



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

ESCUELA NACIONAL DE ESTUDIOS PROFESIONALES

“ ZARAGOZA ”

**EXPERIENCIAS NUMERICAS EN LA SIMULACION DE  
EQUIPOS DE SEPARACION LIQUIDO - VAPOR**

**T E S I S**

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

INGENIERO QUIMICO

P R E S E N T A

EDGAR TORRES RAMOS

MEXICO, D. F.

1985



Universidad Nacional  
Autónoma de México



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

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

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

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

I N D I C E

	<u>PAG.</u>
INTRODUCCION . . . . .	1
CAPITULO 1 "Generalidades" . . . . .	3
- Etapa de equilibrio	
- Métodos de solución	
CAPITULO 2 "Solución de Sistemas de Ecuaciones no lineales" . . . . .	22
- Método de Newton - Raphson	
- Método de Broyden	
- Método de Bennet	
CAPITULO 3 "Método del Punto de Burbuja" . . . . .	39
- Algoritmo de solución	
CAPITULO 4 "Método de suma de flujos" . . . . .	50
- Procedimiento de cálculo	
CAPITULO 5 "Método de Ishii-Otto" . . . . .	59
- Metodología de solución	
- Algoritmo de Montalvo - Kaufmann	
- Un procedimiento alternativo de cálculo	
CAPITULO 6 "Método de Naphtali - Sandholm" . . . . .	97
- Algoritmo de cálculo	
- Algoritmo de Fredenslund y coautores	
- Esquema de solución	

	<u>PAG.</u>
CAPITULO 7 " Resultados " . . . . .	121
CONCLUSIONES . . . . .	179
APENDICE " A " . . . . .	183
APENDICE " B " . . . . .	218
APENDICE " C " . . . . .	270
BIBLIOGRAFIA . . . . .	282



*Soñemos quizá entonces hallaremos la verdad ..., pero abstengámonos de publicar nuestros sueños antes de haberlos puesto a prueba con la mente despierta.*

**FRIEDRICH AUGUST KEKULE (1829-1896)**

INTRODUCCION

La separación de mezclas en componentes esencialmente puros, es un requerimiento importante en casi todos los procesos químicos existentes.

Antes del desarrollo de las computadoras el esfuerzo para dar solución a esta problemática, se encaminó por efectuar métodos analíticos cortos llamados Métodos Cortos (" Short-Cuts ") y Métodos Empíricos. Estos métodos se caracterizan por ser rápidos y simples, empleándose en cálculos manuales; siendo de utilidad limitada, por ejemplo para sistemas específicos realizando simplificaciones; las cuales restringen al método.

Debido a que estos algoritmos no son la solución a las necesidades imperantes, planteó Sorel(1), alrededor del año de 1863, el describir a estos procesos de separación, por medio de un sistema de ecuaciones que describieran su comportamiento; dando así el primer paso para la creación de los métodos denominados " RIGUROSOS".

Aunque pudiera pensarse que estas ecuaciones parecen ser simples, en realidad son altamente no lineales e interdependientes; por lo que los cálculos necesarios para su solución son intrínsecamente iterativos, complejos y numerosos.

Con el desarrollo y disponibilidad de grandes computadoras, el interés se ha enfocado a los métodos rigurosos; entendiéndose por éstos, la solución del sistema de ecuaciones que descri-----

be al sistema de separación, introduciendo solamente la simplificación de la etapa ideal y realizando los cálculos etapa por etapa; además otro enfoque es el de verificar su simulación; ya que ésta permite estudiar diferentes condiciones de operación obteniendo los resultados correspondientes en corto tiempo. De esta manera, se pueden definir las condiciones más apropiadas para efectuar la separación requerida, en caso contrario da a conocer la imposibilidad de llegar a ésta.

Sin embargo, se presentan ciertas deficiencias asociadas con los algoritmos desarrollados; ya que algunos de ellos se enfocan a problemas particulares y no toman en cuenta que el modelo matemático debería ser general, dando solución a los más diversos procesos de separación.

A pesar del progreso llevado a cabo hasta la fecha en la simulación de estos procesos, mucho falta todavía por efectuarse; ya que es necesario contar con modelos confiables.

En respuesta a lo anterior, se realizó esta Tesis, fijándose los siguientes objetivos:

- 1.- Resolver problemas de separación líquido-vapor, en equipos con varios componentes y con múltiples etapas con métodos bien conocidos y representativos.
- 2.- Realizar un análisis de la convergencia de los métodos probados.

*Tan razonable es representar una especie de prisión por otra, como  
representar cualquier cosa que realmente existe por otra que no e--  
xiste.*

**DANIEL DEFOE**

CAPITULO 1  
GENERALIDADES

A).- LA ETAPA DE EQUILIBRIO

EQUILIBRIO

*Equilibrio es un vocablo que denota una condición estática o ausencia, inclusive también de cualquier tendencia hacia evitar un cambio en escala macroscópica.*

*El equilibrio implica un estado en el que no existen cambios macroscópicos en un sistema con respecto al tiempo, termodinámicamente esto significa que no existen cambios en las propiedades y requiere que todos los potenciales que puedan causar un cambio se contrarresten.*

*En la práctica se considera que se ha llegado al equilibrio, cuando los cambios de las propiedades no pueden ser detectados. A nivel microscópico, el equilibrio no es estático; por ejemplo, en el equilibrio líquido-vapor existe un cambio continuo de moléculas que pasan del líquido al vapor y viceversa, pero la velocidad de paso de moléculas en un sentido es igual que en el otro y la velocidad neta de transferencia de masa es cero.*

*Cuando dos o más fases se encuentran en equilibrio su temperatura y presión son iguales en todo el sistema; sin embargo, no son éstas las únicas restricciones termodinámicas adicionales que fueron dadas por Gibbs.(1)*

DEFINICION DE ETAPA DE EQUILIBRIO

*Por convención, las corrientes que dejan la etapa son identificadas con el número de la etapa. Las corrientes líquida  $L_j$  y vapor  $V_j$  se encuentran en equilibrio.*

La presión  $P_j$  se considera constante. Las corrientes de alimentación  $F_j$ , líquida  $L_{j-1}$  y la de vapor  $V_{j+1}$  entran a la etapa. Las corrientes tienen usualmente dimensiones de moles por unidad de tiempo.

$Q_j$  es el calor suministrado o extraído (positivo, cuando es suministrado y negativo cuando es extraído).  $H_{v,j}$  es la entalpía total de la corriente vapor; así como  $h_j$ , lo es para la del líquido. (Ver figura 1.1.).

También en esta misma figura se puede observar que existen salidas laterales en ambas fases,  $SL_j$  para la líquida y  $SV_j$  para la del vapor; cada componente tiene una composición mol en el líquido  $X_{i,j}$  y una de vapor  $Y_{i,j}$  por etapa.

#### B).- EXTENSION DE LA ETAPA DE EQUILIBRIO

El uso de múltiples etapas de equilibrio para efectuar una separación deseada es obviamente una extensión de la definición de etapa de equilibrio. El arreglo de éstas puede resultar en paralelo o a contracorriente.

Para procesos tales como destilación, absorción, agotamiento, etc., la configuración más eficiente es la del arreglo a contracorriente (flujo de vapor y líquido en direcciones opuestas). Una representación esquemática de esta extensión se presenta en la figura 1.2.

Las etapas se numeran del domo al fondo del equipo. Si se trata de destilación, la primera etapa será el condensador y la etapa  $N$  será el rehervidor (reboiler).

Este modelo se puede usar para equipos de separación con configuración compleja; donde existan varias alimentaciones, salidas laterales de ambas fases; así como intercambiadores de calor.

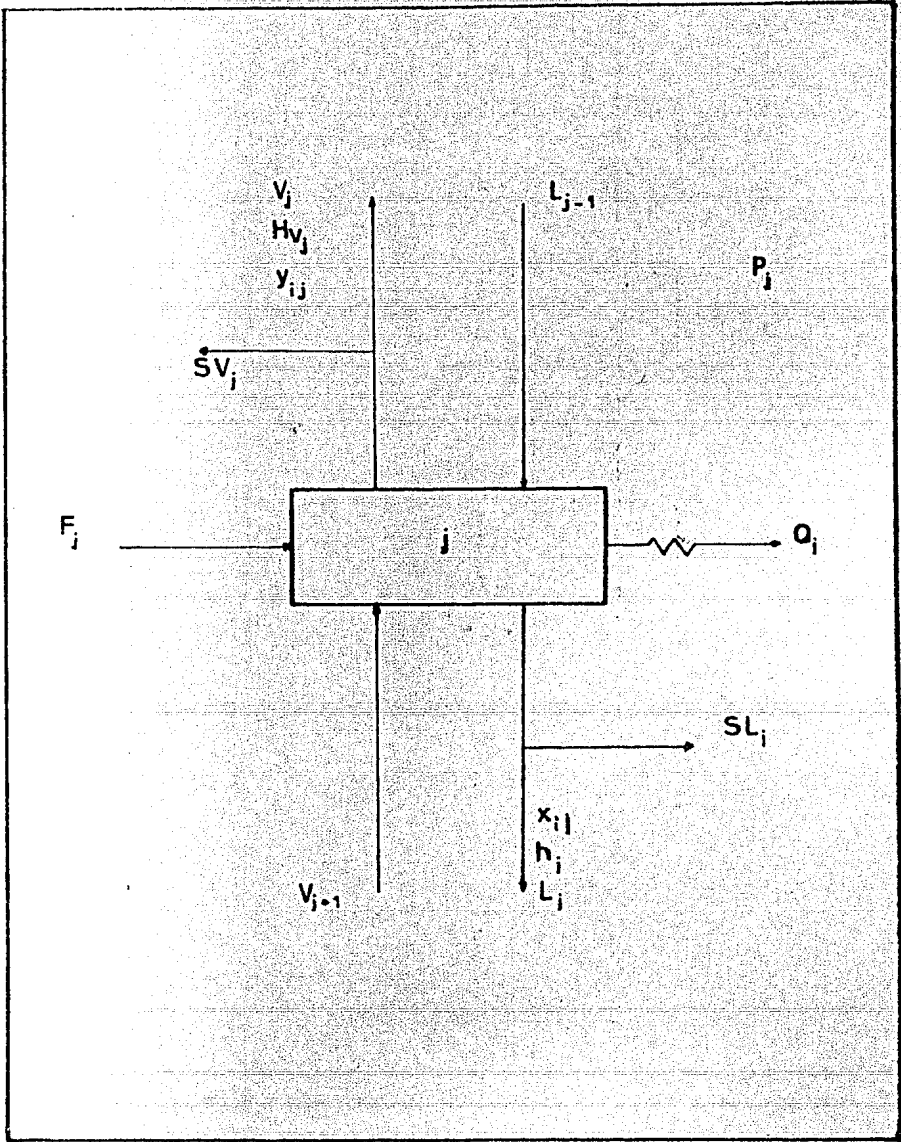


FIG. 11 ETAPA DE EQUILIBRIO

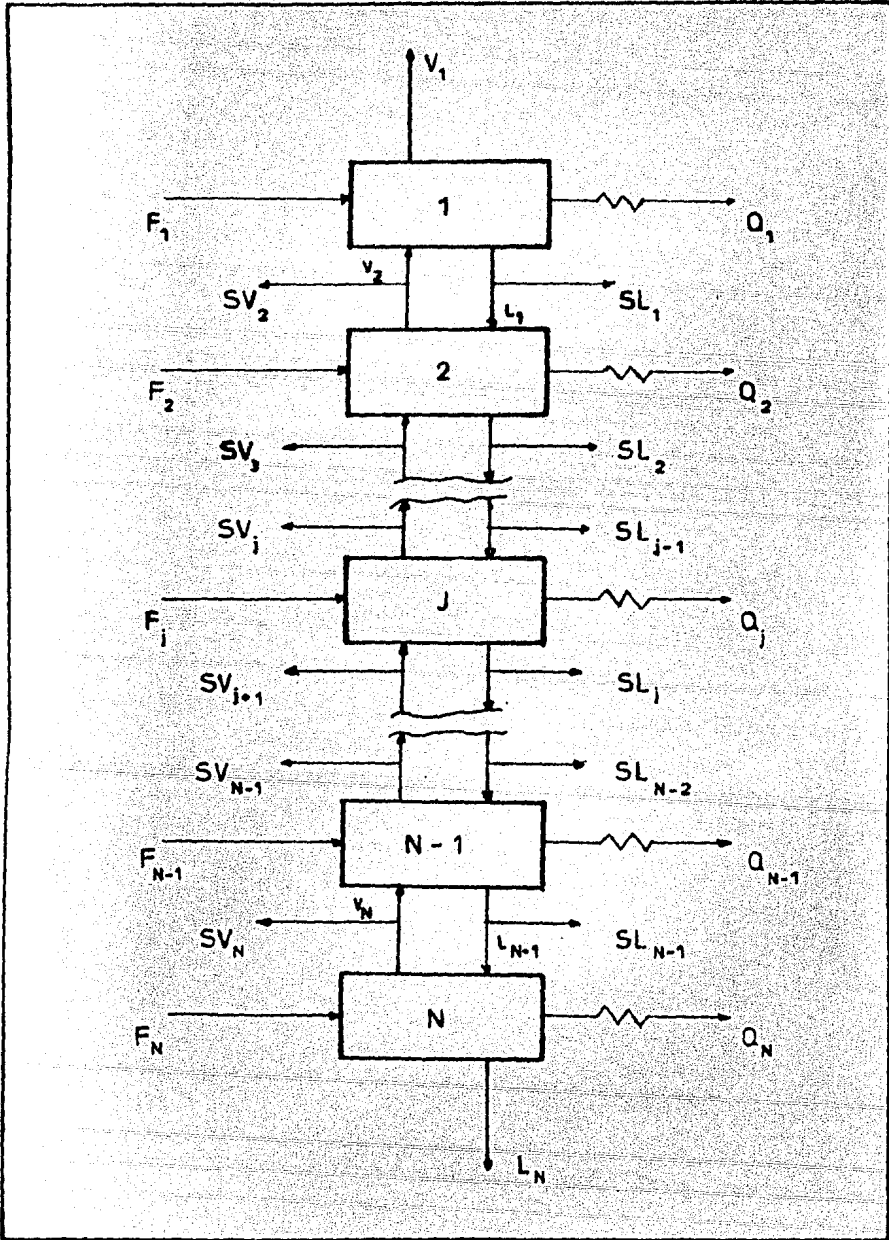


FIG. 12 EXTENSION DE LA ETAPA DE EQUILIBRIO



Cada etapa de equilibrio en esta columna se considera ideal, es decir, el vapor que deja la etapa está en equilibrio con el líquido que sale de la misma.

Una vez fija la configuración de la torre, las ecuaciones que representan en estado estacionario al modelo de la figura 1.2 son:

#### BALANCE GLOBAL DE MATERIA

$$W_j = L_{j-1} - (L_j + SL_j) - (V_j + SV_j) + V_{j+1} + F_j + R_j \quad (1.1)$$

$$\text{para } j = 1, 2, \dots, N$$

#### BALANCE DE MATERIA POR COMPONENTE

$$C_{ij} = L_{j-1} x_{ij-1} - (L_j + SL_j) x_{ij} - (V_j + SV_j) y_{ij} + V_{j+1} y_{ij+1} + F_j z_{ij} + r_{ij} \quad (1.2)$$

$$\text{para } j = 1, 2, \dots, N$$

$$\text{para } i = 1, 2, \dots, C$$

se obtienen como:

$$C_{ij} = L_{ij-1} - l_{ij} - sl_{ij} - v_{ij} - sv_{ij} + v_{ij+1} + f_{ij} + r_{ij} \quad (1.3)$$

#### RELACION DE EQUILIBRIO

$$E_{ij} = y_{ij} - K_{ij} x_{ij}$$

$$\text{para } i = 1, 2, \dots, C$$

$$\text{para } j = 1, 2, \dots, N$$

$$(1.4)$$

SUMATORIAS DE LAS FRACCIONES MOL

$$S_j^x = \sum_{i=1}^n x_{ij} - 1.0 \quad \delta \quad S_j^y = \sum_{i=1}^n y_{ij} - 1.0 \quad (1.5)$$

para  $j = 1, 2, \dots, N$ BALANCE DE ENERGIA

$$\begin{aligned} H_j = & L_{j-1} h_{j-1} - (L_j + SL_j) h_j - (V_j + SV_j) H_{vj} + V_{j+1} H_{vj+1} \\ & + F_j H_{Fj} + Q_j + R_j H_{rj} \quad \text{para } j = 1, 2, \dots, N \end{aligned} \quad (1.6)$$

Formando así el conjunto de ecuaciones que describen al sistema conocido como ecuaciones MESH, que proviene de la primera letra de cada una de las ecuaciones descritas (1.1), (1.4), (1.5) y (1.6); o sea:

M = masa

E = equilibrio

S = Sumatory

H = Símbolo utilizado para entalpias

Generalmente las ecuaciones del Balance de Masa por Componente se combinan con las relaciones de equilibrio para producir:

$$\begin{aligned} C_{ij} = & L_{j-1} x_{ij-1} + V_{j+1} K_{ij+1} x_{ij+1} - (L_j + SL_j) x_{ij} - (V_j + SV_j) \\ & K_{ij} x_{ij} + F_j x_{ij} + r_{ij} \end{aligned} \quad (1.7)$$

y la ecuación general del Balance de Masa se puede expresar como:

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m + F_m - SL_m - SV_m) - V_1 \quad (1.8)$$

C).- ANÁLISIS DE GRADOS DE LIBERTAD

Además de las ecuaciones MESH, se necesitan predecir las relaciones de equilibrio  $K_{ij}$ 's, las entalpías de vapor y de líquido---  $Hv$ 's y  $h$ 's, así como la rapidez de reacción  $r$ 's.

En la mayoría de los casos se aplican correlaciones muy complejas donde se relacionan propiedades termodinámicas y variables específicas.

Las funciones se expresan como:

$$K_{ij} = K_{ij}(P_j, T_j, x_{ij}, y_{ij})$$

$$h_j = h_j(P_j, T_j, x_{ij})$$

$$Hv_j = Hv_j(P_j, T_j, y_{ij})$$

$$r_{ij} = r_{ij}(P_j, T_j, x_{ij}, y_{ij})$$

En la descripción de cualquier operación o problema de diseño en procesos de separación de múltiples etapas se requiere que algunas variables independientes sean especificadas. El número de variables que deben ser especificadas, depende del tipo de proceso de que se hable, y su determinación consiste en escribir todas las ecuaciones independientes que describen el proceso y luego contar el número de variables y ecuaciones.

Con el fin de resolver las ecuaciones se deben fijar ciertas variables para que el número de variables restantes sea igual al número de ecuaciones, que es simplemente el realizar un análisis de grados de libertad.

Haciendo ese análisis del número de ecuaciones y del número de variables se tiene:

Flujo de Alimentaciones	$F_j$	$N$
Presión y Temperatura de alim.	$Pf_j, Tf_j$	$2N$
Presión por etapa	$P_j$	$N$
Temperatura por etapa	$T_j$	$N$
Líquido	$L_j$	$N$
Vapor	$V_j$	$N$
Salida lateral Lf.	$SL_j$	$N$
Salida lateral vapor	$SV_j$	$N$
Cargas de calor	$Q_j$	$N$
Composiciones de alim.	$z_{ij}$	$NC$
Composiciones en la fase lf.	$x_{ij}$	$NC$
Composiciones en la fase vapor	$y_{ij}$	$NC$
Número de etapas	$N$	$1$
Tasa de reacción (reacción rate)	$r_{ij}$	$NC$
		<hr/>
		$N ( 4C + 10 ) + 1$
Balance global de materia por componente	$C_{ij}$	$NC$
Relaciones de equilibrio	$E_{ij}$	$NC$
Sumatoria de $x$ 's o de $y$ 's	$S_j$	$2N$
Balance de Energía	$H_j$	$N$
		<hr/>
		$N ( 2C + 3 )$

aplicando la ecuación de grados de libertad

$$gl = \text{No. de variables} - \text{No. de ecuaciones.}$$

$$gl = N(4C + 10) + 1 - N(2C + 3) = 2NC + 7N + 1$$

por tanto, tenemos que fijar  $2NC + 7N + 1$  variables

Aquí no existe restricción alguna para fijarlas; pero dependiendo de éstas se tendrá que desarrollar un algoritmo para el cálculo de las que no se han especificado.

En la mayoría de los sistemas se fijan las siguientes variables (variables independientes).

$F_j, Q_j, SL_j, SV_j, P_j,$	$5N$
$P_{fj}, T_{fj}$	$2N$
$z_{ij}, r_{ij}$	$2NC$
$N$	$1$

Quedando las variables de corte:

$L_j, V_j, T_j$	$3N$
$x_{ij}, y_{ij}$	$2NC$
	<hr/>
	$N(2C + 3)$

#### D).- MÉTODOS DE SOLUCION

Se puede realizar una primera clasificación de los métodos existentes para la resolución de separación líquido-vapor, siendo ésta (2):

I.- MÉTODOS CORTOS ("SHORT-CUTS")

II.- MÉTODOS RIGUROSOS.

## I.- METODOS CORTOS

Los métodos cortos se utilizan solamente para estudiar y realizar diseños preliminares; aunque siguen siendo una herramienta muy conveniente para determinar condiciones de operación límites como son: el número mínimo de etapas y la relación de reflujo mínimo.

A continuación se enlistan varios de los métodos cortos más conocidos y representativos:

- Fenske (3), y Underwood (4), obtienen el número mínimo de etapas a reflujo total.
- Underwood (5) y Colburn (6), calculan la relación de reflujo mínimo.
- Gilliland (7), calcula el número de etapas vs. las relaciones de reflujo.
- Sugie y Lu (8), efectúan el cálculo del reflujo mínimo con cualquier número de salidas laterales.
- Featherstone (9,10), evalúa los requerimientos de reflujo para sistemas no ideales; incluyendo destilaciones azeotrópicas.
- Madsen (11), determina la relación de reflujo óptimo con la ayuda de eficiencias de plato, calor latente del destilado, costos de operación, de materiales y costos de inversión.

- Van Winkle y Todd (12,13), analizan los efectos cuantitativos de las variables de diseño en el costo total de las columnas de destilación.
- Barnés (14), extiende la ecuación de Underwood para calcular el reflujo mínimo en las columnas con varias alimentaciones.
- Hanson y Newman (15), emplean la ecuación de Underwood para la localización de la etapa óptima de alimentación.

## II).- Métodos Rigurosos

El diseño final de equipos con múltiples etapas para llevar a cabo separaciones de varios compuestos en una mezcla, requiere una determinación rigurosa de temperaturas, flujos, presiones y composiciones en ambas fases, además de calcular la transferencia de calor en cada etapa.

Estos métodos resuelven básicamente las ecuaciones MESH, previamente descritas; aunque su simulación es difícil debido a la no-linealidad de éstas y tienen como características primordiales:

- Son procesos iterativos.
- Requieren resolver un gran número de ecuaciones no lineales.
- La convergencia depende del tipo de problema.
- Los errores de redondeo pueden ser importantes y por tanto la convergencia no siempre se alcanza.

La mayoría de los algoritmos publicados se pueden clasificar en tres categorías:

- i).- Métodos de Corte o de descomposición.
- ii).- Métodos de Solución Simultánea.
- iii).- Métodos de Relajación.

i).- Métodos de Corte o de descomposición.

