a separar
L	Líquido
n	Etapa o plato n'esimo.
nc	Componente n'esimo

x Rehervidor  
v Vapor

## SUPERINDICES

l Líquido  
t Total  
u Vapor  
o Valor al inicio del período del tiempo n'esimo.

## B I B L I O G R A F I A

- 1.- Barb, D.K.  
Solution of problems involving the separation of multi-  
component mixtures by batch distillation  
Ph.D. dissertation, Texas A.&M. University, 1967
- 2.- Barb, D.K & Holland, C.D  
Batch distillation, Proceeding of 7th World Petroleum  
Congress, Cd. México, 1967
- 3.- Batschelet, E.  
Matemáticas para biocientíficos  
Ed. Espringer Verlag, Nueva York E.U., 1978
- 4.- Boston, J.F. & Sullivan, S.L.  
An Improved algorithm for solving the mass balance  
equations in multiestage separation processes  
Can. J. Chem. Eng., vol 50 No.9 pag.663 1972
- 5.- Broyden, C.G.  
A class of methods for solving nonlinear simultaneous  
equations  
Math. Comput., vol 19, pag.577, 1965
- 6.- Carnahan, B. ; Luther, H.A & Wilkes, J.O.  
Applied numerical methods  
Ed. Jhon Wiley & Sons, 1969
- 7.- Converse, A.D. & Huber, C.D  
Effect of holdup on batch distillation optimization  
I & EC Fund., vol. 4, No.4, pag 475, 1965

- 8.- Converse, A.O. & Gross, G.D.  
Optimal distillation rate policy in batch distillate  
I & EC Fund., Vol.2, No.3, pag.217, 1963
- 9.- Distefano, G.P.  
Mathematical modeling and numerical integration of  
multicomponent batch distillation equations  
AICHE J., Vol.14, No.1, pag.190, 1968
- 10.- Fredenslund, A.; Ramussen, P. & Michelsen, M.L.  
Recent progress in the computation of equilibrium ratio  
Symposium on Distillation, AICHE 87 National Meeting,  
Boston E.U. Agosto, 1979
- 11.- Henley, E.J. & Seader, J.D.  
Equilibrium-stage separation operations in Chemical  
Engineering  
Ed. Jhon Wiley & Sons, 1981
- 12.- Holland, C.D.  
Unsteady state processes with applications in multi-  
component distillation  
Ed. Prentice Hall, 1966
- 13.- Holland, C.D.  
Multicomponent distillation  
Ed. Prentice Hall, 1966
- 14.- Holland, C.D. ; et all  
Solve more distillation problems  
Hydroc.Proc., 53(7),148(1974);53(11),176(1974);54(1),  
10(1975);54(7),121(1975);55(1),137(1976)  
55(6),125(1976);56(5),241(1977);56(6),  
181(1977);59(4),195(1980);59(7),144(1980)  
60(1),189(1981);62(7),183(1983)

- 15.- Holland,C.D  
Fundamentals of multicomponent distillation  
Ed. Mc Graw-Hill, 1981.
- 16.- Holland,C.D.  
Fundamentas and modeling of separation processes  
Ed. Prentice-Hall, 1975.
- 17.- Holland,C.D. & Liapis,A.I.  
Computer methods for solving dynamic separation problems  
Ed. Mc Graw-Hill, 1983.
- 18.- Huckaba,C.E. & Danly,D.E.  
Calculation procedures for binary batch rectification  
AIChE. J.,Vol.6,No.2,pag.335,1960.
- 19.- Joglekar,G.S. & Rekleaitis,G.V.  
A simulator for batch and semicontinuous processes  
Comp.Chem.Eng. Vol.8,No.6,pag.315,1984.
- 20.- Luther,R ; Olivera,A. & Schutz,F.  
Metodos numéricos  
Ed. Limusa, 1984.
- 21.- Mah,R.S. & Warren,D.S.  
Foundations of computer aided chemical processes design  
Ed. Engineering Foundation,New York E.U,1983
- 22.- Meadows,E.L.  
Multicomponent batch destillation calculations on a digital  
computer  
Chem.Eng.Prog.Sym.Series,Vol.59,No.46,pag.48,1963
- 23.- Mc Cabe,W.L & Thiele,E.W.  
Graphical design of fractionating columns  
Ind.Eng.Chem. No.17,pag.605,1925

- 24.- Mitten,E.L. & Prabhakar,T.  
Optimization of batch reflux process by dynamic programming  
Chem.Eng.Prog.Sym.Series,Vol.60,No.50,pag.55,1964
- 25.- Monfort,F.P. & Rojas,L.  
Datos de equilibrio líquido vapor y su tratamiento  
termodinámico.  
Series científicas IMP, México 1982.
- 26.- Rayleigh,J.W.  
On the distillation of binary mixtures  
Phil.Mag.Vol.4,No.6,pag.527,1902.
- 27.- Rose,A.  
General equation for a batch fractionation curve  
Ind.Eng.Chem.Vol.32,No.5,pag.675,1940.
- 28.- Rose,A.; Johnson,R.C. & Williams,T.J.  
Ind.Eng.Chem. Vol.42,pag.2145,1950.
- 29.- Rose,A.; Johnson,R.C. & Williams,T.J.  
Ind.Eng.Chem.,Vol.43,pag.2459,1951.
- 30.- Rose,A. & Obrien,V.  
Effect of holdup charge ratio in laboratory ternary  
batch distillation.  
Ind.Eng.Chem.,Vol.44,No.6,pag.1480,1952.
- 31.- Rose,A. & Johnson,R.C  
Chem.Eng.Prog. No.49,pag.15,1953.
- 32.- Smoker,E.H. & Rose,A,  
Graphic determination of batch distillation curves  
for binary mixtures.  
Trans.Am.Inst.Chem.Eng.,Vol.36,pag.285,1940.



- 33.- Sadotomo,H & Miyahara,K.  
Calculation procedure for multicomponent batch distillation  
Int.Chem.Eng.,Vol.23,No.1,pag.56,1983.
- 34.- Schweitzer,P.  
Handbook of separation techniques for chemical engineers  
Ed. Mc Graw-Hill,1985.
- 35.- Van Dongen,D.B. & Doherty.M.F.  
On thermodynamics of distillation processes -VI.Batch  
distillation.  
Chem.Eng.Sci.,Vol.4,No.11,pag.2087,1985.
- 36.- Wylie,C.R.  
Matemáticas para ingenieros  
Ed. Mc.Graw-Hill, 1982.
- 37.- Gjumbir,M & Olujić,Z.  
Effective ways to solve single nonlinear equations  
Chem.Eng.,Vol.91,No.15,pag.51,1984.