En estos métodos las ecuaciones MESH se agrupan ya sea por etapa o por tipo; siendo su principal dificultad el dar buenos estimados para las variables de iteración.

Estos grupos de ecuaciones se resuelven en un orden prescrito, uno a la vez, para un conjunto correspondiente de variables; mientras las otras se mantienen fijas. Los estimados se actualizan por sustitución directa o por un criterio ya establecido.

Dependiendo en como se agrupan las ecuaciones, estos métodos se subdividen en dos categorías:

- Procedimientos de Etapa - Etapa .
- Procedimientos de Tipo.

Dentro de los primeros se encuentran:

- Lewis - Matheson ( 16 ).
- Thiele - Geddes ( 17 ).
- Método Theta de Holland ( 18 )

Los métodos de corte por etapa tienen muchas dificultades debido a la expansión de los errores de truncación y frecuentemente fallan para -



mezclas no ideales o para mezclas con rangos amplios de puntos de ebullición; los iniciadores de estos procedimientos son Amundson y Pontinen (19) y después los más representativos son:

- Sujata (20) y Friday (21), que resuelve la ecuación (1.6), para dar el perfil de temperatura y la ecuación:

$$V_j^{k+1} = V_j^k \sum y_{ij} \quad K = \text{No. de iteración} \quad (1.9)$$

para proporcionar el flujo de vapor  $V_j$

-Wang y Henke (22), proponen resolver la ecuación (1.2), en forma de matriz tridiagonal por el método de Thomas y resolver la ecuación:

$$\sum K_{ij} x_{ij} - 1.0 = 0 \quad (1.10)$$

aplicando el Método de Müller (23) y (24) y así obtener el perfil de temperatura a lo largo de la columna.

-Tierney y Yanosik (25), Tomich (26) y Billingsley-Boynton (27) y (28), proponen resolver las ecuaciones S y H en forma simultánea.

Friday y Smith (29), realizaron un análisis de los métodos tradicionales de corte y puntualizaron que para efectuarlos se necesitan tomar seis decisiones básicas:

*Primera:* Esta consiste en decidir como agrupar las ecuaciones; ya sea satisfacer las ecuaciones por etapa todas al mismo tiempo o satisfacer todas las etapas a la vez ecuación por ecuación.

*Segunda:* Esta consiste en determinar el orden para resolver las ecuaciones, el más común es el de (1.1), (1.2), (1.4) y (1.5), pero también el de (1.1.), (1.2); (1.5) y (1.4).

*Tercera:* Esta se debe tomar con el objeto de seleccionar el tipo adecuado de ecuación para dar el perfil de una variable determinada. Si se trata primeramente el Balance de -- Energía para producir el flujo de vapor y la ecuación (1.10), para proveer las temperaturas se estará hablando de los métodos de burbuja, en cambio si las temperaturas se obtienen del balance de entalpías y los flujos a partir de las composiciones no normalizadas; se estará refiriendo a los métodos de Suma de Flujos.

*Cuarta:* Consiste en elegir el método de solución de las ecuaciones para el balance de materia. Esto es importante para evitar la expansión de errores de redondeo.

*Quinta:* Se refiere a la elección del método para el cálculo de las nuevas temperaturas; ya sea por medio de los cálculos del punto de burbuja o del punto de rocío, usando los métodos de Regula-Falsi, Newton-Raphson o Müller, en el caso que el método sea de Punto de burbuja. Si el método es de Suma de Flujos se utiliza una expansión de series de Taylor de primer orden junto con el método de Thomas.

*Sexta:* Esta última se refiere a la manera de obtener los nuevos flujos de vapor y líquido. Con el algoritmo de Sum-Rates se calculan una vez que se tienen las composiciones en ambas fases y con el algoritmo de punto de Burbuja se utilizan las ecuaciones del balance de energía y el balance global de materia.

## ii).- Métodos de Solución Simultánea

En estos métodos las ecuaciones MESH se linealizan y se resuelven en forma simultánea; usando generalmente la técnica de Newton-Raphson.

Una vez que se ha definido el sistema, el modelo matemático se puede expresar en forma matricial de la siguiente manera:

$$G(w) = 0 \quad (1.11)$$

Una expansión de series de Taylor de primer orden de esta ecuación producirá:

$$\left( \frac{\partial G}{\partial w} \right) \Delta w = -G(w)$$

que es lineal y se puede resolver para  $\Delta w$  a partir de cualquier conjunto de valores estimados de  $w$ . Los nuevos valores de  $w$  se obtienen por medio de:

$$w^{k+1} = w^k + t \Delta w^k \quad k = \text{No. de la iteración}$$

donde  $t$  es un factor escalar de amortiguamiento, que generalmente se encuentra acotado en el intervalo cerrado de  $-1$  a  $1$ . Este procedimiento se repite hasta que la ecuación (1.11) se cumpla.

La eficiencia de cualquier método de solución simultánea depende directamente de la manera en que genere el Jacobiano y la manera que utilice para invertirlo; donde este Jacobiano está integrado por las derivadas parciales de las  $n$  funciones existentes con respecto a las  $n$  variables independientes.

Los métodos más conocidos en esta clasificación son:

- Wang-Oleson (30), propusieron el primer método de esta clase en el año de 1964 y un año después lo realizó Naphtali(31).
- Goldstein y Stanfield (32), extendió el método anterior incluyendo especificaciones de diseño.
- Ohmura y Kasahara (33), en 1978 consideraron el número de etapas en cualquier sección del equipo como una variable de iteración; utilizando además su algoritmo al diseño de estos equipos.
- Gentry (34), Roche (35), Gallun-Holland(36), Kubicek (37), Hess(38), son otros de los métodos de esta cla-

sificación.

- Para columnas interconectadas (Harclerode-Gentry (39), Browne-Otto-Ishii (40), Hofeling-Seader(41) son de los autores más importantes.
- Naphtali y Sandholm (42), extiende el método original del primero e incluyen eficiencias de plato de Murphree.
- Kaibel (43) y Carra (44), toman en cuenta el término de reacción química en sus modelos.
- Ishii-Otto (45), incluyen la evaluación de propiedades dentro del Jacobiano; usando para su cálculo la correlación de Chao-Seader.
- Shah y Bishnoi (46), usan el procedimiento de Ishii-Otto; pero con la utilización de las ecuaciones de estado Soave-Redlich-Kwong o la de Peng-Robinson, además proponen un procedimiento para mejorar los estimados iniciales de temperatura.
- Fredenslud (47), combina el algoritmo de Naphtali-Sandholm con el método de grupo de UNIFAC para la predicción de los coeficientes de actividad.
- Y de reciente publicación los de Buzzi Ferraris (48), Fitzmorris-Mah(49), Li y Frost (50), Ferraris-Morbidelli (51).

### iii).- Método de Relajación

Difiere de los otros métodos (de corte y solución simultánea); ya que las ecuaciones MESH se resuelven en estado no estacionario; es decir, en estado transiente.

El iniciador de estos métodos fue Arthur Rose (52), con la ayuda de Sweeny y Schrodt.

El concepto básico del método es el planteamiento de la ecuación diferencial para un balance de masa del componente "i", de la manera siguiente:

$$\frac{A}{d} \frac{d(y_i)_j}{d\phi} + \frac{a}{d} \frac{d(x_i)_j}{d\phi} = L_{j-1} x_{ij-1} + V_{j+1} y_{ij+1} - (L_j + SL_j) x_{ij} - (V_j + SV_j) y_{ij} + F_j z_{ij} \quad (1.12)$$

donde A y a son las acumulaciones en el plato "j" del vapor y del líquido respectivamente y  $\phi$  es el tiempo.

Este tipo de métodos tienen el inconveniente de que presentan una solución asintótica; por lo cual no son muy aceptados.

Una característica más de estos métodos es que el valor de las composiciones en ambas fases después de un intervalo de tiempo se obtiene usando el Método de Euler:

$$x_{ij}^{t+\Delta t} = x_{ij}^t + \Delta t \left( \frac{dx_{ij}}{dt} \right) \quad (1.13)$$

Los algoritmos probablemente más importantes dentro de esta clasificación se muestran a continuación:

- Ball (53), emplea un método de integración modificado y formula en estado transiente la ecuación  $M$  en forma de matriz tridiagonal.
- Verneuil - Oleson (54) y posteriormente Economopoulos (55), proponen calcular en estado no estacionario las ecuaciones  $M$  y  $H$  e incluyen la eficiencia por etapa de Murphree.
- Ishikawa y Hirata (56), aplican el método de relación a columnas con varias alimentaciones; principalmente a casos de destilación extractiva.
- Jelinek (57), utiliza una fórmula de integración de segundo orden para crear una matriz pentadiagonal.
- Blavacek (58), aplica el método de Jelinek a destilaciones azeotrópicas.
- Huber (59), incluye la eficiencia por etapa de Murphree.
- Ketchum (60), propone un método que combina el estado no estacionario y el método de Newton-Raphson.
- Morris y Surcek (61), desarrollan un modelo en el cual no se requiere la suposición de etapas en equilibrio, ni el cálculo de derivadas en forma numérica; pero si incluye el cálculo de la ecuación de estado de Peng-Robison para las propiedades.

*La paradoja está ahora totalmente establecida, que las mayores abstracciones son las verdaderas armas con las cuales se controla nuestro concepto de los hechos concretos.*



## CAPITULO 2

SOLUCION DE SISTEMAS DE ECUACIONES NO LINEALES

El modelo general analizado en el capítulo anterior, está formado por numerosas ecuaciones no lineales; para darle solución a este sistema se han desarrollado un gran número de algoritmos numéricos, siendo los más comúnmente utilizados:

a).- *Sustitución Directa:*

- Wegstein.
- Wegstein Acotado.
- Método de valores propios dominantes.
- Método generalizado de los valores propios.

b).- *Newton - Raphson:*

- Newton - Raphson modificado.
- Secante.
- Secante generalizado.
- Broyden.
- Broyden - Schubert.
- Bennett.

c).- *Gradiente:*

- Marquardt.

A continuación se describen los métodos de:

- Newton-Raphson
- Broyden
- Bennett

METODO DE NEWTON-RAPHSON

Sea el sistema de ecuaciones no lineales:

$$\begin{aligned}
 f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\
 f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\
 &\vdots \\
 f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0
 \end{aligned}
 \tag{2.1}$$

En forma matricial:

$$\bar{F}(\bar{x}) = \bar{0}
 \tag{2.2}$$

Expandiendo a  $F(x)$  en series de Taylor alrededor del punto  $x^k$ :

$$\begin{aligned}
 F(x) = & F(x^k) + (x - x^k) F'(x^k) + \frac{(x - x^k)^2}{2!} F''(x^k) + \dots \\
 & + \frac{(x - x^k)^n}{n!} F^{(n)}(x^k)
 \end{aligned}
 \tag{2.3}$$

Sea  $p^k$  el vector desplazamiento de las variables independientes:

$$p^k = x - x^k$$

Sustituyendo la definición anterior en (2.3), esta se transforma en :

$$\begin{aligned}
 F(x^k + p^k) = & F(x^k) + p^k F'(x^k) + \frac{(p^k)^2}{2!} F''(x^k) \\
 & + \dots + \frac{(p^k)^n}{n!} F^{(n)}(x^k) \quad (2.4)
 \end{aligned}$$

Considerando solamente los términos hasta la primera derivada se tiene que:

$$F(x^k + p^k) = F(x^k) + p^k F'(x^k) \quad (2.5)$$

Suponiendo que  $F(x^k + p^k)$ , es la mejor aproximación a la solución de la ecuación (2.2), es decir:

$$F(x^k + p^k) = 0$$

La ecuación (2.4) se simplifica:

$$F(x^k) + p^k F'(x^k) = 0 \quad (2.6)$$

donde  $F'(x^k)$  es la matriz de derivadas parciales de las  $n$  funciones existentes respecto a las  $n$  variables independientes. A esta matriz se le denomina Jacobiano,  $J(x^k)$ .

Por tanto:

$$J(x^k) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(x^k)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(x^k)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1(x^k)}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2(x^k)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(x^k)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2(x^k)}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n(x^k)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n(x^k)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n(x^k)}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Reescribiendo la ecuación (2.6)

$$F(x^k) + p^k J(x^k) = 0 \quad (2.7)$$

despejando al vector de desplazamiento  $p^k$ , y respetando las reglas en las operaciones matriciales se obtiene:

$$p^k = -J^{-1}(x^k) \cdot F(x^k) \quad (2.8)$$

Esta última ecuación se conoce como la fórmula de recurrencia o fórmula recursiva de Newton - Raphson.

Algunos autores han demostrado (1) que la velocidad de convergencia del método es de segundo orden pero con el objeto de au-

mentar la confiabilidad de éste se ha sugerido (2) emplear el desplazamiento,  $p^k$ ; sólo como una dirección de búsqueda y ajustar su tamaño con un factor de amortiguamiento  $t$ , es decir:

$$x^{k+1} = x^k + t p^k$$

Para conocer el valor de  $t$  óptimo se han sugerido varias técnicas para su evaluación como son:

1).- Método de Montalvo - Kaufmann (3).

2).- Método de optimización de la sección dorada (4).

El método es convergente siempre que la aproximación inicial esté suficientemente cerca de la solución del sistema (2.1).

#### METODO DE BROYDEN

Al utilizar el Método Newton - Raphson se requiere evaluar el Jacobiano numéricamente en cada iteración, lo que implica un gran consumo de tiempo de cálculo; además la inversión del Jacobiano requiere de un gran esfuerzo computacional. Para evitar lo anterior, se propone utilizar el procedimiento de Broyden (2), que reduce el número de funciones a evaluar y en la actualización del inverso del Jacobiano.

En el Método de Newton - Raphson, el siguiente vector  $x^{k+1}$  de variables en el proceso iterativo resulta de la ecuación:

$$x^{k+1} = x^k - J^{-1}(x^k) \cdot F(x^k) \quad (2.9)$$

Siendo  $x^k$  la aproximación anterior,  $F(x^k)$  el vector de fun--

ciones por resolver evaluado en  $x^k$ :

$$F(x^k) = \begin{pmatrix} f_1(x_1^k, x_2^k, x_3^k, \dots, x_n^k) \\ f_2(x_1^k, x_2^k, x_3^k, \dots, x_n^k) \\ \vdots \\ f_n(x_1^k, x_2^k, x_3^k, \dots, x_n^k) \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

y  $J(x^k)$  el Jacobiano del sistema de funciones  $F(x^k)$ .

En la modificación de Broyden se define al vector  $p^k$  por la ecuación:

$$p^k = -B_k^{-1} \cdot F(x^k) \quad (2.11)$$

Siendo  $B_k$  alguna aproximación al Jacobiano de las funciones (2.10), evaluado en  $x^k$ . La siguiente aproximación  $x^{k+1}$  resulta de la ecuación:

$$x^{k+1} = x^k + t p^k \quad (2.12)$$

Las funciones  $f_j(x^k)$ ;  $j=1, 2, \dots, n$  son ahora funciones de  $t$  y las derivadas  $df_j(x^k)/dt$ ,  $j=1, 2, \dots, n$  se usan para mejorar la matriz  $B_k$ , que aproxima el Jacobiano del sistema de ecuaciones siguientes:

$$\frac{df_j}{dt} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f_j}{\partial x_i} \frac{dx_i}{dt} \quad j=1, 2, \dots, n \quad (2.13)$$

sea:

$$\frac{df}{dt} \quad \text{el vector} \quad \left( \frac{df_1}{dt}, \frac{df_2}{dt}, \dots, \frac{df_n}{dt} \right)$$

por tanto, (2.13) se reescribe como:

$$\frac{df}{dt} = A p^k \quad (2.14)$$

siendo  $A$  el Jacobiano del sistema. Para tener una aproximación a  $df/dt$  en el punto  $x^{k+1}$ , se expande  $F$ , considerado como función de  $t$ , es decir, alrededor de  $x^{k+1}$ .

Entonces:

$$F(x^{k+1}) - F(t^k - s^k) \approx s^k A p^k \quad (2.16)$$

En el Método de C.G. Broyden la matriz  $B_{k+1}$ , la aproximación al Jacobiano, se selecciona de manera que satisfaga la siguiente relación:

$$F(x^{k+1}) - F(t^k - s^k) = s^k B_{k+1} p^k \quad (2.17)$$

Si en (2.17), se tiene que  $s^k = t^k$  resulta:

$$F(x^{k+1}) - F(x^k) = t^k B_{k+1} p^k \quad (2.18)$$

definiendo:

$$H_k = -B_k^{-1} \quad (2.19)$$

$$Y^k = F(x^{k+1}) - F(x^k - \delta^k) \quad (2.20)$$

Las ecuaciones (2.11) y (2.17), se convierten en:

$$p^k = -B_k^{-1} F(x^k) = H_k F(x^k) \quad (2.21)$$

y:

$$H_{k+1} Y^k = -\delta^k p^k \quad (2.22)$$

Las ecuaciones (2.12), (2.20), (2.21) y (2.22) definen una clase de métodos basados en el algoritmo de Newton - Raphson y considerando otras propiedades de las matrices  $B_{k+1}$  o  $H_{k+1}$  se construyen métodos particulares.

#### METODO I

Por este método  $B_{k+1}$ , se selecciona de manera que el cambio en  $F(x^k)$  predicho por  $B_{k+1}$  en una dirección  $q^k$ , ortogonal a  $p^k$  sea el mismo que el supuesto por  $B_k$ , es decir:

$$B_{k+1} q^k = B_k q^k$$

$$q_k^T p^k = 0 \quad (2.23)$$



Entonces la próxima relación se obtiene usando el procedimiento de Householder:

$$H_{k+1} = H_k - \frac{(H_k Y^k - t p^k) p_k^T H_k}{p_k^T H_k Y^k} \quad (2.24)$$

y la nueva  $x$  se calcula como:

$$x^{k+1} = x^k + t H_k F(x^k) \quad (2.25)$$

### METODO II

Utiliza la aproximación siguiente:

$$H_{k+1} = H_k - \frac{(s^k p^k + H_k Y^k) Y_k^T}{Y_k^T Y^k} \quad (2.26)$$

Siendo esta fórmula un complemento que proporciona Broyden al Método I.

### METODO III

Se requiere que la matriz  $H_{k+1}$  sea simétrica y positiva definida, entonces:

$$H_{k+1} = H_k - \frac{H_k Y^k Y_k^T H_k}{Y_k^T H_k Y^k} - \frac{s^k p^k p_k^T}{p_k^T Y^k} \quad (2.27)$$

Si  $s^k$  asume el valor de  $t^k$  este método será el de Davidon.

El método se puede resumir en los siguientes pasos (1):

A).- Dar un estimado inicial  $x^0$ .

B).- Obtener la matriz  $H_0$  invirtiendo el Jacobiano  $J(x^k)$ , evaluado en  $x^k = x^0$ .

C).- Calcular  $F(x) = F(x^k)$ .

D).- Calcular :

$$p^k = H_k^{-1} F(x^k).$$

E).- Seleccionar el valor de  $t^k$  tal que la norma  $F(x^k + t^k p^k)$  sea menor que la norma de  $F(x^k)$ , con lo que se debe calcular:

$$x^{k+1} = x^k + t^k p^k$$

F).- Probar la convergencia:

$$|F(x^{k+1})| < \epsilon$$

G).- Si el criterio es mayor que  $\epsilon$  entonces evaluar:

$$Y^k = F(x^{k+1}) - F(x^k)$$

y  $H_{k+1}$  por el Método I.

Si el criterio es menor que  $\epsilon$  el proceso finaliza.

H).- Si el proceso todavía no ha finalizado regresar al paso "D".

#### METODO DE BENNET.

En el método propuesto por Broyden, se debe utilizar la fórmula de Householder para la inversión del Jacobiano del sistema; ecuación (2.24).

En lugar de aplicar la fórmula de Householder, el cálculo de la inversa se puede llevar a cabo utilizando el algoritmo propuesto por J.M. Bennett en el año de 1965 (5), que utiliza la técnica de los factores  $L$   $U$ , para invertir matrices (6) y (7).

El algoritmo de Broyden previamente descrito consiste de sucesivas actualizaciones del Jacobiano con el uso de una matriz de corrección, es de cir:

$$J_{k+1} = J_k + x_k C Y_k^T \quad (2.28)$$

donde:

$$C = \frac{1}{s_k p_k^T p_k}$$

$$x_k = f(x_{k+1}) - (1-s_k) F(x_k)$$

$$Y_k = p_k = H_k F(x_k)$$

dado que el Jacobiano,  $J$ , se puede establecer en términos de los factores  $L$  y  $U$  la ecuación:

$$J(x_k) \cdot (x_{k+1} - x_k) = -F(x_k)$$

se transforma en:

$$L_k U_k \cdot (x_{k+1} - x_k) = -F(x_k) \quad (2.29)$$

La ecuación (2.28) en:

$$L_{k+1} U_{k+1} = L_k U_k + x_k C Y_k^T \quad (2.30)$$

Bennett propuso el algoritmo para la actualización de las matrices  $L_k$  y  $U_k$  y a partir de estas las  $L_{k+1}$  y  $U_{k+1}$ .

El procedimiento detallado es el siguiente:

PASO 1: Supóngase una valor inicial para las variables  $x^0$  y calcúlese:

$$F(x) = F(x_0)$$

PASO 2: Aproxímese los elementos de  $J_0$  mediante la fórmula:

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \approx \frac{f_i(x_j + h_j) - f_i(x_j)}{h_j}$$

donde  $h_j$  generalmente se toma como  $0.001 x_j$

Habiendo hecho lo anterior. Encuéntrese los factores  $L_0$   $U_0$  de  $J_0$  tal que:

$$J_0 = L_0 U_0$$

Como lo describen Conte y de Boor (6).

PASO 3: Basándose en  $L_k$ ,  $U_k$  y  $F_k$  (que son los valores más recientes de  $L$ ,  $U$  y  $F$  respectivamente), calcúlese  $p_k$  de la manera siguiente:

$$L_k U_k p_k = -F_k$$

PASO 4: Encuéntrese el tamaño de paso adecuado  $s_k$  de forma que la norma Euclidiana de  $F(x_k + s_k p_k)$  sea menor que la de  $F(x_k)$ .

Pruébese primero con  $s_{k+1} = 1$  y la siguiente desigualdad:

$$\left[ \sum_{i=1}^n f_i^2(x_k + s_k p_k) \right]^{\frac{1}{2}} < \left[ \sum_{i=1}^n f_i^2(x_k) \right]^{\frac{1}{2}}$$

Si la desigualdad se verifica continúese con el paso 5, de lo contrario; calcúlese un nuevo valor para  $s_k$  por medio de la fórmula desarrollada por Broyden (2).

$$s_{k,2} = (1 + \theta)^{\frac{1}{2}} - 1 / 3\theta$$

donde:

$$\theta = \frac{\sum_{i=1}^n f_i^2(x_k + s_k p_k)}{\sum_{i=1}^n f_i^2(x_k)}$$

Si la norma no se reduce por medio de  $s_{k,2}$ , debe regresarse al paso 2 y reevaluar las derivadas parciales del Jacobiano en base a  $x_k$ .

PASO 5: Pruébese ahora  $F(x_{k+1})$ , para la convergencia con un criterio pre establecido. Si no se logra la convergencia calcúlese:

$$C = \frac{1}{s_k p_k^T p_k}$$

$$x_k = \frac{F(x_{k+1}) - (1 - s_k) F(x_k)}{s_k p_k^T p_k}$$

$$y_k^T = p_k^T$$

PASO 8: Utilizar ahora el algoritmo propuesto por Bennett (figura 2.1), con objeto de actualizar las matrices  $L_{k+1}$  y  $U_{k+1}$  a partir de las  $L_k$  y  $U_k$ , donde; se debe aplicar la ecuación (2.30).

PASO 7: Regresar al paso 3.

Estos métodos surgen por la necesidad de dar solución a problemas prácticos en las diferentes ramas de la ciencia y que se pueden representar por medio de un conjunto de ecuaciones no lineales en forma simultánea.

Si las ecuaciones forman una buena descripción de esta problemática, las ecuaciones tendrán una solución que corresponderá a un estado real del sistema; aunque puede ser muy difícil probar solamente por medio de las matemáticas que una solución existe, ésta se puede inferir con las analogías físicas.

*Similarmente aunque la solución puede no ser única, se espera crear un buen estimado inicial para que la solución que se encuentre, mediante cualquier proceso iterativo; sea en realidad una solución físicamente significativa.*

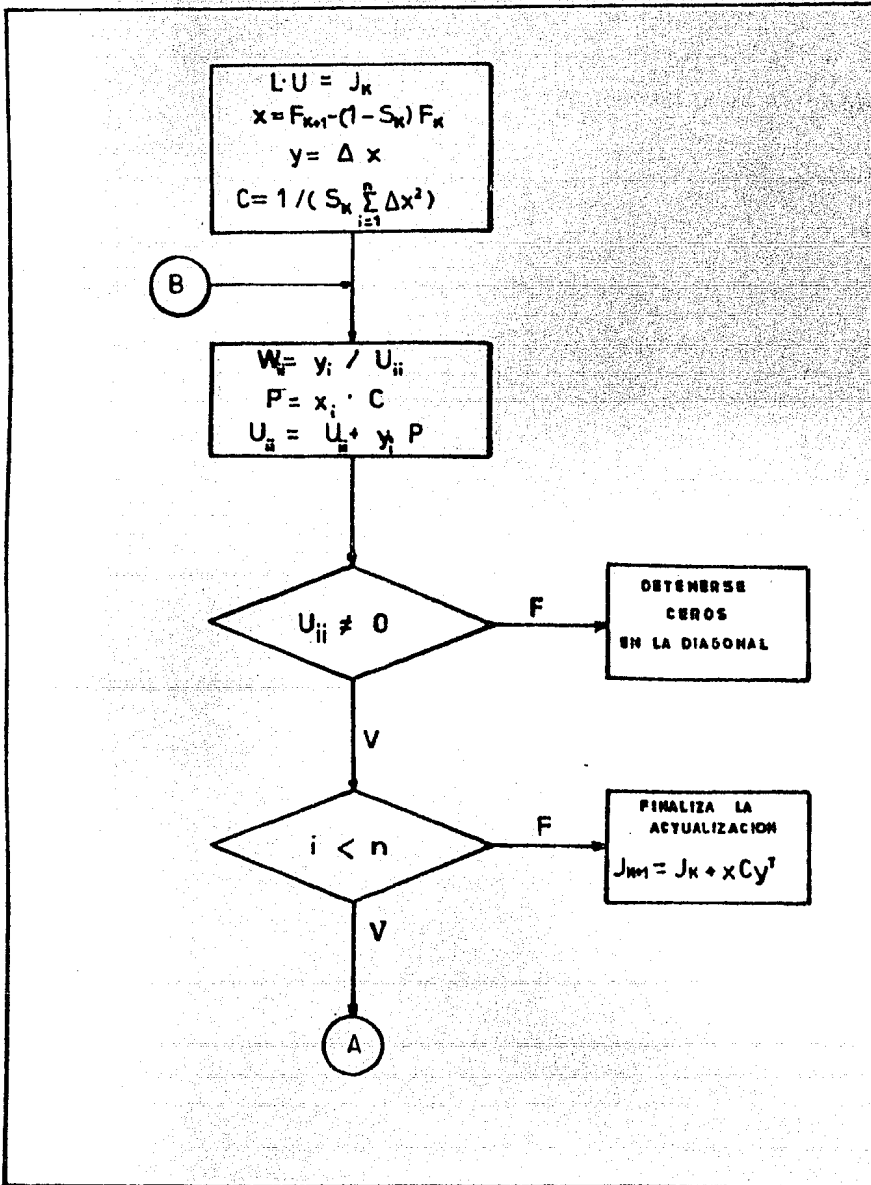


FIG. 2.1 ALGORITMO DE BENNETT



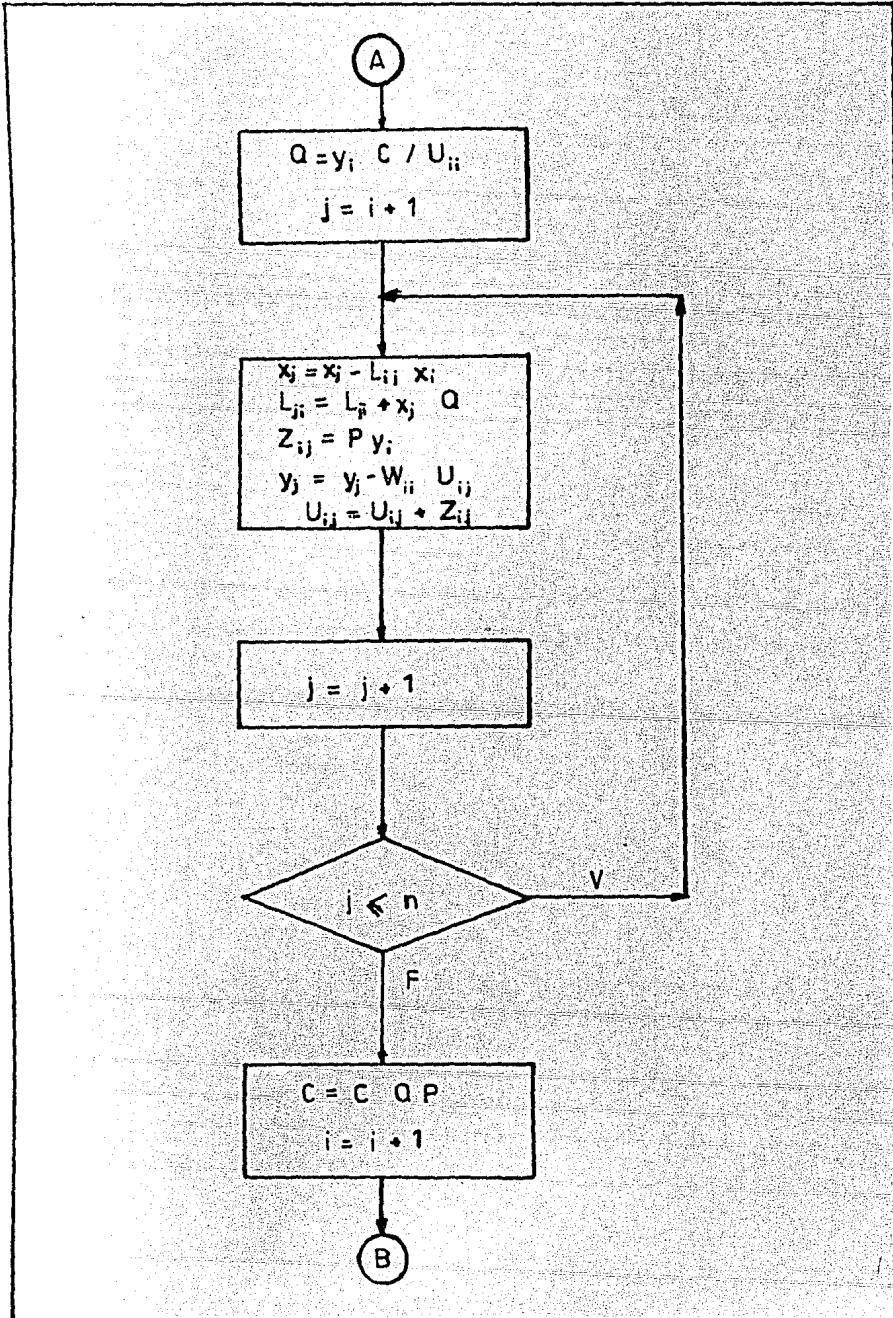


FIG. 2.1 (CONTINUACION)

*Sin especulación no hay una buena observación original.*

**CHARLES DARWIN**

## CAPITULO 3

METODO DEL PUNTO DE BURBUJA

El método de punto de ebullición o de burbuja que utiliza el algoritmo de la matriz tridiagonal fue propuesto y desarrollado por J.C. Wang y G.E. Henke en el año de 1966 y se clasifica como un método de corte con agrupación de ecuaciones por tipo (1).

Este algoritmo se utiliza principalmente para resolver problemas de destilación, en donde los componentes tienen rangos de volatilidad cercanos.

Este método requiere además del algoritmo de Thomas para la resolución de la matriz tridiagonal y el método de Müller para la convergencia del perfil de temperaturas dentro de la columna.

Siguiendo el análisis de grados de libertad efectuado en el capítulo 1 se tiene:

VARIABLES DE CORTE

- Temperatura.
- Flujos de vapor.
- Flujos de líquido.
- Composiciones mol en la fase vapor.
- Composiciones mol en la fase líquida.

VARIABLES DE ESPECIFICACION

- Flujos de alimentaciones.
- Presión de cada alimentación.
- Salidas laterales de líquido (número y flujo).
- Salidas laterales de vapor (número y flujo).

- Temperatura de cada alimentación.
- Presión de cada etapa de equilibrio.
- Composiciones de cada una de las alimentaciones.
- Relación de reflujo externo.
- Destilado (cantidad y fase).
- Cargas térmicas en cada etapa de equilibrio a excepción de  $Q_1$  (condensador) y  $Q_N$  (rehevador).
- El número total de etapas de equilibrio.

El algoritmo de Wang y Henke consiste en forma detallada de las siguientes fases:

- 1).- Como todo método de solución, "el paso inicial es de conceptualizar y especificar el problema al que se desea dar solución.
- 2).- Para iniciar las iteraciones, hay que suponer un perfil de valores para las dos variables de corte utilizadas con mayor frecuencia - que son: la temperatura y el flujo de vapor en cada etapa de que consta la Torre de Destilación.

La suposición del perfil de temperaturas se realiza por medio de una variación lineal; teniendo como límites la temperatura de burbuja y la temperatura de rocío y además utilizando el número total de etapas.

Para el flujo de vapor, basta con establecer un perfil constante a lo largo del equipo con la ayuda de las alimentaciones y salidas laterales de esta fase.

- 3).- Esta fase consiste en calcular las composiciones de cada compuesto en la fase líquida, por medio del algoritmo de Thomas y con el cálculo de las relaciones de equilibrio correspondientes.

Esto se logra de la siguiente manera:

La relación de equilibrio ec.(1.4) y el Balance General de Masa ec.(1.8), deben substituirse en la ecuación del Balance de Masa por Componente ec. (1.2); con el objeto de eliminar los términos de las composiciones en la fase vapor  $y_{ij}$  y flujo de líquido ( $L_j$ ); suponiendo además que no existe reacción química y así se obtiene:

$$\begin{aligned}
 M_{ij} = & [V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - U_m - W_m) - V_1] x_{ij-1} \\
 & + V_{j+1} K_{ij+1} x_{ij+1} + F_j z_{ij} - [V_{j+1} \\
 & + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 + U_j] x_{ij} - (V_j + W_j) K_{ij} x_{ij}
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

ordenando:

$$\begin{aligned}
 [V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - U_m - W_m) - V_1] x_{ij-1} - [V_{j+1} \\
 + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 + U_j + (V_j + W_j) K_{ij}] x_{ij} \\
 + V_{j+1} K_{ij+1} x_{ij+1} = - F_j z_{ij}
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

donde:

$U_m$  = salida lateral de líquido en la etapa m.

$W_m$  = salida lateral de vapor en la etapa m.

Definiendo  $A, B, C, D$  de la siguiente manera:

$$A_j = V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - U_m - W_m) - V_1$$

$$2 \leq j \leq N$$

$$B_j = - (V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1$$

$$+ U_j + (V_j + W_j) K_{ij}^j)$$

$$1 \leq j \leq N$$

$$C_j = V_{j+1} K_{ij+1}$$

$$1 \leq j \leq N-1$$

$$D_j = - F_j E_{ij}$$

$$1 \leq j \leq N$$

entonces:

$$A_j X_{ij-1} + B_j X_{ij} + C_j X_{ij+1} = D_j \quad (3.3)$$

suponiendo cinco etapas se puede obtener la siguiente matriz:

$$\begin{array}{cccc|c|c|c} B_1 & C_1 & & & X_{i1} & & D_1 \\ A_2 & B_2 & C_2 & & X_{i2} & & D_2 \\ & A_3 & B_3 & C_3 & X_{i3} & = & D_3 \\ & & A_4 & B_4 & C_4 & & D_4 \\ & & & A_5 & B_5 & & D_5 \end{array} \quad 1 \leq i \leq C \quad (3.4)$$

y resolviendo por el algoritmo de Thomas para las fracciones mol del líquido, se obtienen las ecuaciones generales:

$$p_j = \frac{C_j}{B_j - A_j p_{j-1}}, \quad q_j = \frac{D_j - A_j q_{j-1}}{B_j - A_j p_{j-1}} \quad (3.5)$$

De esta manera se logra la transformación de la ecuación (3.3), en la ecuación (3.6).

$$\begin{array}{cccc|c|c|c} 1 & p_1 & 0 & 0 & 0 & X_{i1} & q_1 \\ 0 & 1 & p_2 & 0 & 0 & X_{i2} & q_2 \\ 0 & 0 & 1 & p_3 & 0 & X_{i3} & q_3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & p_4 & X_{i4} & q_4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & X_{i5} & q_5 \end{array} \quad (3.6)$$

como se puede observar:

$$X_{i5} = q_5, \text{ es decir } X_{iN} = q_N \quad (3.7)$$

haciendo sustituciones regresivas y generalizando se tiene:

$$X_{ij-1} = q_{j-1} - p_{j-1} X_{ij} = r_{j-1} \quad 1 \leq j \leq N-1 \quad (3.8)$$

Si se desea se puede utilizar en lugar del algoritmo de Thomas, el algoritmo de Thomas modificado llamado de Boston y Sullivan (que se explica con detalle en el apéndice "A"; así como más detalles del algoritmo de Thomas).

Si las relaciones de equilibrio son dependientes además de la composición; se supone entonces un perfil de  $X_{ij}$  y otro de  $Y_{ij}$ ; calculando dichas relaciones para ser sustituidas en la ecuación (3.4) y obtener así un nuevo estimado de las composiciones en la fase líquida.

4).- En este momento el paso a realizar es el de normalizar las composiciones anteriores mediante la ecuación:

$$X_{ij} = \frac{X_{ij}}{\sum_{i=1} X_{ij}} \quad 1 \leq j \leq N \quad (3.9)$$



- 5).- Con las composiciones normalizadas a continuación se puede calcular el nuevo perfil de temperaturas en la columna, mediante la ecuación del punto de burbuja (de ahí que se deriva el nombre del método):

c

$$\sum_{i=1}^c K_{ij} X_{ij} - 1 = 0 \quad (3.10)$$

$K_{ij}$  se supone en función de la temperatura y se resuelve la ecuación por un método iterativo.

Wang y Henke proponen utilizar para este propósito el Método de Müller (2) (ver apéndice "A"), pero también se puede utilizar derivas y el método de Newton-Rapshon.

- 6).- Una vez que se tiene el perfil de temperaturas se calculan las composiciones mol de la fase vapor mediante la ecuación:

$$Y_{ij} = K_{ij} X_{ij} \quad (3.11)$$

- 7).- A continuación se calculan las entalpías de las corrientes internas de líquido y de vapor. Se pueden utilizar para este cálculo ecuaciones de estado o polinomios como los siguientes:

$$h_j = \sum_{i=1}^c X_{ij} (C_{1i} + C_{2i} T_j + C_{3i} T_j^2 + C_{4i} T_j^3) \quad (3.12)$$

$$H_{vj} = \sum_{i=1}^c Y_{ij} (b_{1i} + b_{2i} T_j + b_{3i} T_j^2 + b_{4i} T_j^3) \quad (3.13)$$

8).- Dado que se tienen como datos a  $V_1$  y  $V_2$  se pueden obtener las cargas térmicas, tanto del condensador como la del re-  
hervidor mediante las ecuaciones:

$$Q_C = V_2 H_{v2} + F_1 H_{f1} - (L_1 + U_1) h_1 - (V_1 + W_1) H_{v1} \quad (3.14)$$

$$Q_R = L_{N-1} h_{N-1} - V_N H_{vN} - \left[ \sum_{m=1}^N (F_m - U_m - W_m) - V_1 \right] h_N \quad (3.15)$$

Combinando la ecuación del balance de entalpías ec. (1.6) y el balance global de materia ec. (1.8), con el objeto de eliminar los términos que representan el flujo de líquido se obtiene; suponiendo que no existe reacción química:

$$H_j = [V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - U_m - W_m) - V_1] h_{j-1} + V_{j+1} H_{v,j+1} + F_j H_{fj} - Q_j - [V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 + U_j] h_j - (V_j + W_j) H_{vj}$$

rearrreglando:

$$V_j (h_{j-1} - H_{vj}) + V_{j+1} (H_{v,j+1} - h_j) = Q_j - F_j H_{fj} + V_1 (h_{j-1} - h_j) + U_j h_j + W_j H_{vj} - \left[ \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - U_m - W_m) \right] h_{j-1} + \left[ \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) \right] h_j$$

finalmente:

$$\alpha_j v_j + \beta_j v_{j+1} = \gamma_j \quad (3.16)$$

donde:

$$\alpha_j = h_{j-1} - H_{vj}$$

$$\beta_j = H_{vj+1} - h_j$$

$$\begin{aligned} \gamma_j = & Q_j - F_j H_{fj} + V_1 (h_{j-1} - h_j) + V_j h_j + W_j H_{vj} \\ & - \left[ \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - U_m - W_m) \right] h_{j-1} + \left[ \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) \right] h_j \end{aligned}$$

o bien:

$$\alpha_j v_j + \beta_j v_{j+1} = \delta_j \quad (3.17)$$

donde:

$$\begin{aligned} \delta_j = & Q_j + F_j (h_j - H_{fj}) + W_j (H_{vj} - h_j) + \\ & \left[ \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - U_m - W_m) - V_1 \right] (h_j - h_{j-1}) \end{aligned}$$

En forma matricial se tiene:

$$\left( \begin{array}{cccc|c|ccc} \beta_2 & 0 & 0 & 0 & v_3 & \delta_2 & \alpha_2 & v_2 \\ \alpha_3 & \beta_3 & 0 & 0 & v_4 & \delta_3 & & \\ 0 & \alpha_4 & \beta_4 & 0 & v_5 & \delta_4 & & \\ 0 & 0 & \alpha_{N-1} & \beta_{N-1} & v_N & \delta_{N-1} & & \end{array} \right) \quad (3.18)$$

resolviendo:

$$v_3 = \frac{\delta_2 - \alpha_2 v_2}{\beta_2}$$

$$\alpha_3 v_3 + \beta_3 v_4 = \delta_3$$

$$v_4 = \frac{\delta_3 - \alpha_3 v_3}{\beta_3} = \frac{\delta_3 - \alpha_3 \left[ \frac{\delta_2 - \alpha_2 v_2}{\beta_2} \right]}{\beta_3}$$

en general:

$$v_j = \frac{\delta_{j-1} - \alpha_{j-1} v_{j-1}}{\beta_{j-1}} \quad 3 \leq j \leq N \quad (3.19)$$

10).- Siguiendo con este método de corte, se está en la posibilidad de recalcular el perfil para el flujo de líquido utilizando el balance global de materia. *eo.* (1.8), sin reacción química:

$$L_j = v_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - v_1$$

(1.8)

11).- Una vez que se han generado todos los perfiles de las variables de iteración se puede verificar el criterio de convergencia:

$$\sum_{j=1}^N \Delta T_j^2 = \sum_{j=1}^N [T_j^k - T_j^{k-1}]^2 < \epsilon_T$$

$$\epsilon_T = 0.001 N \quad k = \text{No. iteración}$$

(3.20)

Si el criterio no se satisface se debe regresar al punto número 3 de esta descripción, e iniciar una nueva iteración hasta el cumplimiento de la ecuación anterior.

*A los ojos del hombre de imaginación, la naturaleza es la imaginación misma.*

**WILLIAM BLAKE**

## C A P I T U L O 4

METODO DE SUMA DE FLUJOS

Como se habia visto con anterioridad, este método también pertenece a los métodos de corte, pero su enfoque va dirigido principalmente a la separación de componentes cuyos rangos de volatilidad son amplios y requieren por esta condición utilizar la técnica de separación conocida como: Absorción y en algunos casos la de agotamiento.

A diferencia del Método de Wang-Henke, en el que se utiliza la técnica del punto de burbuja en este algoritmo se utiliza la técnica conocida como "SUM-RATES" y que se presentará en su momento.

Basándose en el análisis de grados de libertad realizado, en este momento se tiene la posibilidad de especificar las variables de iteración o de corte; así como las variables independientes.

VARIABLES DE CORTE SELECCIONADAS

- Temperaturas
- Flujos de vapor.
- Flujos de líquido
- Composiciones de cada fase en cada etapa de equilibrio.

VARIABLES INDEPENDIENTES O ESPECIFICACIONES DEL PROBLEMA

- Flujos de las alimentaciones.
- Composiciones de cada uno de las especies químicas en cada una de las alimentaciones.
- Temperaturas de las corrientes de alimentación.

- Presión de las corrientes de alimentación.
- Presión en cada etapa de equilibrio.
- Flujos de las salidas laterales de vapor.
- Flujos de las salidas laterales de líquido.
- Cargas térmicas a lo largo de la columna.
- Número total de etapas de equilibrio.

El desarrollo de este algoritmo de solución fue propuesto por D.W. Birmingham y Fred. D. Otto. (1) y en el cual se utilizan las ecuaciones MESH., previamente descritas.

A continuación se presenta en forma detallada el Método:

- 1.- Definir el problema que se desea resolver; es decir, especificar las variables independientes.
- 2.- Para iniciar los cálculos es necesario suponer el conjunto inicial de valores para las siguientes variables de corte, temperatura y flujo - de vapor a lo largo del equipo.

En cuanto a las temperaturas se supone un perfil lineal a lo largo de la columna, ayudándose con la especificación de la temperatura en el - Domo, con la temperatura del fondo y con el número total de etapas; o bien si no se desean los perfiles de esta manera se pueden fijar cantidades para estas variables en cada etapa.

- 3.- Con lo anterior se cuenta con dos variables de corte y se tiene la posibilidad de calcular otra que será la composición en la fase líquida. Esto se puede hacer de la misma manera que con el Método del Punto de Burbuja; es decir:



Se sustituye la ecuación ( 1.4 ), en la ecuación del Balance de materia por componente (ec. 1.2 ); con objeto de eliminar las fracciones mol de la fase vapor obteniéndose:

$$C_{ij} = L_{j-1} X_{ij-1} + V_{j+1} K_{ij+1} X_{ij+1} + F_j Z_{ij} - (L_j + U_j) X_{ij} - (V_j + W_j) K_{ij} X_{ij} + r_{ij} \quad (4.1)$$

El paso siguiente es sustituir el Balance Global de Materia ecuación ( 1.8 ), en la ecuación (4.1), con el propósito de eliminar el término que representa el Flujo de Líquido  $L_j$ ; suponiendo que no existe reacción química:

$$C_{ij} = [V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - U_m - W_m) - V_1] X_{ij-1} + V_{j+1} K_{ij+1} X_{ij+1} + F_j Z_{ij} - [V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1] X_{ij} - (V_j + W_j) K_{ij} X_{ij} - V_j X_{ij} \quad (4.2)$$

Agrupando los términos en función de las fracciones mol del líquido  $X$ 's por etapa se obtiene la ecuación:

$$A_j X_{ij-1} + B_j X_{ij} + C_j X_{ij+1} = D_j \quad (4.3)$$

donde:

$$A_j = V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - U_m - W_m) - V_j$$

$$B_j = -[V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 + U_j + (V_j + W_j) K_{ij}]$$

$$C_j = V_{j+1} K_{ij+1}$$

$$D_j = -F_j Z_{ij}$$

y con esto se puede construir una matriz tridiagonal con  $X_{i0} = 0, U_N = 0$  y  $V_{N+1} = 0$ ; teniendo la siguiente estructura:

$$\begin{pmatrix} B_1 & C_1 & & & \\ A_2 & B_2 & C_2 & & \\ & A_3 & B_3 & C_3 & \\ & & \vdots & \vdots & \\ & & & A_N & B_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_{i1} \\ X_{i2} \\ X_{i3} \\ \vdots \\ X_{iN} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ \vdots \\ D_N \end{pmatrix} \quad 1 \leq i \leq c$$

A continuación se utiliza el algoritmo de Thomas (descrito en el capítulo anterior), se resuelve para las  $X_{ij}$ , previo cálculo de las correspondientes relaciones de equilibrio.

Si las relaciones de equilibrio son dependientes de la composición, se puede suponer un perfil inicial de  $X_{i,j}$ ; otro de  $Y_{i,j}$  y después se calculan las relaciones de equilibrio para utilizarse en la Matriz Triagonal previamente descrita.

- 4.- Con la información generada con anterioridad, se obtiene el perfil del flujo de líquido a partir de las ecuaciones (1.8) y (1.8a), sin reacción química:

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad 1 \leq j \leq N-1 \quad (1.8)$$

$$L_N = \sum_{m=1}^N (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad j = N \quad (1.8a)$$

- 5.- A diferencia del Método de Punto de Burbuja, no se normalizan los valores de  $X_{i,j}$ , pero se utilizan para producir las correcciones del perfil del flujo de líquido; mediante la ecuación de Suma de Flujos (Técnica de Sum-Rates):

$$L_j^{k+1} = L_j^k + \sum_{i=1}^c X_{i,j} \quad (4.4)$$

donde  $k = \text{No. de iteración}$

- 6.- El paso siguiente es obtener nuevos valores para las  $V_j$  's, utilizando el Balance Total de Materia ec. (1.1), despejando a  $V_j$  se tiene, suponiendo que no existe reacción química:

$$V_1 = L_1 + F_1 - U_1 - W_1 + V_2 \quad j=1 \quad (4.5)$$

$$V_j = L_{j-1} - L_j + F_j - U_j - W_j + V_{j+1} \quad 2 \leq j \leq N-1 \quad (4.6)$$

$$V_N = L_{N-1} - L_N - U_N - W_N \quad j=N \quad (4.7)$$

o usando:

$$V_j = L_{j-1} - L_N + \sum_{m=j}^N (F_m - W_m - U_m) \quad (4.8)$$

La deducción de esta fórmula se encuentra en el apéndice "A".

7).- A continuación se normalizan las fracciones de la fase líquida en cada etapa, para calcular las fracciones en la fase vapor con la ec. ( 1.4 )

Con la información anterior, se puede recalcular las temperaturas en cada plato; ayudándose del Balance de Energía ec. ( 1.6 ), para cada etapa. Formando un conjunto de ecuaciones " lineales " y resolviéndolas en forma simultánea de la siguiente manera:

Si el perfil de temperaturas existente fuera el correcto,  $H_j$  definido en la ec. ( 1.6 ), debería ser cero para toda "j"; en el caso contrario se utiliza una serie de Taylor Truncada para obtener el nuevo perfil de la siguiente manera:

$$(H_j)^{k-1} = (H_j)^k + dH_j^k \quad (4.9)$$

donde:

$$dH_1 = (\partial H_1 / \partial T_1) dT_1 + (\partial H_1 / \partial T_2) dT_2 \quad (4.10)$$

$$dH_j = (\partial H_j / \partial T_{j-1}) dT_{j-1} + (\partial H_j / \partial T_j) dT_j + (\partial H_j / \partial T_{j+1}) dT_{j+1} \quad (4.11)$$

$$dH_N = (\partial H_N / \partial T_{N-1}) dT_{N-1} + (\partial H_N / \partial T_N) dT_N \quad (4.12)$$

Las derivadas parciales dependen de las correlaciones o ecuaciones para predecir la entalpía.

Desarrollando los términos se tiene:

$$A_j = \frac{\partial H_j}{\partial T_{j-1}} = -L_{j-1} \left( \frac{\partial h_{j-1}}{\partial T_{j-1}} \right) \quad (4.13)$$

$$B_j = \frac{\partial H_j}{\partial T_j} = -(L_j + U_j) \left( \frac{\partial h_j}{\partial T_j} \right) - (V_j + W_j)$$

$$\left( \frac{\partial H_{U_j}}{\partial T_j} \right) \quad (4.14)$$

$$C_j = \frac{\partial H_j}{\partial T_{j+1}} = V_{j+1} \left( \frac{\partial H_{V_{j+1}}}{\partial T_{j+1}} \right) \quad (4.15)$$

Los términos  $\partial H_j / \partial T_j$  y  $\partial h / \partial T$ , son en realidad la capacidad calorífica de las corrientes de vapor y líquido a la temperatura " T " y éstas se pueden evaluar numéricamente o analíticamente; por lo que el valor deseado de  $( H_j )^{k+1}$  de cero se puede escribir como:

$$A_j \Delta T_{j-1} + B_j \Delta T_j + C_j \Delta T_{j+1} = D_j \quad 2 \leq j \leq N-1$$

(4.16)

donde:

$$D_j = - H_j$$

La ecuación (4.16), forma un conjunto de ecuaciones lineales agrupadas en una matriz tridiagonal, que se pueden resolver para las  $\Delta T_j$ 's; utilizando nuevamente el algoritmo de Thomas.

Las  $\Delta T_j$ 's, representan las correcciones a las temperaturas existentes y se aplican a éstas últimas de la siguiente forma:

$$T_j^{k+1} = T_j^k + \Delta T_j^k \quad (4.17)$$

o utilizando:

$$\bar{T}_j^{k+1} = \bar{T}_j^k + w \Delta T_j^k \quad (4.18)$$

donde "w" es un escalar llamado factor de atenuación o de peso o de amortiguamiento que se utiliza para asegurar la convergencia; ya que ésta depende en gran medida de las suposiciones iniciales de temperatura y flujos de vapor.

8.- Una vez que se genera el perfil de temperaturas se verifica el criterio de convergencia (propuesto por Seader (2)).

$$\sum_{j=1}^N \frac{T_j^k - T_j^{k+1}}{T_j^k} + \sum_{j=1}^N \frac{V_j^k - V_j^{k-1}}{V_j^k} \leq \epsilon \quad (4.19)$$

o bien:

$$\sum_{j=1}^N [T_j^k - T_j^{k-1}] \leq \epsilon \quad (4.20)$$

donde  $\epsilon$  es una tolerancia previamente establecida o fija como 0.001 N

Si no se cumple se debe realizar una nueva iteración y así hasta obtener la solución (regresar al paso #3). Es recomendable según Seader ajustar los valores de las variables de corte para iniciar una nueva iteración; por ejemplo: cambiar valores negativos a cifras cercanas a cero, pero - positivas mediante:

$$X^{k+1} = X^k \exp \left( \frac{w \cdot \Delta X}{X^k} \right) \quad (4.21)$$

Por otra parte, para evitar oscilaciones se establecen límites para los valores, tanto para  $V_j$ 's como para  $T_j$ 's; que pueden ser entre un diez y un quince por ciento.

*... las vendas cayeron de mis ojos, las dudas se desvanecieron y una sensación de tranquila certidumbre ocupó su lugar.*

*LOTHAR MEYER AL LEER LA EXPLICACION DE CANIZZARO*

*SOBRE LA HIPOTESIS DE AVOGADRO*



## C A P I T U L O 5

METODO DE ISHII - OTTO

A continuación se presenta el Método creado por Yoshikazu Ishii y Fred D. Otto (1), que emplea un procedimiento multivariable de Newton para resolver en forma simultánea todas las ecuaciones que constituyen al modelo generalizado visto con anterioridad.

En este método todas las ecuaciones del modelo, los balances de masa, el balance de energía y la sumatoria de las composiciones se aproximan en forma linealizada. Las ecuaciones linealizadas entonces se resuelven todas al mismo tiempo, para obtener los flujos de temperatura, composiciones y los perfiles tanto de líquido como de vapor.

5.1 LINEALIZACION DE LAS ECUACIONES

Una función no lineal multivariable,  $f(x)$ , se aproxima frecuentemente de la manera siguiente:

$$\begin{aligned} & f(x_1 + \Delta x_1, x_2 + \Delta x_2, \dots, x_n + \Delta x_n) \\ & = f(x_1, x_2, \dots, x_n) + \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} \Delta x_i \end{aligned}$$

(5.1)

si fijando:

$$f(x_1 + \Delta x_1, x_2 + \Delta x_2, \dots, x_n + \Delta x_n) = 0$$

Sin embargo, ligeras modificaciones de los procedimientos estándares de linealización se utilizaron en el trabajo realizado por Ishii y Otto; para obtener una estructura matricial conveniente para su mejor manipulación.

Las ecuaciones que serán linealizadas son:

- Balance General de Materia

$$M_j = F_j + L_{j-1} + V_{j+1} - (L_j + SL_j) - (V_j + SV_j) = 0 \quad 1 \leq j \leq N$$

- Balance de Materia por componente:

$$C_{ij} = F_j x_{ij} + L_{j-1} x_{j-1} + V_{j+1} K_{ij+1} x_{ij+1} - (L_j + SL_j) x_{ij} - (V_j + SV_j) K_{ij} x_{ij} = 0$$

para  $i = 1, 2, \dots, c$   
para  $j = 1, 2, \dots, N$

- Balance de entalpías:

$$E_j = F_j H_{Fj} - Q_j + L_{j-1} h_{j-1} + V_{j+1} H_{j+1} - (L_j + SL_j) h_j - (V_j + SV_j) H_j = 0$$

para  $j = 1, 2, \dots, N$

- Ecuación de equilibrio:

$$S_j = \sum_{i=1}^c x_{ij} - 1.0 = 0$$

o

$$S_j = \sum_{i=1}^c y_{ij} - 1.0 = 0 \quad \text{para } j = 1, 2, \dots, N$$

Las ecuaciones ya linealizadas quedan de la forma

A).- Balance Global de Materia:

$$-M_j = \Delta L_{j-1} + \Delta V_{j+1} - \Delta L_j - \Delta V_j \quad \text{para } j=2,3,\dots,N-1$$

de aquí se deduce:

$$\Delta L_j = \sum_{k=1}^j M_k + \Delta V_{j+1} - \Delta V_1 \quad \text{para } j=1,2,\dots,N-1$$

(5.2)

La deducción de la fórmula anterior se encuentra en el apéndice "A".

B).- Balance de Materia por Componente:

$$\begin{aligned} & L_{j-1} \Delta X_{ij-1} - I(L_j + S L_j) + (V_j + S V_j) (X_{ij} + X_{ij}) \frac{\partial K_{ij}}{\partial X_{ij}} \Delta X_{ij} \\ & + V_{j+1} (K_{ij+1} + X_{ij+1}) \frac{\partial K_{ij+1}}{\partial X_{ij+1}} \Delta X_{ij+1} \\ & + X_{ij-1} \Delta L_{j-1} - X_{ij} \Delta L_j - (V_j + S V_j) X_{ij} \frac{\partial K_{ij}}{\partial T_j} \Delta T_j \\ & + V_{j+1} X_{ij+1} \frac{\partial K_{ij+1}}{\partial T_{j+1}} \Delta T_{j+1} - K_{ij} X_{ij} \Delta V_j + X_{ij+1} X_{ij+1} \Delta V_{j+1} \\ & = -C_{ij} \end{aligned}$$

para  $j=2,3,\dots,N-1$

para  $i=1,2,\dots,c$

(5.3)

C).- Balance de Energía:

$$L_{j-1} \frac{\partial h_{j-1}}{\partial T_{j-1}} \Delta T_{j-1} - [ (V_j + SV_j) \frac{\partial H_j}{\partial T_j} + (L_j + SL_j) \frac{\partial h_j}{\partial T_j} ]$$

$$\Delta T_j + V_{j+1} \frac{\partial H_{j+1}}{\partial T_{j+1}} \Delta T_{j+1} + \Delta L_{j-1} h_{j-1} - \Delta V_j H_j -$$

:

$$\Delta L_j h_j + \Delta V_{j+1} H_{j+1} = - E_j \quad \text{para } j=2, 3, \dots, N$$

(5.4)

D).- Sumatoria de las composiciones:

$$\sum_{i=1}^c \Delta X_{ij} = - S_j \quad \text{para } j=1, 2, \dots, N$$

(5.5)

Para realizar la linealización anterior se supuso que:

$$K_{ij} = K_{ij} (P_j, T_j, X_{ij})$$

$$H_j = H_j (P_j, T_j)$$

$$h_j = h_j (P_j, T_j)$$

CONSTRUCCION DE LAS MATRICES

Se sustituye la ecuación (5.2), en la ecuación (5.3) con el objeto de eliminar los términos de  $\Delta L_j$  :

$$\begin{aligned}
 & L_{j-1} \Delta X_{ij-1} - [(L_j + SL_j) + (V_j + SV_j) (K_{ij} + X_{ij} \frac{\partial K_{ij}}{\partial X_{ij}})] \\
 & \Delta X_{ij} + V_{j+1} (K_{ij+1} + X_{ij+1} \frac{\partial K_{ij+1}}{\partial X_{ij+1}}) \Delta X_{ij+1} - (V_j + \\
 & SV_j) X_{ij} \frac{\partial K_{ij}}{\partial T_j} \Delta T_j + V_{j+1} X_{ij+1} \frac{\partial K_{ij+1}}{\partial T_{j+1}} \Delta T_{j+1} + \\
 & (X_{ij} - X_{ij-1}) \Delta V_1 + (X_{ij-1} - K_{ij} X_{ij}) \Delta V_j + (K_{ij+1} X_{ij+1} \\
 & - X_{ij}) \Delta V_{j+1} = - C_{ij} + \sum_{k=2}^j M_k X_{ij} - X_{ij-1} \sum_{k=2}^{j-1} M_k \\
 & - M_1 (X_{ij-1} - X_{ij})
 \end{aligned}$$

(5.6)

formando la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned}
 & a_j \Delta X_{ij-1} + b_j \Delta X_{ij} + c_j \Delta X_{ij+1} + d_{ij} \Delta T_j \\
 & + e_j \Delta T_{j+1} + \alpha_j \Delta V_1 + f_j \Delta V_j + g_j \Delta V_{j+1} = m_{ij}
 \end{aligned}$$

(5.7a)

donde:

$$a_j = L_{j-1}$$

$$b_j = -[(L_j + SL_j) + (V_j + SV_j) (K_{ij} + X_{ij} \frac{\partial K_{ij}}{\partial X_{ij}})]$$

$$c_j = V_{j+1} (K_{ij+1} + X_{ij+1} \frac{\partial K_{ij+1}}{\partial X_{ij+1}})$$

$$d_j = - (V_j + SV_j) X_{ij} \frac{\partial K_{ij}}{\partial T_j}$$

$$e_j = V_{j+1} X_{ij+1} \frac{\partial K_{ij+1}}{\partial T_{j+1}}$$

$$\alpha_j = X_{ij} - K_{ij-1} X_{ij-1}$$

$$f_j = X_{ij-1} - K_{ij} X_{ij}$$

$$g_j = - (X_{ij} - K_{ij+1} X_{ij+1})$$

$$m_j = X_{ij} \sum_{k=2}^j M_k - X_{ij-1} \sum_{k=2}^{j-1} M_k - C_{ij} - M_1 (X_{ij-1} - X_{ij})$$

en forma matricial se tiene (eliminando por comodidad el subíndice "i").

$a_1$	$b_1$	$c_1$			$\Delta X_1$	
$a_2$	$b_2$	$c_2$			$\Delta X_2$	
	$a_3$	$b_3$	$c_3$		$\Delta X_3$	
		$\vdots$			$\vdots$	
		$a_j$	$b_j$	$c_j$	$\Delta X_j$	+
		$\vdots$			$\vdots$	
			$a_{n-1}$	$b_{n-1}$	$c_{n-1}$	$\Delta X_{n-1}$
				$a_n$	$b_n$	$\Delta X_n$

$d_1$	$e_1$					$\Delta T_1$	
	$d_2$	$e_2$				$\Delta T_2$	
		$d_3$	$e_3$			$\Delta T_3$	
			$\vdots$			$\vdots$	
			$d_j$	$e_j$		$\Delta T_j$	+
			$\vdots$			$\vdots$	
				$d_{n-1}$	$e_{n-1}$	$\Delta T_{n-1}$	
					$d_n$	$\Delta T_n$	

$\alpha_1 + f_1$	$g_1$			$\Delta V_1$	$m_1$
$\alpha_2$	$f_2$	$g_2$		$\Delta V_2$	$m_2$
$\alpha_3$		$f_3$	$g_3$	$\Delta V_3$	$m_3$
$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$
$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$
$\alpha_j$		$f_j$	$g_j$	$\Delta V_j$	$m_j$
$\vdots$			$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$\vdots$			$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$\alpha_{n-1}$		$f_{n-1}$	$g_{n-1}$	$\Delta V_{n-1}$	$m_{n-1}$
$\alpha_n$			$f_n$	$\Delta V_n$	$m_n$

(5.7 b)

Haciendo algo similar para el Balance de Energía, la ecuación (5.2) en la ecuación (5.4) se sustituye:

$$\begin{aligned}
 & L_{j-1} \frac{\partial h_{j-1}}{\partial T_{j-1}} \Delta T_{j-1} - (V_j + SV_j) \frac{\partial H_j}{\partial T_j} + (L_j + SL_j) \frac{\partial h_j}{\partial T_j} \Delta T_j \\
 & + V_{j+1} (\partial H_{j+1} / \partial T_{j+1}) \Delta T_{j+1} + (h_j - h_{j-1}) \Delta V_1 + (h_{j-1} - H_j) \Delta V_j \\
 & + (H_{j+1} - h_j) \Delta V_{j+1} = -E_j + h_j \sum_{k=2}^j M_k - h_{j-1} \sum_{k=1}^{j-1} M_k - M_1
 \end{aligned}$$

$$(h_{j-1} - h_j)$$

(5.8)



formando la ecuación:

$$p_j \Delta T_{j-1} + q_j \Delta T_j + r_j \Delta T_{j+1} + \beta_j \Delta V_1 + s_j \Delta V_j + t_j \Delta V_{j+1} = u_j \quad (5.9 a)$$

donde:

$$p_j = L_{j-1} \frac{\partial h_{j-1}}{\partial T_{j-1}}$$

$$q_j = - [ (V_j + SV_j) \frac{\partial H_j}{\partial T_j} + (L_j + SL_j) \frac{\partial h_j}{\partial T_j} ]$$

$$r_j = V_{j+1} \frac{\partial H_{j+1}}{\partial T_{j+1}}$$

$$\beta_j = h_j - h_{j-1}$$

$$s_j = h_{j-1} - H_j$$

$$t_j = H_{j+1} - h_j$$

$$u_j = -E_j + h_j \sum_{k=2}^j M_k - h_{j-1} \sum_{k=2}^{j-1} M_k - (h_{j-1} - h_j) M_1$$

en forma matricial se tiene:

$  \begin{array}{cccc}  r_1 & & & \\  p_2 & q_2 & r_2 & \\  & p_3 & q_3 & r_3 \\  & & \vdots & \\  & & p_j & q_j & r_j \\  & & & \vdots & \\  & & & p_{n-1} & q_{n-1} & r_{n-1} \\  & & & & p_n & q_n  \end{array}  $	$  \begin{array}{c}  \Delta T_1 \\  \Delta T_2 \\  \Delta T_3 \\  \vdots \\  \Delta T_j \\  \vdots \\  \Delta T_{n-1} \\  \Delta T_n  \end{array}  $	
$  \begin{array}{cccc}  s_1 + s_1 & t_1 & & \\  & s_2 & t_2 & \\  & & s_3 & t_3 \\  & & & \vdots \\  & & & s_j & t_j \\  & & & & \vdots \\  & & & & s_{n-1} & t_{n-1} \\  & & & & & s_n  \end{array}  $	$  \begin{array}{c}  \Delta V_1 \\  \Delta V_2 \\  \Delta V_3 \\  \vdots \\  \Delta V_j \\  \vdots \\  \Delta V_{n-1} \\  \Delta V_n  \end{array}  $	$  \begin{array}{c}  u_1 \\  u_2 \\  u_3 \\  \vdots \\  u_j \\  \vdots \\  u_{n-1} \\  u_n  \end{array}  $

( 5.9 E )

El algoritmo de Ishii-Otto consiste de las siguientes partes:

- 1).- Conceptualizar el tipo de problema a resolver, destilación, absorción con rehervidor o agotamiento.
- 2).- Las variables independientes son temperatura (T), flujo de Vapor (V), flujo de líquido (L) y composiciones en las dos fases (x,y). Para iniciar las iteraciones en la columna, es necesario suponer tres variables de corte: un perfil de temperaturas, un perfil de flujo de vapor y una estimación de las composiciones mol en la fase líquida (estimación que se puede realizar mediante polinomios para el cálculo de K's y la ecuación del Balance de Materia por componente sin linealizar y el Algoritmo de Thomas).

Con los valores para el vapor en cada etapa y con ayuda del Balance Global de Materia ec. (5.2), se obtiene el perfil inicial para el flujo de líquido.

Para obtener las composiciones en la fase vapor simplemente éstas se calculan por medio de la relación de equilibrio siguiente:

$$Y_{ij} = K_{ij} X_{ij} \quad (5.10)$$

- 3).- El paso siguiente es normalizar las composiciones en cada fase:

a). - Líquido:

$$(X_{ij}) \text{ normalizada} = \frac{X_{ij}}{c} \\ \sum_{i=1} X_{ij}$$

b). - Vapor:

$$(Y_{ij}) \text{ normalizada} = \frac{Y_{ij}}{c} \\ \sum_{i=1} Y_{ij}$$

4). - Evaluar las propiedades físicas y sus derivadas correspondientes, es decir, calcular:

$$K, H, k, \frac{\partial K}{\partial T}, \frac{\partial K}{\partial X}, \frac{\partial H}{\partial T}, \frac{\partial h}{\partial T}$$

ya sea por medio de la correlación de Chao-Seader (2), propuesta por los autores, o por medio de una ecuación de estado (Feng-Robinson, Soave-Reidlich-Kwong), que se proponen en el artículo de Bishnoi-Shah (3).

5). - Habiendo calculado los perfiles de temperatura, líquido, vapor y las composiciones en ambas fases, además de las propiedades físicas y sus respectivas derivadas; se calcular todos y cada uno de los elementos que constituyen a las matrices previamente descritas.

Estas ecuaciones matriciales se aplican estrictamente para el caso de absorción, pero deben sufrir ligeras modificaciones si se trata de otra técnica de separación.

Para el caso de destilación se deben especificar los valores para  $V_j$

y para  $V_2$ , lo que implica que  $\Delta V_1 = \Delta V_2 = \Delta L_1 = 0$ , quedando la ecuación 5.7 b de la siguiente forma:

$$\begin{array}{cccc|ccc}
 0 & g_1 & & & 0 & & \\
 0 & f_2 & g_2 & & 0 & & \\
 0 & 0 & f_3 & g_3 & \Delta V_3 & & \\
 \cdot & & & \cdot & \cdot & & \\
 \cdot & & & \cdot & \cdot & & \\
 \cdot & & & \cdot & \cdot & & \\
 0 & & & f_j & g_j & \Delta V_j & \\
 \cdot & & & & \cdot & & \\
 \cdot & & & & \cdot & & \\
 \cdot & & & & \cdot & & \\
 0 & & & & f_{N-1} & g_{N-1} & \Delta V_{N-1} \\
 0 & & & & & f_N & \Delta V_N
 \end{array}$$

y la ecuación (6.9 b), de esta otra forma:

$$\begin{array}{cccc|ccc}
 1 & 0 & & & \Delta Q_j & & \\
 & 0 & t_2 & & \Delta Q_n & & \\
 & & s_3 & t_3 & \Delta V_3 & & \\
 & & & \cdot & \cdot & & \\
 & & & \cdot & \cdot & & \\
 & & & \cdot & \cdot & & \\
 & & & s_j & t_j & \Delta V_j & \\
 & & & & \cdot & & \\
 & & & & \cdot & & \\
 & & & & \cdot & & \\
 & & & & t_{n-1} & & \Delta V_{n-1} \\
 & & & & s_n & & \Delta V_n
 \end{array}$$

En el caso de absorción con rehedidor las modificaciones son las siguientes:

0	$g_1$					0
	$f_2$	$g_2$				$\Delta V_2$
		$f_3$	$g_3$			$\Delta V_3$
			$\vdots$			$\vdots$
			$\vdots$			$\vdots$
			$f_j$	$g_j$		$\Delta V_j$
			$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$
				$f_{n-1}$	$g_{n-1}$	$\Delta V_{n-1}$
					$f_n$	$\Delta V_n$

para el Balance de Energía:

0	$t_1$					$\Delta Q_1$
	$s_2$	$t_2$				$\Delta Q_n$
		$s_3$	$t_3$			$\Delta V_3$
			$\vdots$			$\vdots$
			$\vdots$			$\vdots$
			$s_j$	$t_j$		$\Delta V_j$
			$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$
				$s_{n-1}$	$t_{n-1}$	$\Delta V_{n-1}$
1					$s_n$	$\Delta V_n$

8).- En este momento se han construido matrices de este tipo:

Para los balances de masa por componente:

$$\bar{A}_i \Delta \bar{X}_{ij} + \bar{B}_i \Delta \bar{T} + \bar{C}_i \Delta \bar{V} = \bar{D}_i \quad (5.11)$$

Para el Balance de energía:

$$\bar{O} \Delta \bar{T} + \bar{P} \Delta \bar{V} = Q \quad (5.12)$$

Conviértase las primeras matrices de las ecuaciones (5.11) y (5.12), en matrices unitarias y obtener las siguientes ecuaciones matriciales: (utilizando las matrices inversas de  $A_i$  y de  $C$ ).

$$I \Delta X_{ij} + [A_i]^{-1} (B_i) \Delta T + [A_i]^{-1} (C_i) \Delta V = [A_i]^{-1} (D_i)$$

quedando:

$$I \Delta X_{ij} + E_i \Delta T + F_i \Delta V = G_i \quad (5.13)$$

en forma similar para la ecuación (5.12)

$$I \Delta T + [O]^{-1} (P) \Delta V = [O]^{-1} (Q)$$

o bien:

$$I \Delta T + R \Delta V = S \quad (5.14)$$

9).- Sumar desde el componente uno hasta el componente  $c$  en la ecuación (5.13):

$$I \sum_{i=1}^c \Delta X_{ij} + \sum_{i=1}^c E_i \Delta T + \sum_{i=1}^c F_i \Delta V = \sum_{i=1}^c G_i$$

o bien

$$\sum_{i=1}^c \Delta X_{ij} + E_T \Delta T + F_T \Delta V = G_T \quad (5.15)$$

8).- Eliminar el término de  $\Delta X_{ij}$ , sustituyendo la condición establecida en la ecuación linealizada:

$$\sum_{i=1}^c \Delta X_{ij} = -S_j \quad (5.16)$$

con  $S_j = 0$

obteniendo:

$$E_T \Delta T + F_T \Delta V = G_T \quad (5.17)$$

9).- Se tienen ahora un sistema de dos ecuaciones (5.17) y (5.14) y dos incógnitas; resolviendo por el Método de Sustitución:

Despejar  $\Delta T$  de la ecuación (5.14):

$$\Delta T = Q - P \Delta V \quad (5.18)$$

sustituyendo el valor de  $\Delta T$  en la ecuación (5.17), se tiene:

$$(E_T) (Q) - (E_T) (P) \Delta V + F_T \Delta V = G_T$$

$$(E_T) (Q) + (F_T - E_T P) \Delta V = G_T$$

despejando a  $\Delta V$ :



$$(F_T - E_T \cdot P) \Delta V = G_T - (E_T) \cdot (Q)$$

$$\Delta V = (F_T - E_T \cdot P)^{-1} (G_T - E_T \cdot Q) \quad (5.19)$$

Primero se calcula  $\Delta V$  y posteriormente  $\Delta T$  con la ecuación (5.18).

10).-Habiendo calculado los valores tanto para  $\Delta V$  como para  $\Delta T$ , éstos se sustituyen; ya sea en la ecuación (5.11) o en la ecuación (5.13) y se obtienen los valores para las  $\Delta X_{ij}$ , utilizando el algoritmo de Thomas.

11).-A continuación se calculan los nuevos valores para las variables de iteración,  $T_j$ ,  $V_j$  y  $X_{ij}$  como:

$$V_j^{k+1} = V_j^k + t \Delta V_j$$

$$T_j^{k+1} = T_j^k + t \Delta T_j$$

$$x_{ij}^{k+1} = x_{ij}^k + t \Delta x_{ij} \quad k = \text{No. iteración}$$

(5.20)

donde  $t$ , es un factor de amortiguamiento que se encuentra en el intervalo de  $-1$  a  $1$  y se escoge para satisfacer el siguiente criterio:

$$(\text{CRIT})^{k+1} < (\text{CRIT})^k$$

donde CRIT se define como:

$$\begin{aligned}
 (\text{CRIT}) = & \sum_{i=1}^n \left( \left( \sum_{i=1}^L y_{ij} - 1 \right)^2 + \left( \frac{E_j}{F_j H_{F_j} + Q_j + L_{j-1}^k h_{j-1}} \right)^2 \right. \\
 & \left. \dots \right) \quad (5.21) \\
 & + V_{j+1} H_{j+1}
 \end{aligned}$$

siendo CRIT el criterio de convergencia utilizado por los autores, Cri terio propuesto por Tomich (10).

El parámetro  $t$  se puede calcular utilizando el algoritmo propuesto por Montalvo y Kaufmann (4), que se explica más adelante o bien el de Broymán (5), especificado por los autores.

- 12).- Los cálculos continúan hasta que el criterio de convergencia visto con anterioridad satisfaga la siguiente relación:

$$\frac{(\text{CRIT})}{n} < 10^{-6} \quad (5.22)$$

donde  $n$  = Número total de etapas.

Si la relación anterior no se cumple se debe realizar una nueva iteración, calculando primero las fracciones mol de la fase vapor; utilizar la ecuación (5.1) y después regresar al punto 3.

### 5.2).- ALGORITMO DE MONTALVO-KAUFMANN

Los modelos descritos se pueden representar por medio de la ecuación siguiente:

$$E(x) = \epsilon \quad (\text{función error})$$

Para resolver esta ecuación se presenta el algoritmo de Montalvo-Kaufmann.

sea:

$$P(x) = E^T(x) E(x)$$

Que es simplemente encontrar la norma de la matriz  $E(x)$ , es decir  $\|a\|^2 = P(x)$ , que da el valor absoluto de la magnitud del valor del vector  $E(x)$ .

Esto se utiliza como una medida de la exactitud de una aproximación para la solución de:

$$E(x) = 0$$

ahora si:

$$P(x) > 0 \quad x \text{ no es la solución.}$$

$$P(x) = 0 \quad x \text{ es la solución.}$$

Sea:

$x_k$  para  $k \geq 0$  es una aproximación a la solución de  $E(x)$ .

$P(x_k) > 0$  entonces, es la aproximación a la solución generada como:

$$x_{k+1} = x_k + \Delta x_k$$

donde:

$$\Delta x_k = t_k J^{-1}(x_k) E(x_k)$$

$t_k$  = tamaño de paso o factor de amortiguamiento.

$J(x_k)$  = Jacobiano en la iteración  $k$ .

$E(x_k)$  = vector error.

Considérese la ecuación de un parámetro:

$$G(t_k) = P(x_{k+1}) = E^T(x_k + \Delta x_k) - E(x_k + \Delta x_k)$$

En el Método de Ishii y Otto, ya se ha calculado el inverso del Jacobiano y el vector error (cálculo de los incrementos  $\Delta T$ ,  $\Delta V$  y  $\Delta X_{i,j}$ ); faltando el valor del factor de desplazamiento ( $t$ ).

El algoritmo consiste:

PASO 0: Seleccione una  $\bar{t}$  y un  $t_{ref}$  como un tamaño de paso máximo y otro de paso mínimo respectivamente.

Donde  $\bar{t}$  es el paso máximo para el cálculo de  $P(x)$ , de la iteración  $k$  a la  $k+1$  y se recomienda que sea 0.25, 0.5 ó 1.0.

$t_{ref}$  es el paso mínimo para decidir si se detiene la búsqueda y el autor recomienda que sea:

$$t_{ref} = \bar{t} / 2^{10}$$

PASO 1: Sea  $t^+ = \bar{t}$  y calcule  $G(t^+)$ .

PASO 2: Si  $G(t^+) < P(x_k) = G(0)$ ,

Sea  $t^+ = t^+$  y continúe con el paso once si no es así continúe con el paso tres.

PASO 3: Sea  $t^- = -\bar{t}$  y calcule  $G(t^-)$

PASO 4: Si  $G(t^-) < P(x_k) = G(0)$

sea  $t^- = t^-$  y continúe con el paso once, si no se verifica la

condición anterior continúe en cinco.

PASO 5: Se tiene la siguiente información:

$$\text{en } t^0 = 0 ; G(0) = P(x_k)$$

$$t^+ = \bar{t} ; G(t^+)$$

$$t^- = -\bar{t} ; G(t^-)$$

Hacer una interpolación cuadrática, calculándose un valor de  $t^*$  que minimice  $G(t_k)$ , (ver figuras 5.1 y 5.2).

Pero puede ocurrir que  $G(t^+) = G(t^-)$  y por tanto  $t_k = 0$  que es el punto inicial de las iteraciones, es decir no existe desplazamiento y deben iniciarse las iteraciones con un nuevo estimado  $x_0$  (figura 5.3).

PASO 6: Calcule  $G(t^*)$ .

PASO 7: Si  $G(t^*) < G(0) = P(x_k)$ ,

continúe con el paso once de otra manera siga con el ocho.

PASO 8: Si  $t^* < t_{ref}$  no se ha generado un desplazamiento adecuado. Se usará un criterio especial en estos momentos para detener la búsqueda o proponer un desplazamiento que minimice la función.

PASO 9: Si  $t^* > 0$

realice las siguientes sustituciones:

$$t^+ = t^* \quad \text{y} \quad t^* = t^+$$

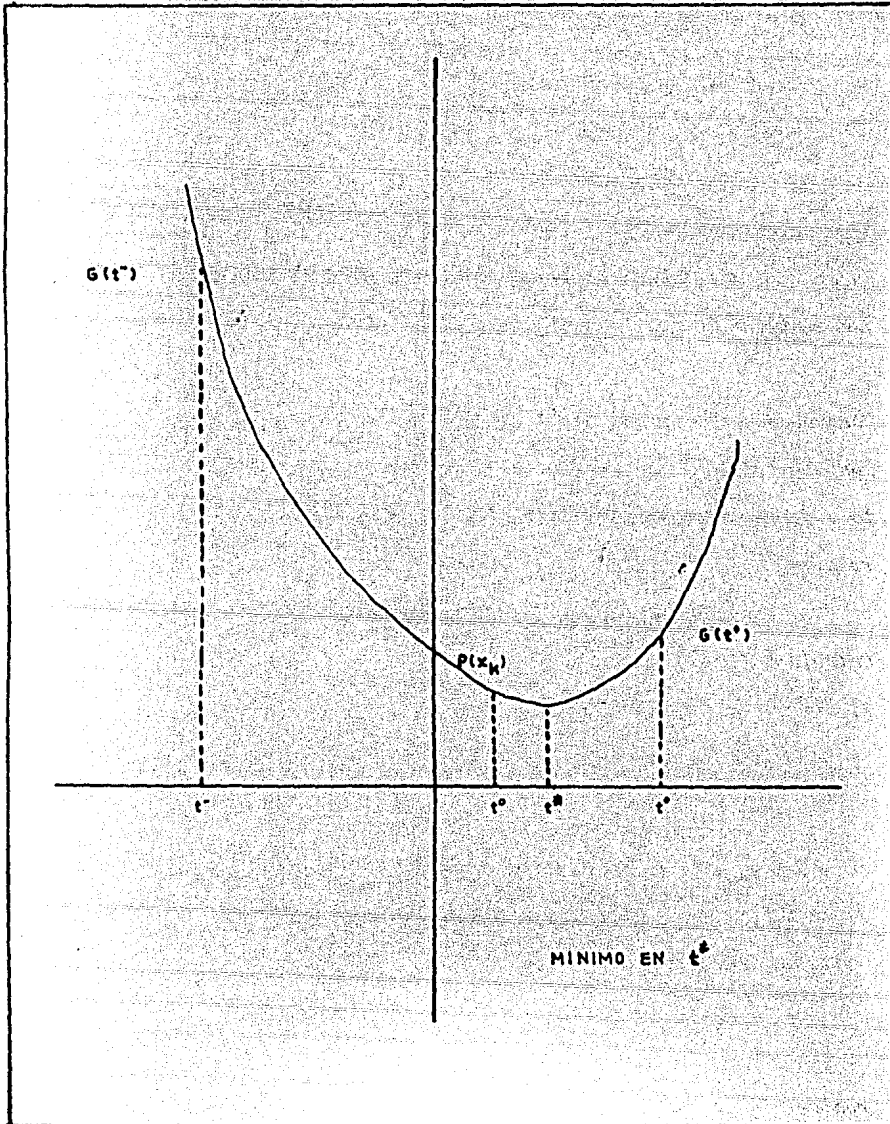


FIG. 5.1 INTERPOLACION CUADRATICA PARA OBTENER EL FACTOR  $t^*$  CUANDO  $G(t^-) > G(t^+)$

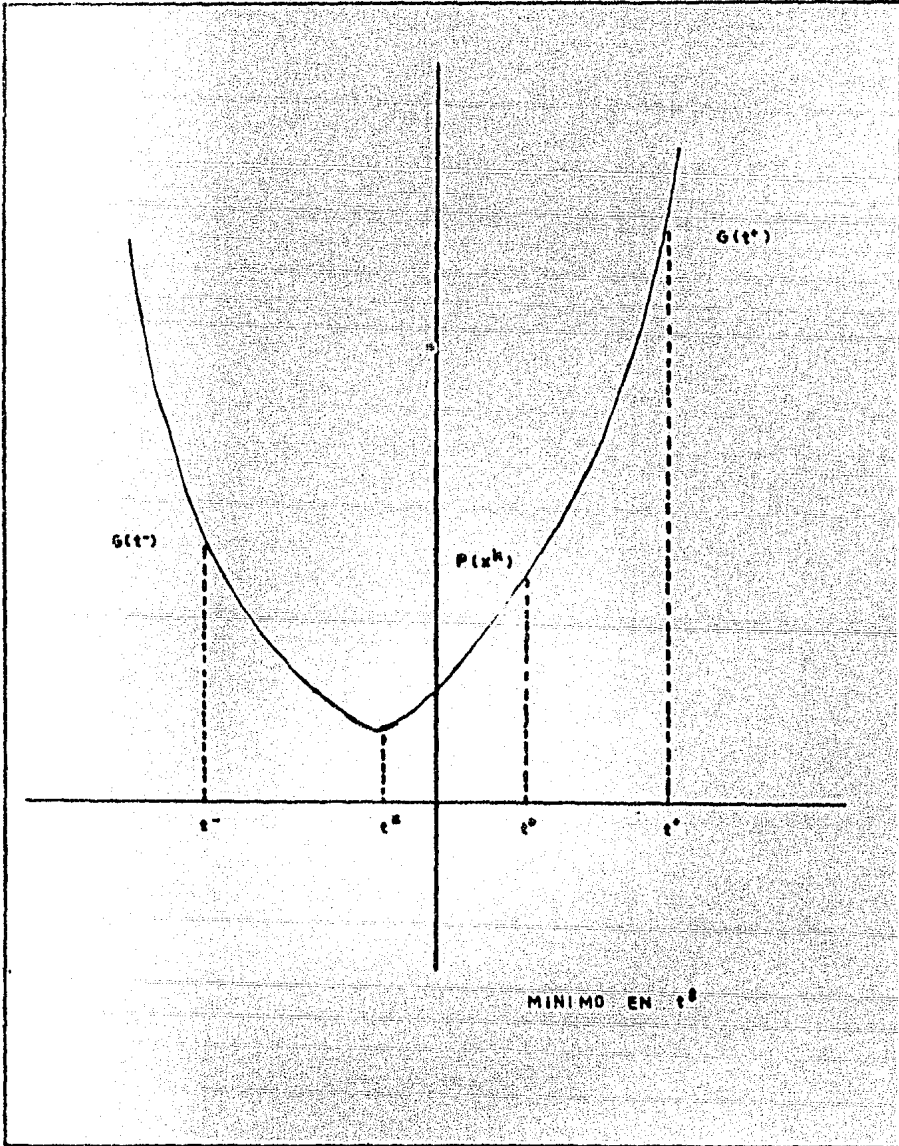


FIG. 5.2 INTERPOLACION CUADRATICA PARA OBTENER EL FACTOR  $t^b$  CUANDO  $G(t^0) > G(t^-)$

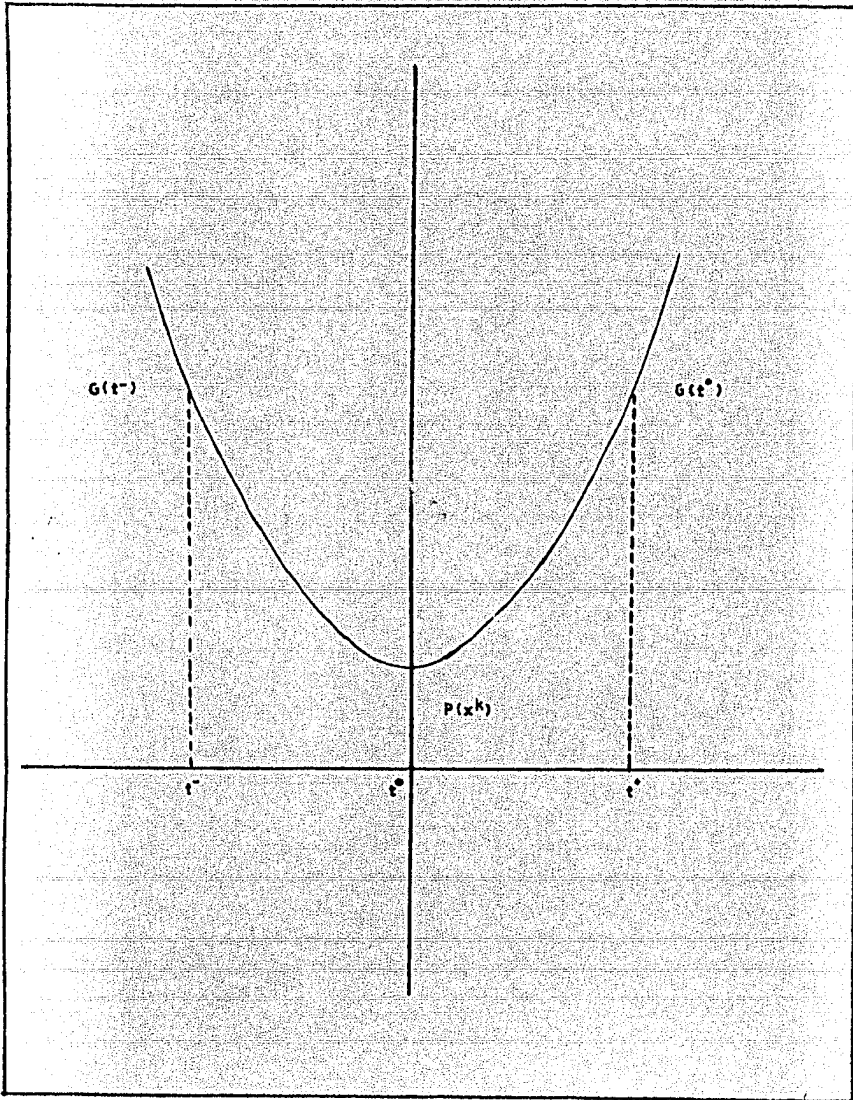


FIG. 5.3 CASO ESPECIAL CUANDO  $G(t^-) = G(t^+)$



$$G(t^+) = G(t^*) \quad \text{y} \quad G(t^*) = G(t^+)$$

si  $t^* < 0$  entonces:

$$t^- = t^* ; \quad t^* = t^-$$

$$G(t^-) = G(t^*) ; \quad G(t^*) = G(t^-)$$

Con lo anterior se garantiza que:

El mínimo de  $G(t)$ , está siempre delimitado entre  $t^-$  y  $t^+$  (figuras 5.4 y 5.5).

PASO 10: Repetir el procedimiento desde el paso número 5 hasta que las condiciones en siete u ocho se satisfagan.

PASO 11: Sea  $t_k = t^*$

posteriormente actualice la estimación hacia la solución  $x_{k+1}$ . Continuando con la aplicación de la fórmula recursiva (5.20), hasta que se cumpla posteriormente la ecuación (5.22).

### 5.3).- UN PROCEDIMIENTO ALTERNATIVO DE SOLUCION

A continuación se presenta una nueva forma de resolver el sistema de ecuaciones matriciales que plantean Ishii y Otto:

1).- Realizar de la misma forma los pasos uno, dos, tres y cuatro del algoritmo previamente descrito.

2).- A continuación formar las matrices que representen a los Balances de Mate-

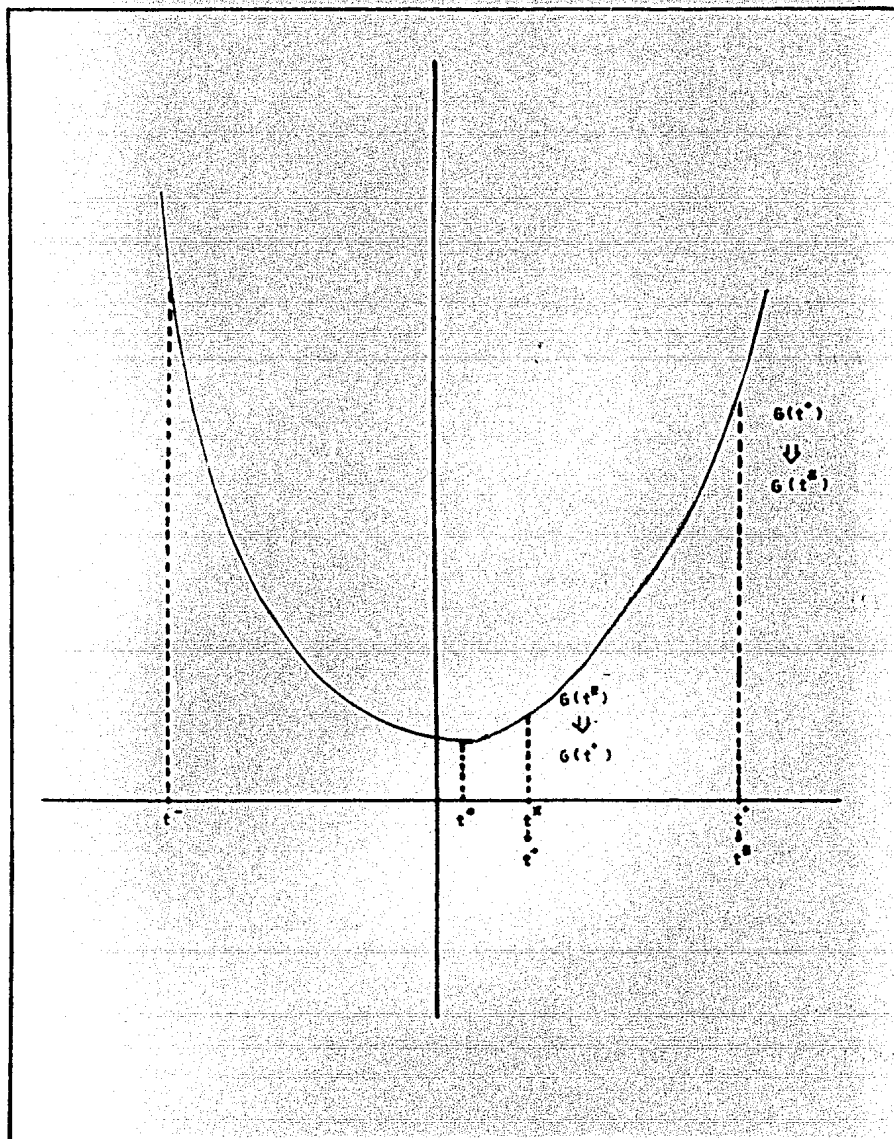


FIG. 5.4 ACOTACION DEL MINIMO DE  $G(t)$  CUANDO  $t^N > 0$

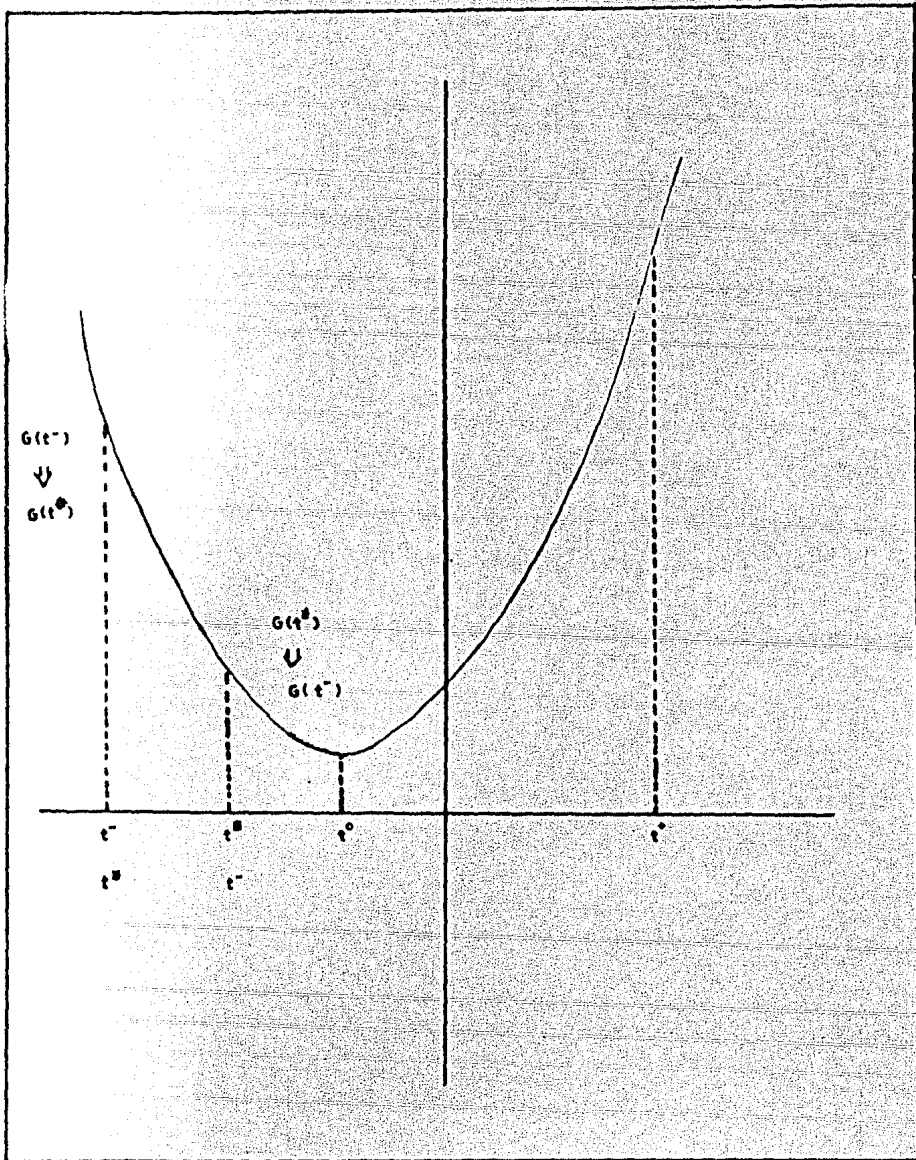


FIG. 5.5 ACOTACION DEL MINIMO DE  $G(t)$  CUANDO  $t^0 < 0$

ria por componente y al Balance de Energía de la forma siguiente:

Balances de masa por componente:

$$a_j \Delta X_{ij-1} + b_j \Delta X_{ij} + c_j \Delta X_{ij+1} + d_j \Delta T_j + e_j \Delta T_{j+1} \\ + f_j \Delta V_j + g_j \Delta V_{j+1} + \alpha_j \Delta L_{j-1} + \beta_j \Delta L_j = m_{ij}$$

En esta etapa no se sustituyen los valores de  $\Delta L_j$  en la ecuación linealizada del Balance de Masa por Componente, quedando las matrices de la siguiente forma:

$$\begin{array}{cccc|c} b_1 & c_1 & & & \Delta X_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \Delta X_2 \\ & a_3 & b_3 & c_3 & \Delta X_3 \\ & & \cdot & & \cdot \\ & & \cdot & & \cdot \\ & & \cdot & & \cdot \\ & & & a_j & b_j & c_j & \Delta X_j \\ & & & & \cdot & & \cdot \\ & & & & \cdot & & \cdot \\ & & & & \cdot & & \cdot \\ & & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} & \Delta X_{n-1} \\ & & & & & & a_n & b_n & \Delta X_n \end{array} +$$

$d_1$	$e_1$			$\Delta T_1$			
	$d_2$	$e_2$		$\Delta T_2$			
		$d_3$	$e_3$	$\Delta T_3$			
		$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$			
			$d_j$	$e_j$	$\Delta T_j$	+	
			$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		
				$d_{n-1}$	$e_{n-1}$	$\Delta T_{n-1}$	
					$d_n$	$\Delta T_n$	

$f_1$	$g_1$			$\Delta V_1$			
	$f_2$	$g_2$		$\Delta V_2$			
		$f_3$	$g_3$	$\Delta V_3$			
		$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$			
			$f_j$	$g_j$	$\Delta V_j$	+	
			$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		
				$f_{n-1}$	$g_{n-1}$	$\Delta V_{n-1}$	
					$f_n$	$\Delta V_n$	

$\beta_1$		$\Delta L_1$	=	$m_1$
$\alpha_1$	$\beta_2$	$\Delta L_2$		$m_2$
	$\alpha_3$	$\beta_3$		$m_3$
	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$
	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$
	$\alpha_j$	$\beta_j$	$\Delta L_j$	$m_j$
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
	$\alpha_{n-1}$	$\beta_{n-1}$	$\Delta L_{n-1}$	$m_{n-1}$
		$\alpha_n$	$\Delta L_n$	$m_n$

donde:  $a_j$ ,  $b_j$ ,  $c_j$ ,  $d_j$  y  $e_j$  son las mismas utilizadas en el método anterior.

$$f_j = -k_{ij} x_{ij}$$

$$g_j = k_{ij+1} x_{ij+1}$$

$$a_j = x_{ij-1}$$

$$e_j = -x_{ij}$$

$$m_j = -c_{ij}$$

Para el Balance Global de materia se tiene:

$$k_j \Delta L_{j-1} + \gamma_j L_j + \delta_j \Delta V_j + w_j \Delta V_{j+1} = r_j$$

en forma matricial:

$$\begin{array}{cccccccc}
 \gamma_1 & & & & & & & \\
 1 & & & & & & & \\
 k_2 & \gamma_2 & & & & & & \\
 & k_3 & \gamma_3 & & & & & \\
 & & \vdots & & & & & \\
 & & \vdots & & & & & \\
 & & & k_j & \gamma_j & & & \\
 & & & \vdots & \vdots & & & \\
 & & & \vdots & \vdots & & & \\
 & & & & k_{n-1} & \gamma_{n-1} & & \\
 & & & & & k_n & & \\
 \hline
 \delta_1 & w_1 & & & & & & \\
 & \delta_2 & w_2 & & & & & \\
 & & \delta_3 & w_3 & & & & \\
 & & & \vdots & & & & \\
 & & & \vdots & & & & \\
 & & & & \delta_j & w_j & & \\
 & & & & \vdots & \vdots & & \\
 & & & & \vdots & \vdots & & \\
 & & & & & \delta_{n-1} & w_{n-1} & \\
 & & & & & & \delta_n & \\
 \hline
 & & & & & & & \Delta L_1 \\
 & & & & & & & \Delta L_2 \\
 & & & & & & & \Delta L_3 \\
 & & & & & & & \vdots \\
 & & & & & & & \vdots \\
 & & & & & & & \Delta L_j \\
 & & & & & & & \vdots \\
 & & & & & & & \vdots \\
 & & & & & & & \Delta L_{n-1} \\
 & & & & & & & \Delta L_n \\
 \hline
 & & & & & & & \Delta V_1 \\
 & & & & & & & \Delta V_2 \\
 & & & & & & & \Delta V_3 \\
 & & & & & & & \vdots \\
 & & & & & & & \vdots \\
 & & & & & & & \Delta V_j \\
 & & & & & & & \vdots \\
 & & & & & & & \vdots \\
 & & & & & & & \Delta V_{n-1} \\
 & & & & & & & \Delta V_n \\
 \hline
 & & & & & & & \varepsilon_1 \\
 & & & & & & & \varepsilon_2 \\
 & & & & & & & \varepsilon_3 \\
 & & & & & & & \vdots \\
 & & & & & & & \vdots \\
 & & & & & & & \varepsilon_j \\
 & & & & & & & \vdots \\
 & & & & & & & \vdots \\
 & & & & & & & \varepsilon_{n-1} \\
 & & & & & & & \varepsilon_n
 \end{array}$$



donde:

$$\gamma_j = -1$$

$$k_j = 1$$

$$\delta_j = -1$$

$$w_j = 1$$

$$z_j = -M_j$$

En forma similar para el Balance de Energia se obtiene:

$$p_j \Delta T_{j-1} + q_j \Delta T_j + r_j \Delta T_{j+1} + s_j \Delta V_j$$

$$t_j \Delta V_{j+1} + \phi_j \Delta L_{j-1} + \psi_j \Delta L_j = u_j$$

Matricialmente se tiene:

$q_1$	$r_1$		$\Delta T_1$	+	
$p_2$	$q_2$	$r_2$	$\Delta T_2$		
	$p_3$	$q_3$	$r_3$		$\Delta T_3$
	:		:		
	:		:		
	:		:		
	$p_j$	$q_j$	$r_j$		$\Delta T_j$
	:		:		
	:		:		
	$p_{n-1}$	$q_{n-1}$	$r_{n-1}$		$\Delta T_{n-1}$
	$p_n$	$q_n$	$\Delta T_n$		



$s_1$	$t_1$				$\Delta V_1$
	$s_2$	$t_2$			$\Delta V_2$
		$s_3$	$t_3$		$\Delta V_3$
			$\vdots$		$\vdots$
			$\vdots$		$\vdots$
			$s_j$	$t_j$	$\Delta V_j$
				$\vdots$	$\vdots$
				$\vdots$	$\vdots$
			$s_{n-1}$	$t_{n-1}$	$\Delta V_{n-1}$
				$s_n$	$\Delta V_n$

+

$\psi_1$					$\Delta L_1$	$u_1$
$\phi_2$	$\psi_2$				$\Delta L_2$	$u_2$
	$\phi_3$	$\psi_3$			$\Delta L_3$	$u_3$
		$\vdots$			$\vdots$	$\vdots$
		$\vdots$			$\vdots$	$\vdots$
		$\phi_j$	$\psi_j$		$\Delta L_j$	$u_j$
			$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$
			$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$
			$\phi_{n-1}$	$\psi_{n-1}$	$\Delta L_{n-1}$	$u_{n-1}$
				$\phi_n$	$\Delta L_n$	$u_n$

=

donde  $p_j$ ,  $q_j$  y  $r_j$  tienen el mismo significado que en el algoritmo anterior:

$$s_j = -H_j$$

$$t_j = H_{j+1}$$

$$\phi_j = h_{j-1}$$

$$\psi_j = -h_j$$

$$u_j = -E_j$$

Estas ecuaciones matriciales aplican nuevamente en forma estricta al caso de absorción y se pueden hacer modificaciones adecuadas para poder manejar casos de agotamiento, destilación (con condensador total y parcial); así como para el caso de absorción con rehervidor.

3).- Se han construido matrices de este tipo:

$$A_i \Delta X_{ij} + B_i \Delta T + C_i \Delta V + D_i \Delta L = E_i \quad (5.23)$$

para el Balance de Masa por Componente,

$$Z \Delta T + P \Delta V + R \Delta L = Q \quad (5.24)$$

para el Balance de Energía y finalmente:

$$F \Delta L + G \Delta V = H \quad (5.25)$$

que se refiere al Balance de Materia Global.

4).- Despejese de la ecuación (5.25) a  $\Delta L$  quedando:

$$\Delta L = F^{-1} H - (F^{-1} G \Delta V) \quad (5.26)$$

5).- Sustituyase el valor de  $\Delta L$  de la ecuación (5.26), en la ecuación (5.23) para obtener:

$$E_i = A_i \Delta X_{ij} + B_i \Delta T + C_i \Delta V + D_i (F^{-1} H - F^{-1} G \Delta V)$$

$$A_i \Delta X_{ij} + B_i \Delta T + (C_i - D_i F^{-1} G) \Delta V = E_i - D_i F^{-1} H$$

o bien :

$$A_i \Delta X_{ij} + B_i \Delta T + K_i \Delta V = M_i \quad (5.27)$$

de forma similar para el Balance de Energía, ec. (5.24):

$$Z \Delta T + P \Delta V + R (F^{-1} H - F^{-1} G \Delta V) = Q$$

obteniéndose:

$$Z \Delta T + (P - R F^{-1} G) \Delta V = Q - R F^{-1} H$$

o bien:

$$Z \Delta T + U \Delta V = W \quad (5.28)$$

6).- Conviértanse las primeras matrices de las ecuaciones (5.27) y (5.28) en matrices unitarias; aplicando eliminación de Gauss, utilizando el algoritmo de Ishii-Otto para la inversión de matrices tridiagonales (ver sección 5.4 de este capítulo), o utilizar la técnica L U (6), - con la fórmula de Doolittle o bien la de Crout y obténganse sistemas similares a las ecuaciones (5.13) y (5.14).

7).- Hacer la sumatoria de la ecuación para los Balances de Materia por Componente, desde el componente uno hasta el componente c, obteniendo:

$$I \sum_{i=1}^c \Delta X_{ij} + J_T \Delta T + N_T \Delta V = \bar{N}_T \quad (5.29)$$

8).- Sustituyase la ecuación (5.16), en la ecuación (5.29) y obténgase:

$$-S_j + J_T \Delta T + N_T \Delta V = \bar{N}_T$$

$$J_T \Delta T + N_T \Delta V = \bar{N}_T + S_j \quad (5.30)$$

9).- Se tiene nuevamente un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas; encuéntrese los valores para  $\Delta T$  y para  $\Delta V$  de la misma manera que se realizó en el algoritmo de Ishii y Otto.

10).- Calcule los nuevos valores de  $T_j$  y  $V_j$  utilizando:

$$V_j^{k+1} = V_j^k + t \Delta V_j$$

$$T_j^{k+1} = T_j^k + t \Delta T_j$$

y de  $L_j$  como:

$$L_j^{k+1} = L_j^k + t \Delta L_j$$

11).- Para acelerar la convergencia en lugar de calcular las  $\Delta X_{ij}$ , resuélvase el Balance de Masa por Componente sin linealizar para las fracciones mol en la fase líquida directamente.

12).- Calcule la siguiente relación:

$$(CRIT)^{k+1} < (CRIT)^k \quad (5.31)$$

donde CRIT se da en la ecuación (5.21), si no se cumple con el primer factor de amortiguamiento seleccionado; utilice el algoritmo de Montalvo-Kauffman y regrese al paso 10, con un nuevo valor de "t".

13).- Una vez que se haya cumplido la desigualdad (5.31), verifique el criterio de convergencia; ecuación (5.22), para detener el proceso de cálculo o iniciar una nueva iteración.

Como se mencionó con anterioridad, este procedimiento es una forma alternativa para la resolución del sistema de ecuaciones matriciales presentado originalmente por Ishii y Otto. Con ello se utiliza una variable de corte más que es: el flujo de líquido ( $L_j$ ), sustituyendo además la ecuación (5.16), en forma completa:

$$\Sigma \Delta X_{ij} = -S_j$$

donde  $S_j$  es:

$$S_j = \sum_{i=1}^c X_{ij} - 1$$

Presentando esta forma de solución una mayor facilidad para crear un programa de cómputo.

5.4).- INVERSION DE UNA MATRIZ TRIDIAGONAL POR MEDIO DEL ALGORITMO DEISHII - OTTO

Denótese la inversa de la matriz tridiagonal de la manera siguiente:

$$\begin{array}{ccc|c|ccc}
 & & & -1 & & & \\
 \left( \begin{array}{ccc}
 B_1 & C_1 & \\
 A_2 & B_2 & C_2 \\
 \vdots & \vdots & \\
 A_j & B_j & C_j \\
 \vdots & \vdots & \\
 A_{N-1} & B_{N-1} & C_{N-1} \\
 & A_N & B_N
 \end{array} \right) & = & \left( \begin{array}{cccc}
 G_{11} & G_{12} & \dots & G_{1,N} \\
 G_{21} & G_{22} & \dots & G_{2,N} \\
 \vdots & \vdots & & \vdots \\
 G_{j1} & & \dots & \\
 \vdots & & & \vdots \\
 G_{N-1,1} & & \dots & \\
 G_{N,1} & & \dots & G_{N,N}
 \end{array} \right)
 \end{array}$$

donde:

$$\epsilon_1 = B_1$$

$$\epsilon_j = B_j - A_j C_{j-1} / \epsilon_{j-1} \quad j = 2, 3, \dots, N$$

$$G_{NN} = 1 / \epsilon_N$$

$$G_{N,j} = -G_{N,j+1} A_{j+1} / \epsilon_j \quad j = N-1, N-2, \dots, 1$$

$$G_{k,j} = -G_{k+1} C_k / \epsilon_k \quad k = N-1, N-2, \dots, 1$$

$$j = N, \dots, k+1$$

$$G_{kk} = (1 - G_{k,k+1} A_{k+1}) / \epsilon_k \quad k = N-1, N-2, \dots, 1$$

$$G_{k,j} = -G_{k,j+1} A_{j+1} / \epsilon_j \quad k = N-1, N-2, \dots, 1$$

$$j = 2, 3, \dots, N$$

De esta forma se puede obtener la inversa de una matriz tridiagonal de manera rápida y eficiente.

*No se muestra la grandeza por estar en un extremo , sino tocando los dos a la vez.*

*P A S C A L*

## C A P I T U L O 6

METODO DE NAPHTALI - SANDHOLM

Dentro de los métodos de solución simultánea, se puede clasificar al algoritmo desarrollado por Leonard D. Naphtali y Donald P. Sandholm (1), cuyas principales características son:

- 1).- Las ecuaciones para los balances de masa, de energía; así como las relaciones de equilibrio se agrupan por etapa y posteriormente se linealizan.
- 2).- El conjunto de ecuaciones resultantes forman un bloque tridimensional que permite una solución rápida a través de la técnica de Newton-Raphson.
- 3).- Se utiliza la eficiencia de Murphree por plato en forma rigurosa.
- 4).- El algoritmo es flexible, ya que se utiliza para diferentes tipos de destilación, absorción, agotamiento y rectificación con cualquier número de alimentaciones y salidas laterales.

Las ecuaciones que describen el proceso de separación, ya se especificaron en el capítulo 1 bajo el nombre de ecuaciones MESH; pero para poder aplicar el método de linealización utilizado por Naphtali y Sandholm, las ecuaciones se escriben como funciones de discrepancias; es decir, como una medida de la falla de las variables involucradas para satisfacer dichas ecuaciones.



El algoritmo consiste en combinar primeramente las dos ecuaciones de las sumatorias de las fracciones mol, ecuaciones (1.5), con las otras ecuaciones MESH; produciendo un sistema a resolver en forma simultánea de  $N(2C + 1)$ , ecuaciones no lineales:

Por tanto sea:

$$V_j = \sum_{i=1}^c v_{ij} \quad (6.1)$$

$$L_j = \sum_{i=1}^c l_{ij} \quad (6.2)$$

Sustituyendo las ecuaciones (6.1) y (6.2), en las ecuaciones (1.2), (1.4) y (1.6) se obtiene:

$$M_{ij} = l_{ij-1} + v_{ij+1} + f_{ij} - l_{ij} - SL_j x_{ij} - SV_j y_{ij}$$

multiplicando al término  $SL_j x_{ij}$  por uno en la forma  $L_j/L_j$  y a  $SV_j y_{ij}$  por  $V_j/V_j$  se tiene:

$$M_{ij} = l_{ij-1} + v_{ij+1} + f_{ij} - l_{ij} - \frac{SL_j}{L_j} l_{ij} - v_{ij} - \frac{SV_j}{V_j} v_{ij}$$

agrupando términos y definiendo:

$$a_j = SL_j / L_j$$

$$s_j = SV_j / V_j$$

Se establece la ecuación:

$$M_{ij} = L_{ij} (1 + s_j) + v_{ij} (1 + S_j) - L_{ij-1} - v_{ij+1} - f_{ij}$$

(6.3)

aplicando un procedimiento similar al Balance de Energía se tiene:

$$H_j = (1 + S_j) H_{v_j} + (1 + s_j) h_j - H_{v_{j+1}} - h_{j-1} - H_{F_j} + Q_j$$

(6.4)

Si la eficiencia de Murphree en la etapa "j" está definida por:

$$\eta_j = \frac{y_{ij} - y_{ij+1}}{K_{ij} x_{ij} - y_{ij+1}}$$

o bien como:

$$\eta_j K_{ij} x_{ij} - y_{ij} + (1 - \eta_j) y_{ij+1} = 0$$

(6.5)

En términos de los flujos por componente la ecuación (6.5), se transforma en:

$$E_{ij} \equiv \frac{\eta_j K_{ij} V_j L_{ij}}{L_j} - v_{ij} + \frac{(1 - \eta_j) v_{ij+1} V_j}{V_{j+1}}$$

(6.6)

Entonces las ecuaciones (6.3), (6.4) y (6.6), se resuelven en forma simultánea; usando la técnica de Newton-Raphson. Durante las iteraciones

se obtienen valores siempre diferentes a cero para estas ecuaciones y por tanto, se les asigna el nombre de "DISCREPANCIAS DEL ERROR", como se habia establecido con anterioridad.

Para la linealización y solución del sistema se definen los vectores:

$$\bar{X} = [X_1, X_2, \dots, X_j, \dots, X_N]^T$$

$$\bar{F} = [F_1, F_2, \dots, F_j, \dots, F_N]^T$$

donde:

$\bar{X}_j$  es el vector de variables de salida para la etapa "j", ordenado de la manera siguiente:

$$\begin{aligned} \bar{X} &= [v_{1j}, \bar{v}_{2j}, \dots, v_{ij}, \dots, v_{cj}, T_j, l_{1j}, \dots, l_{ij}, \dots, l_{cj}]^T \\ &= [X_{1j}, X_{2j}, \dots, X_{ij}, \dots, X_{cj}, X_{c+1j}, X_{c+2j}, \dots, X_{2c+1j}]^T \end{aligned}$$

además:

$\bar{F}$  es el vector de funciones por etapa ordenados como:

$$\bar{F} = [H_j, M_{1j}, M_{2j}, \dots, M_{cj}, E_{1j}, \dots, E_{cj}]^T$$

$$\bar{F}_j = [F_{1j}, F_{2j}, F_{3j}, \dots, F_{c+1j}, F_{c+2j}, \dots, F_{2c+1j}]^T$$

donde:

$j$  = número de la etapa.

$N$  = número total de etapas.

$c$  = número total de componentes

Puede observarse que  $\bar{X}_j$  contiene a las variables que intervienen en la columna, cada  $X_j$  agrupa a las variables de corte establecidas para cada etapa "j". Análogamente  $F$  contiene a las funciones que describen el comportamiento del equipo y cada  $F_j$  a las funciones del plato "j".

Las iteraciones se llevan a cabo resolviendo las correcciones  $\Delta X$  por medio de la ecuación (6.7):

$$\Delta X_k = - \left( \frac{\partial F}{\partial X} \right)_k^{-1} \bar{F}_k \quad (6.7)$$

y obteniendo los nuevos valores para dichas variables, haciendo uso de la siguiente ecuación:

$$\bar{X}_{k+1} = \bar{X}_k + t \Delta \bar{X}_k \quad (6.8)$$

donde:

$k$  = número de la iteración.

$t$  = factor de amortiguamiento.

$\Delta X$  = corrección calculada para modificar los valores de las variables en la iteración  $k$  y así obtener los nuevos en la iteración  $k+1$ .

$\partial F/\partial X =$  Jacobiano de F.

La linealización de las funciones de discrepancias propuestas requieren que los flujos por componente en ambas fases y las temperaturas se inicialicen.

Las ecuaciones linealizadas son:

a).- Balance de materia por componente:

$$-\Delta l_{i,n-1} + \left[ 1 + \frac{SL_j}{L_j} \right] \Delta l_{ij} - \frac{SL_j}{L_j^2} l_{ij} \sum_k \Delta l_{kj} +$$

$$\left[ 1 + \frac{SV_j}{V_j} \right] \Delta v_{ij} - \frac{SV_j}{V_j^2} v_{ij} \sum_k \Delta v_{kj} - \Delta v_{i,j+1} = -M(i,j)$$

b).- Relaciones de equilibrio, incluyendo la eficiencia de Murphree:

$$\eta_j \frac{v_j}{L_j} K_{ij} \Delta l_{ij} - \eta_j \frac{v_j}{L_j^2} K_{ij} l_{ij} \sum_k \Delta l_{kj} + \eta_j \frac{v_j}{L_j} l_{ij}$$

$$\sum_k \frac{\partial K_{ij}}{\partial l_{kj}} \Delta l_{kj} + \eta_j \frac{v_j}{L_j} l_{ij} \frac{\partial K_{ij}}{\partial T_j} \Delta T_j + \eta_j \frac{1}{L_j} K_{ij} l_{ij} \sum_k \Delta v_{kj}$$

$$+ \eta_j \frac{v_j}{L_j} L_{ij} \quad \Sigma_k \frac{\partial K_{ij}}{\partial v_{kj}} \Delta v_{kj} - \Delta v_{ij} + (1-\eta_j) \frac{1}{v_{j+1}} v_{ij+1}$$

$$\Sigma_k \Delta v_{kj} + (1-\eta_j) \frac{v_j}{v_{j+1}} \Delta v_{ij+1} - (1-\eta_j) \frac{v_j}{v_{j+1}^2} v_{ij+1} \quad \Sigma_k \Delta v_{k,j+1}$$

$$= - E(i,j)$$

donde:

$$\frac{\partial K_{ij}}{\partial L_{kj}} = \sum_{p=1}^c \left[ \frac{\partial K_{ij}}{\partial x_{pj}} \right] \left[ \frac{\partial x_{pj}}{\partial L_{kj}} \right]$$

y

$$\frac{\partial x_{pj}}{\partial L_{kj}} = \frac{1}{L_j} \left[ \delta_{kp} \frac{L_{pj}}{L_j} \right]$$

donde:

$$\delta_{kp} = \begin{cases} 0 & \text{si } k \neq p \\ 1 & \text{si } k = p \end{cases}$$

c).- Balance de Energía

$$\begin{aligned}
 & -h_{j-1} \sum_k \Delta L_{kj-1} - L_{j-1} \sum_k \frac{\partial h_{j-1}}{\partial L_{kj-1}} \Delta L_{kj-1} \\
 & - L_{j-1} \frac{\partial h_{j-1}}{\partial T_{j-1}} \Delta T_{j-1} + h_j \sum_k \Delta L_{kj} + (L_j + SL_j) \sum_k \frac{\partial h_j}{\partial L_{kj}} \Delta L_{kj} \\
 & + (L_j + SL_j) \frac{\partial h_j}{\partial T_j} \Delta T_j + (V_j + SV_j) \frac{\partial H_{vj}}{\partial T_j} \Delta T_j + H_{vj} \sum_k \Delta v_{kj} \\
 & + (V_j + SV_j) \sum_k \frac{\partial H_{vj}}{\partial v_{kj}} \Delta v_{kj} - V_{j+1} \frac{\partial H_{vj+1}}{\partial T_{j+1}} \Delta T_{j+1} \\
 & - V_{j+1} \frac{\partial H_{vj+1}}{\partial T_{j+1}} \Delta T_{j+1} - H_{vj+1} \sum_k \Delta v_{kj+1} - V_{j+1} \sum_k \frac{\partial H_{vj+1}}{\partial v_{kj+1}} \Delta v_{kj+1}
 \end{aligned}$$

$$\Delta v_{kj+1} = -H(h) + F_n h_{F_j} + Q_j$$

El Jacobiano  $\partial F / \partial X$  es la matriz de  $(N \times N)$ , de derivadas parciales de todas las funciones respecto a todas las variables, evaluadas en la iteración actual  $(k)$ , Expresándose como:

$$\left[ \frac{\partial F}{\partial X} \right] = \begin{pmatrix} \left[ \frac{\partial F_1}{\partial X_1} \right] & \left[ \frac{\partial F_1}{\partial X_2} \right] & \dots & \left[ \frac{\partial F_1}{\partial X_N} \right] \\ \left[ \frac{\partial F_2}{\partial X_1} \right] & \left[ \frac{\partial F_2}{\partial X_2} \right] & \dots & \left[ \frac{\partial F_2}{\partial X_N} \right] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \left[ \frac{\partial F_N}{\partial X_1} \right] & \left[ \frac{\partial F_N}{\partial X_2} \right] & \dots & \left[ \frac{\partial F_N}{\partial X_N} \right] \end{pmatrix}$$

Donde cada uno de los elementos indicados corresponde al grupo de derivadas parciales de las funciones de una etapa con respecto a las variables de cualquier etapa en el equipo.

Es decir:

$$\left( \frac{\partial F_i}{\partial X_j} \right) = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_{i1}}{\partial X_{j1}} & \frac{\partial F_{i1}}{\partial X_{j2}} & \dots & \frac{\partial F_{i1}}{\partial X_{j,2c+1}} \\ \frac{\partial F_{i2}}{\partial X_{j1}} & \frac{\partial F_{i2}}{\partial X_{j2}} & & \frac{\partial F_{i2}}{\partial X_{j,2c+1}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_{i,2c+1}}{\partial X_{j1}} & & & \frac{\partial F_{i,2c+1}}{\partial X_{j,2c+1}} \end{pmatrix}$$



Pero el Jacobiano debe tener una forma tridiagonal por bloques, debido a que las funciones para la etapa "j" ( $M_{ij}$ ,  $E_j$ ,  $H_j$ ), dependen solamente de las variables para la etapa  $j-1, j$  y  $j+1$ .

Así se obtiene:

$$\left(\frac{\partial F}{\partial X}\right) = \begin{pmatrix} B_1 & C_1 & 0 & 0 & \dots & & & & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & 0 & \dots & & & & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & \dots & & & & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & A_{N-2} & B_{N-2} & C_{N-2} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & A_{N-1} & B_{N-1} & C_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & A_N & B_N \end{pmatrix}$$

Cada  $A_j$ ,  $B_j$ ,  $C_j$  representa una submatriz de  $(2C+1)^2$  derivadas parciales y éstas se forman de la siguiente manera:

1).- MATRIZ  $A_j$

Esta es la matriz de derivadas parciales de las funciones del plato "j", con respecto a las variables del plato "j-1".

a).- Balance de Energía =  $F_{1j}$        $A_j = \left[ \frac{\partial F_j}{\partial X_{j-1}} \right]$

$\frac{\partial F_{ij}}{\partial v_{ij-1}} = \frac{\partial F_{1j}}{\partial X_{ij-1}} = 0$        $i = 1, 2, \dots, c$

$$\frac{\partial F_{1j}}{\partial T_{j-1}} = \frac{\partial F_{1j}}{\partial X_{c+1,j-1}} = \frac{\partial h_{j-1}}{\partial T_{j-1}}$$

$$\frac{\partial F_{1j}}{\partial L_{ij-1}} = \frac{\partial F_{1j}}{\partial X_{c+1+i,j-1}} = \frac{\partial h_{j-1}}{\partial L_{ij-1}} \quad i = 1, 2, \dots, c$$

b).- Balance de Materia =  $F_{i+1,j}$

$$\frac{\partial F_{i+1,j}}{\partial v_{k,j-1}} = 0 \quad k = 1, 2, \dots, c$$

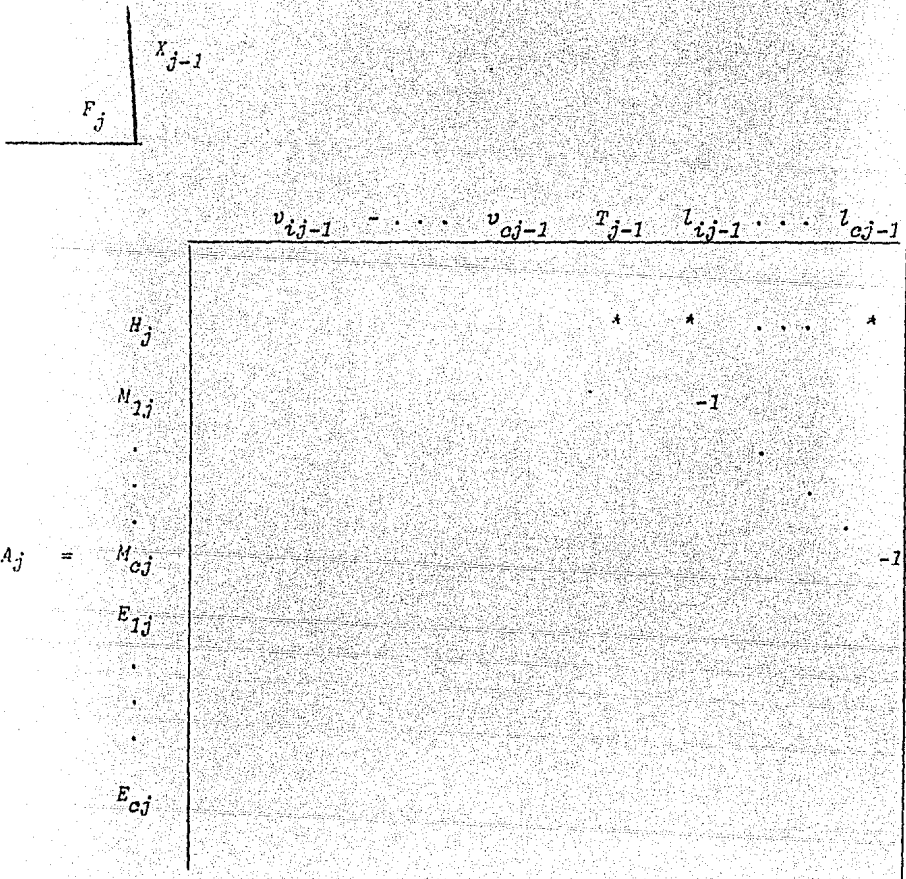
$$\frac{\partial F_{i+1,j}}{\partial T_{j-1}} = 0$$

$$\frac{\partial F_{i+1,j}}{\partial L_{k,j-1}} = -\delta_{ik} \quad ; \quad \delta_{ik} \begin{cases} 1 \text{ si } i = k \\ 0 \text{ si } i \neq k \end{cases}$$

c).- Relaciones de equilibrio =  $F_{c+1+i,j}$

$$\frac{\partial F_{c+1+i,j}}{\partial v_{k,j-1}} = \frac{\partial F_{c+1+i,j}}{\partial T_{j-1}} = \frac{\partial F_{c+1+i,j}}{\partial l_{k,j-1}} = 0$$

Por tanto, su estructura es:



II).- Matriz  $B_j$ 

Esta es la matriz de derivadas parciales de las funciones del plato "j", con respecto a las variables en este plato.

$$B_j = \left[ \frac{\partial F_j}{\partial X_j} \right]$$

a).- Balance de Energía =  $F_{1j}$

$$\frac{\partial F_{1j}}{\partial v_{ij}} = (1 + S_j) \frac{\partial H_{vj}}{\partial v_{ij}} \quad i = 1, 2, \dots, c$$

$$\frac{\partial F_{1j}}{\partial T_j} = (1 + S_j) \frac{\partial H_{vj}}{\partial T_j} + (1 + s_j) \frac{\partial h_j}{\partial T_j}$$

$$\frac{\partial F_{1j}}{\partial L_{ij}} = (1 + s_j) \frac{\partial h_j}{\partial L_{ij}} \quad i = 1, 2, \dots, c$$

b).- Balance de Materia =  $F_{i+1,j}$

$$\frac{\partial F_{i+1,j}}{\partial v_{kj}} = (1 + S_j) \delta_{ki} \quad k = 1, 2, \dots, c$$

$$\frac{\partial F_{i+1,j}}{\partial T_j} = 0$$

$$\frac{\partial F_{i+1,j}}{\partial l_{kj}} = (1 + s_j) \delta_{ki} \quad k = 1, 2, \dots, c$$

c). - Relaciones de equilibrio =  $F_{c+1+i,j}$

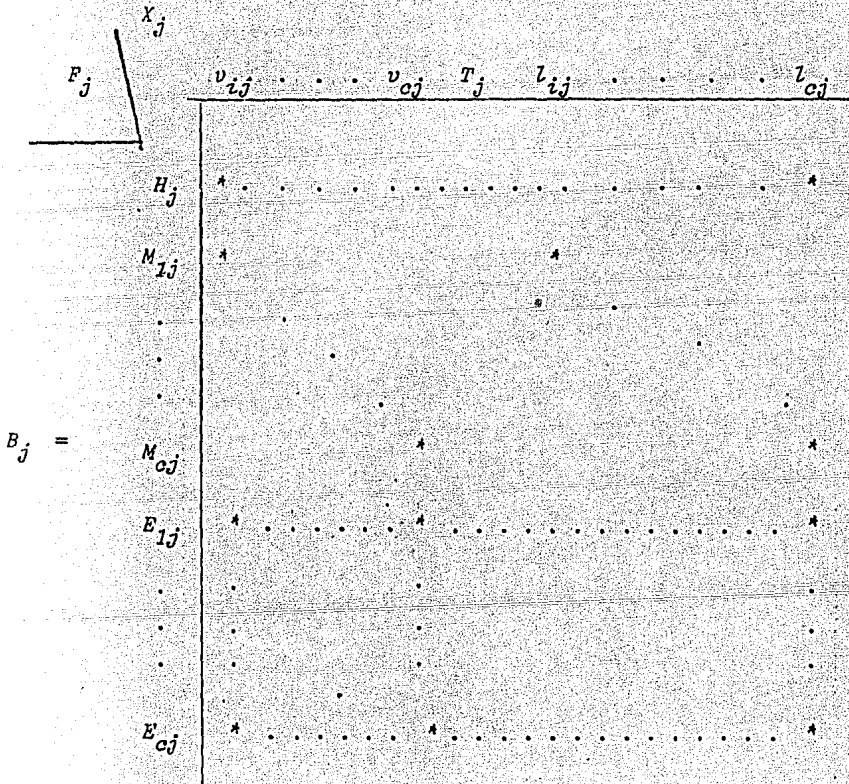
$$\frac{\partial F_{c+1+i,j}}{\partial v_{kj}} = \frac{\eta_j l_{ij}}{L_j} (K_{ij} + v_j \left( \frac{\partial K_{ij}}{\partial v_{kj}} \right)) - \delta_{ki}$$

$$+ (1 + \eta_j) \frac{v_{ij+1}}{v_{j+1}}$$

$$\frac{\partial F_{c+1+i,j}}{\partial T_j} = \frac{\eta_j l_{ij} v_j}{L_j} \left( \frac{\partial K_{ij}}{\partial T_j} \right)$$

$$\frac{\partial F_{c+1+i,j}}{\partial l_{kj}} = \frac{\eta_j v_j}{L_j} (K_{ij} \delta_{ki} + l_{ij} \left( \frac{\partial K_{ij}}{\partial l_{ij}} \right) - \frac{l_{ij}}{L_j} K_{ij})$$

Siendo su estructura:



III).- Matriz  $C_j$

Esta es la matriz de derivadas parciales de las funciones en el plato "j" con respecto a las variables en el siguiente plato:

$$C_j = \left[ \frac{\partial F_j}{\partial X_{j+1}} \right]$$

a).- Balance de energía:  $F_{1j}$

$$\frac{\partial F_{1j}}{\partial v_{ij+1}} = - \frac{\partial H_{v,j+1}}{\partial v_{ij+1}} \quad i = 1, 2, \dots, c$$

$$\frac{\partial F_{1j}}{\partial T_{j+1}} = - \frac{\partial H_{T,j+1}}{\partial T_{j+1}}$$

$$\frac{\partial F_{1j}}{\partial l_{ij+1}} = 0$$

b).- Balance de materia =  $F_{i+1,j}$

$$\frac{\partial F_{i+1,j}}{\partial v_{k,j+1}} = - \delta_{ki} \quad k = 1, 2, \dots, c$$

$$\frac{\partial F_{i+1,j}}{\partial T_{j+1}} = 0$$

$$\frac{\partial F_{i+1,j}}{\partial l_{k,j+1}} = 0 \quad k = 1, 2, \dots, c$$





El asterisco en las matrices representa valores existentes y diferentes de cero, para las derivadas correspondientes.

Dado que el Jacobiano tiene la forma de bloques tridiagonales se puede aplicar el Algoritmo de Thomas (para sistemas matriciales), que se describe en el apéndice "A". Y de esta forma obtener los incrementos correspondientes  $\Delta \bar{X}_j$ .

A continuación se presenta la metodología de solución de forma detallada:

A).- Especificar la clase de problema a resolver; así como las variables independientes y las variables de corte.

Para el caso de destilación es opcional fijar los valores, para el reflujo o la relación en el rehervidor, destilado o fondos, fracciones mol en los productos; flujo en los productos, número de etapas, etc.

B).- Como en los métodos de corte, es necesario fijar un perfil inicial para la temperatura, flujo de vapor y flujo de líquido.

C).- Se calculan las relaciones de equilibrio  $K_{ij}$  en forma independiente de las composiciones de tal manera de obtener un estimado inicial para las fracciones mol en ambas fases. Y de esta manera poder calcular los flujos por componente  $v_{ij}$  y además  $l_{ij}$ .

D).- Basándose en los nuevos valores para estas variables se debe calcular la suma de cuadrados de las discrepancias funcionales; es decir:

$$\epsilon_1 = \sum_{j=1}^N \left\{ (H_j)^2 + \sum_{i=1}^c [(M_{ij})^2 + (E_{ij})^2] \right\} \quad (6.9)$$

E).- Se compara el resultado obtenido en la ecuación (6.9), con un criterio de convergencia establecido, por ejemplo:

$$\frac{\epsilon_1}{2} = N (2C + 1) \left( \sum_{j=1}^N F_j^2 \right) 10^{-10} \quad (6.10)$$

donde  $N =$  No. total de etapas.

$C =$  No. total de componentes

Si el criterio de la ecuación (6.10), es menor que el de la ecuación (6.9), debe procederse con el paso (I), de lo contrario con (F).

F).- Calcular los flujos totales en ambas fases a partir de las ecuaciones (6.1) y (6.2):

$$V_j = \sum_{i=1}^c v_{ij} \quad (6.1)$$

$$L_j = \sum_{i=1}^c l_{ij} \quad (6.2)$$

G).- Calcular, si es necesario las cargas en el condensador y en el rehervidor; haciendo uso de un Balance de Energía alrededor de dichas etapas.

H).- Terminación del algoritmo.

I).- En este paso todavía no existe la convergencia y por tanto se inicia una nueva iteración de cálculo. Esto se lleva a cabo - aplicando primeramente la ecuación (6.7).

J).- Calcular el tamaño de paso o factor de amortiguamiento,  $t$ , para minimizar a  $\epsilon_1$ , de la ecuación (6.9) y de esa forma calcular los nuevos valores tanto para  $v_{ij}$ ,  $l_{ij}$  como para  $T_j$ .

Si en la aplicación de la ecuación (6.7), se obtuvieran cifras negativas para alguna variable, se recomienda usar la siguiente ecuación (2).

$$x^{k+1} = x^k \exp \left( \frac{t \Delta x^k}{x^k} \right) \quad (6.11)$$

K).- Para las siguientes iteraciones, calcular las entalpías en ambas fases y las relaciones de equilibrio con los nuevos estimados de  $v_{ij}$ ,  $l_{ij}$  y  $T_j$ ; utilizando para ello polinomios o ecuaciones de estado. Regresar posteriormente al paso (D).

METODO DE FREDENSLUND Y COAUTORES

Se presenta a continuación el procedimiento usado por Fredenslund et al (2,3), basado en el método descrito por Naphtali y Sandholm. La configuración de la columna se muestra en la figura 6.1.

El esquema de cálculo es el siguiente:

PASO 1).- Identificación de las especies químicas a separar y la obtención de las constantes de Antoine ( $A_i$ ,  $B_i$ ,  $C_i$ ), para cada componente; con objeto de calcular sus presiones de vapor como componentes puros.

PASO 2).- Cálculo de los coeficientes de actividad a solución infinita, a dos diferentes temperaturas; usando la Técnica de UNIFAC(5). Obtención también de los parámetros de interacción de grupo para cada componente ( $r_i$ ,  $q_i$ ,  $l_i$ ).

PASO 3).- Cálculo de los coeficientes de fugacidad para la fase vapor. Los autores proponen utilizar para ello los segundos coeficientes viriales para todas las posibles interacciones binarias a dos temperaturas diferentes (generalmente las temperaturas de saturación del componente más volátil y la del componente menos volátil). Para la obtención de estos coeficientes utilizan el Método de Hayden y O'Connell(6), calcular además las entalpías en ambas fases ya sea por polinomios o por algún otro método.

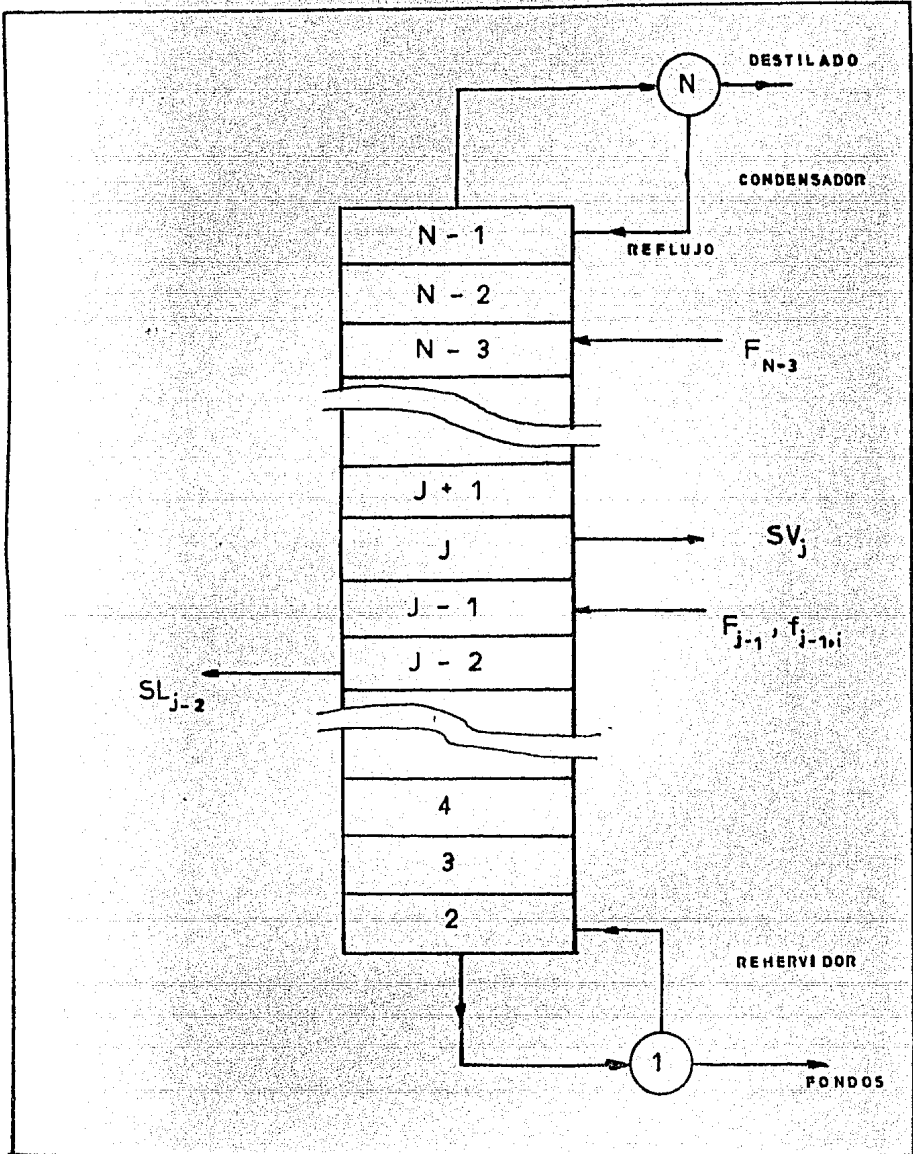


FIG. 6.1 CONFIGURACION DE UNA COLUMNA DE DESTILACION

PASO 4).- Especificación del problema de separación.

- Se deberá especificar el número de etapas de equilibrio.
- Eficiencias por etapa.
- Localización de alimentaciones (flujo).
- Localización de salidas laterales (fase y flujo).
- Presión de la columna.
- Relación de reflujo.
- Composiciones de alimentación.
- Condiciones térmicas.
- Destilado.

PASO 5).- Se realiza un estimado inicial del perfil de temperaturas (generalmente lineal) y perfiles para el flujo de líquido y para el flujo de vapor.

PASO 6).- Calcular para cada etapa y para cada componente su relación de equilibrio; basándose en el último estimado de temperaturas y concentraciones junto con los parámetros de UNIQUAC; así como las entalpías para cada fase.

PASO 7).- Determinar las derivadas de las relaciones de equilibrio, con respecto a las temperaturas; realizar las mismas determinaciones para las entalpías en la fase líquida y en la fase vapor.

PASO 8).- Formar las matrices como específica Naphtali; usar la técnica de Newton - Raphson y resolver los balances de materia por componente para cada etapa con los nuevos valores de los factores de separación:

$$S_{j,i} = V_j K_{j,i} / L_j$$

PASO 9).- Preguntar si los nuevos flujos están lo suficientemente cerca de los flujos previos, ayudándose de una tolerancia específica ; con objeto de determinar la solución del problema de separación que se está tratando. Si el criterio calculado es menor a la tolerancia especificada entonces el Método ha concluido de otra forma se procede a iniciar una nueva iteración regresando al paso número 6.

*In order to use a computer properly, it is important to acquire a good understanding of the structural relationship present within data, and of the techniques for representing and manipulating such structure within a computer.*

*DONALD E KNUTH*



## C A P I T U L O 7

RESULTADOS

Los métodos descritos con anterioridad se usaron para preparar y adaptar programas de cómputo capaces de resolver problemas en equipos de separación líquido-vapor con configuración compleja.

En este capítulo se incluyen diferentes problemas propuestos con el objetivo de probar los programas y por consecuencia los algoritmos analizados. Si se desea conocer el manejo de dichos sistemas; consultar el apéndice "B".

Todos los sistemas se adaptaron a una computadora Bourroughs Modelo B-7800 en lenguaje FORTRAN IV con versión 3.1, en el Programa Universitario de Cómputo; perteneciente a La Universidad Nacional Autónoma de México.

A continuación se muestra la descripción de los problemas utilizados en la evaluación de los diferentes métodos; así como los resultados finales obtenidos con ellos.

7.1 PROBLEMA: Destilación con condensador total.

METODO: Punto de burbuja.

CONVERGENCIA: Suma de cuadrados residuales en temperatura.

(valor de tolerancia: = 0.01 N).

Esta columna fue descrita por Johanson y Seader (1), así como también el programa de cómputo fue desarrollado por dichos autores.

## ESPECIFICACIONES:

<u>ESPECIE</u> <u>QUIMICA</u>	<u>ALIMENTACION 1</u> <u>(FRACCION MOL )</u>	<u>ALIMENTACION 2</u> <u>(FRACCION MOL)</u>
Etano	0.03	0.03
Propano	0.20	0.20
N-Butano	0.37	0.37
N-Pentano	0.35	0.35
N-Hexano	0.05	0.05

NUMERO DE ETAPAS: 16, incluyendo condensador y rehervidor.

## ALIMENTACIONES:

<u>Localización</u>	<u>Etapa 8</u>	<u>Etapa 9</u>
<u>Fase</u>	<u>Líquida</u>	<u>Líquida</u>
<u>Flujo (Lbmol/hr)</u>	50.0	50.0
<u>Temperatura (°F)</u>	213.93	213.93

PRESION DE LA COLUMNA: 250.00 Psia.

## TEMPERATURAS INICIALES:

<u>Etapa 1</u>	110.0 °F
<u>Etapa 16</u>	300.0 °F

DESTILADO VAPOR: 20.0 Lbmol/hr

REFLUJO EXTERNO 7.5

SALIDA LATERAL DEL LIQUIDO

EN EL PLATO 3

3 Lbmol/hr

SALIDA LATERAL DEL VAPOR

EN EL PLATO 13

37 Lbmol/hr

PROPIEDADES TERMODINAMICAS:

Polinomios en función de la temperatura.

Para obtener solución a este problema fueron necesarios diecinueve - iteraciones, con un valor de suma de cuadrados de  $1.40401E-01$ . Los resultados se muestran de la tabla 7.1.1 a la tabla 7.1.5.



RESULTADOS FINALES

SALIDAS DE PRODUCTOS Y CARGAS EN LOS INTERCAMBIADORES

CORRIENTE	ETAPA	FASE	TEMP (GRS. F)	FLUJO (LBMOL/HH)	FRACCIÓNES MOL PARA LOS COMPONENTES 1 A 5				
DESPLAZO	1	VAP	122.04	21.0000	0.14869	0.82518	0.02611	0.00001	0.00000
SALIDA	2	VAP	203.95	37.0000	0.00005	0.03411	0.71145	0.24127	0.01313
SALIDA	3	LIO	143.19	5.0000	0.07217	0.75515	0.22119	0.00126	0.00000
FOHOS	10	LIO	307.84	40.0000	0.00000	0.00083	0.23676	0.65151	0.11287

CARGA EN EL CONDENSADOR = 86482406 BTU/HR  
 CARGA DEL REHEVADOR = -161135437 BTU/HR

TABLA 7.1.1  
 RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.1

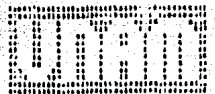


RESULTADOS FINALES

CONDICIONES INTERNAS

ETAPA	TEMP. (GDS. F)	FLUJOS POR VAPOR (LBOL/HR)	ETAFAS LIQUIDO (LBOL/HR)	FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO COMPONENTES 1 AL 5	FRACCIONES MOL DEL VAPOR COMPONENTE 1 AL 5
1	120.64		150.0000	0.05581 0.87461 0.06579 0.00006 0.00000	
2	134.28	170.0000			0.06692 0.87167 0.06136 0.00006 0.00000
2	134.28		151.26731	0.02312 0.84233 0.13122 0.00030 0.00000	
3	145.19	170.26721			0.03783 0.84262 0.11928 0.00027 0.00000
3	145.19		177.17639	0.01217 0.75635 0.22819 0.00126 0.00000	
4	157.34	207.17689			0.02581 0.76449 0.20357 0.00113 0.00000
4	157.34		170.25187	0.01771 0.63015 0.35619 0.00459 0.00002	
5	170.55	193.25107			0.02233 0.65296 0.32061 0.00408 0.00002
5	170.55		162.18095	0.01615 0.49116 0.48384 0.01431 0.00017	
6	184.37	186.13005			0.02151 0.53047 0.43530 0.01258 0.00015
6	184.37		156.48260	0.01154 0.36198 0.59459 0.03842 0.00103	
7	198.83	179.48260			0.02146 0.41901 0.52514 0.03353 0.00087
7	198.83		148.02896	0.01499 0.25756 0.64395 0.08947 0.01071	
8	215.31	171.96898			0.02175 0.33186 0.56477 0.07753 0.00408
8	215.31		199.46032	0.01459 0.18235 0.61695 0.17912 0.01504	
9	226.97	172.40652			0.01460 0.26101 0.51310 0.10553 0.00636
9	226.97		250.83307	0.01276 0.13241 0.61976 0.22118 0.02456	
10	236.25	173.93317			0.01394 0.18211 0.68613 0.12063 0.00716
10	236.25		259.87205	0.01174 0.08694 0.65343 0.23473 0.02496	
11	244.42	132.87315			0.01164 0.11639 0.73237 0.14207 0.00912

TABLA 7.1.2  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.1



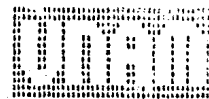
RESULTADOS FINALES

(CONTINUACION)

ETAPA	TEMP. (GRS. F)	FLUJO VAPOR (LB/HR)	FLUJO LIQUIDO (LB/HR)	FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO COMPONENTES 1 AL 5					FRACCIONES MOL DEL VAPOR COMPONENTE 1 AL 5								
11	244.43			261.71456	0.10019	0.25273	0.66264	0.25941	0.112596								
12	253.01	164.71476								0.10025	0.06764	0.74449	0.17792	0.00970			
12	253.11			260.80018	0.10004	0.22913	0.65912	0.30440	0.12342								
12	263.95	153.31319								0.00005	0.03431	0.71145	0.24127	0.01310			
12	263.95			257.110419	0.10001	0.21369	0.57210	0.38079	0.003452								
14	276.82	217.07409								0.03001	0.01605	0.63336	0.33053	0.02003			
14	276.82			257.29745	0.10000	0.20597	0.47253	0.47178	0.004591								
15	291.77	212.00745								0.00000	0.00093	0.59047	0.44215	0.01344			
15	291.77			248.00000	0.10000	0.20237	0.45410	0.57405	0.007177								
16	317.54	213.00000								0.00000	0.00260	0.37623	0.55848	0.00262			

TABLA 7.1.3  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.1

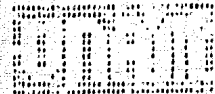
SE PRESENTA A CONTINUACION UNA GRAFICA DE TEMPERATURA  
(ASIGNADOLE EL #1), FLUJO DE VAPOR (#2) Y FLUJO DE  
LIQUIDO (#3) COMO ORDENADAS EN CONTRA DEL NUMERO DE  
ETAPAS COMO ABCISAS



NUMERO DE ETAPA	FLUJOS										
	$2.660E+01$	$4.278E+01$	$7.757E+01$	$1.1164E+02$	$1.351E+02$	$1.639E+02$	$1.927E+02$	$2.215E+02$	$2.503E+02$	$2.791E+02$	$3.078E+02$
1.01E+01	.	.	.	1	.	3	.	.	.	.	.
2.01E+01	.	.	.	.	1	3	.	2	.	.	.
3.01E+01	.	.	.	.	1	.	2	3	.	.	.
4.01E+01	.	.	.	.	.	1	3	.	2	.	.
5.01E+01	.	.	.	.	.	.	1	1	3	.	.
6.01E+01	.	.	.	.	.	3	.	.	12	.	.
7.01E+01	.	.	.	.	.	3	.	2	.	1	.
8.01E+01	.	.	.	.	.	.	2	.	3	.	1
9.01E+01	.	.	.	.	.	.	2	.	.	1	3
1.01E+02	.	.	.	.	.	.	2	.	.	1	3
1.11E+02	.	.	.	.	.	.	.	2	.	.	3
1.21E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	2	.	3
1.31E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	.	3	1
1.41E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	.	3	1
1.51E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	2	.	.
1.61E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	.	3	.
1.71E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	1
1.81E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
1.91E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
2.01E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
2.11E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
2.21E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
2.31E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
2.41E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
2.51E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
2.61E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
2.71E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
2.81E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
2.91E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.
3.01E+02	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.	.

NUMERO  
DE ETAPA

TABLA 7.1.4  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.1



SE PRESENTA A CONTINUACION UNA GRAFICA DE COMPOSICIONES  
 EN LA FASE LIQUIDA Y VAPOR PARA LOS SIGUIENTES COMPONENTES 2 (#1 Y 2),  
 3 (#3 Y 4) Y FINALMENTE LL 4 (#5 Y 6) COMO ORDENADAS EN  
 CONTRA DEL NUMERO DE ETAPAS COMO ABCISAS

		COMPOSICION													
		9.351E-01	6.8747E-02	1.749E-01	2.624E-01	3.498E-01	4.373E-01	5.248E-01	6.122E-01	6.997E-01	7.871E-01	8.746E-01			
1.10E+01	5	4	3										2	1	56-
2.10E+01	5	4	3										1	2	56-
3.10E+01	5		4		3						1		2		56-
4.10E+01	85				4		3			1		2			56-
5.10E+01	65					4		1			2				13-
6.10E+01	70	5					1		2		3				
7.10E+01	6	5			1			2			3				
8.10E+01		6		5			2			4	3				
9.10E+01			5	1		5	3				4	3			
1.10E+02			3	6		2	5						3	4	
1.20E+02		1	2		5			5					3		
1.30E+02		1	2						5					3	4
1.40E+02	12						6			5					35-
1.50E+02	12							5		6					
1.60E+02	1				3			4			6		5		12-

NUMERO  
 DE ETAPA

TABLA 7.1.5  
 RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.1



7.2	PROBLEMA:	Resolución del problema 7.1
	CONVERGENCIA:	Criterio de Tomich (2)
	PROPIEDADES:	Polinomios en función de la temperatura.
	METODO:	Punto de burbuja.

En este caso después de treinta iteraciones el método no converge teniendo una tolerancia de  $1.6E-05$  y un criterio de  $2.5E-01$ . Los resultados obtenidos en esta última iteración se muestran en las tablas 7.2.1, - 7.2.2. y 7.2.3.

7.3	PROBLEMA:	Absorbedor
	METODO:	Suma de flujos
	CONVERGENCIA:	a).- Suma de cuadrados residuales en temperatura. b).- Criterio de Tomich.

Esta columna fue descrita también por Seader (idem), al igual que el programa de cómputo fue desarrollado por el autor.

<u>ESPECIE QUIMICA</u>	<u>ALIMENTACION 1 (FRACCION MOL)</u>	<u>ALIMENTACION 2 (FRACCION MOL)</u>
Metano	0.00	0.830
Etano	0.00	0.084
Propano	0.00	0.048
N-Butano	0.00	0.026
N-Pentano	0.00	0.012
Acetate-Absor.	1.00	0.000

NUMERO DE ETAPAS: seis

ALIMENTACIONES:

<u>Localización</u>	<u>Etapa 1</u>	<u>Etapa 6</u>
Fase	Líquida	Vapor
Flujo (Lbmol/hr)	533	1978.45
Temperatura (°F)	90	60

PRESION DE LA COLUMNA: 75 Psia.

TEMPERATURAS INICIALES:

Etapa 1	80 °F
Etapa 6	150 °F

PROPIEDADES TERMODINAMICAS Polinomios en función de temperaturas.

La solución se consiguió en cuatro iteraciones para cada criterio de convergencia utilizado; siendo éstos:

SUMA DE CUADRADOS:	0.02330	TOLERANCIA:0.060
CRIT.DE TOMICH:	1.3223E-02	TOLERANCIA:0.6. E-06

Los resultados finales se muestran en las tablas 7.3.1 a 7.3.4.





RESULTADOS FINALES

CONDICIONES INTERNAS

ETAPA	TEMP. (GDS. F)	FLUJO POR ETAPAS VAPOR (LBHOL/HR)	FLUJO POR ETAPAS LIQUIDO (LBHOL/HR)	FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO COMPONENTES 1 AL 5					FRACCIONES MOL DEL VAPOR COMPONENTE 1 AL 5								
				1	2	3	4	5	1	2	3	4	5				
1	120.33		150.16110	0.05569	0.07485	0.116878	0.110007	0.000000									
2	124.70	170.0704							0.06657	0.06895	0.06391	0.00106	0.00000				
3	124.77		150.15266														
4	145.79	170.15366							0.03763	0.03807	0.02364	0.00029	0.00000				
5	145.79		170.15366														
6	158.11	190.7181							0.02570	0.02580	0.02188	0.00119	0.00000				
7	158.11		170.15366														
8	171.32	190.1609							0.02228	0.04536	0.02999	0.00419	0.00000				
9	171.32		170.15366														
10	195.11	170.15366							0.02147	0.02310	0.04253	0.01281	0.00000				
11	195.11		170.15366														
12	190.46	170.15366							0.02143	0.04303	0.03386	0.03389	0.00000				
13	190.46		170.15366														
14	215.71	170.15366							0.02172	0.02778	0.05659	0.07791	0.00000				
15	215.71		170.15366														
16	236.01	170.1609							0.01396	0.02583	0.06104	0.01050	0.00000				
17	236.01		170.1609														
18	244.60	170.1609							0.00392	0.01794	0.06887	0.02100	0.00000				
19	244.60		170.1609														

TABLA 7.2.2  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.2



RESULTADOS FINALES

(CONTINUACION)

ETAPA	TEMP. (GDS. ° F)	FLUJOS POR VAPOR (LBMOL/HR)	FLUJOS POR LIQUIDO (LBMOL/HR)	FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO COMPONENTES 1 AL 5	FRACCIONES MOL DEL VAPOR COMPONENTE 1 AL 5
11	244.62		262.04116	0.00018 0.05174 0.66276 0.25953 0.02595	
12	253.15	105.14116			0.00125 0.06649 0.74539 0.17840 0.00972
13	264.06	184.08829		769.00829 0.00004 0.02845 0.63969 0.31145 0.02849	
13	264.06		257.75075	0.00001 0.01340 0.57126 0.38199 0.03452	0.00005 0.03345 0.71167 0.24187 0.01313
14	276.92	217.25075			0.00001 0.04572 0.63311 0.33125 0.02010
14	276.92		252.52801	0.00000 0.00584 0.47151 0.47592 0.04693	
15	291.86	212.52801			0.00000 0.00678 0.51596 0.44294 0.03452
15	291.86		248.03265	0.00000 0.00231 0.35312 0.57399 0.07079	
16	317.91	217.03265			0.00000 0.00260 0.37567 0.55922 0.06273

TABLA 7.2.3  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.2



RESULTADOS FINALES

SALIDAS DE PRODUCTOS Y CARGAS EN LOS INTERCAMBIADORES

CORRIENTE	DE LA ETAPA	FASE	TEMP. (GDS. F)	FLUJO (LBMOL/HR)	FRACCIONES MOL PARA LOS COMPONENTES 1 A 6				
GAS SALIENTE	1	VAP	95.32	1889.47935	0.85957	0.08345	0.04303	0.01339	0.00044
					0.00009				
LIO SALIENTE	6	LIO	85.48	621.97065	0.02883	0.01367	0.02197	0.04203	0.03684
					0.83673				

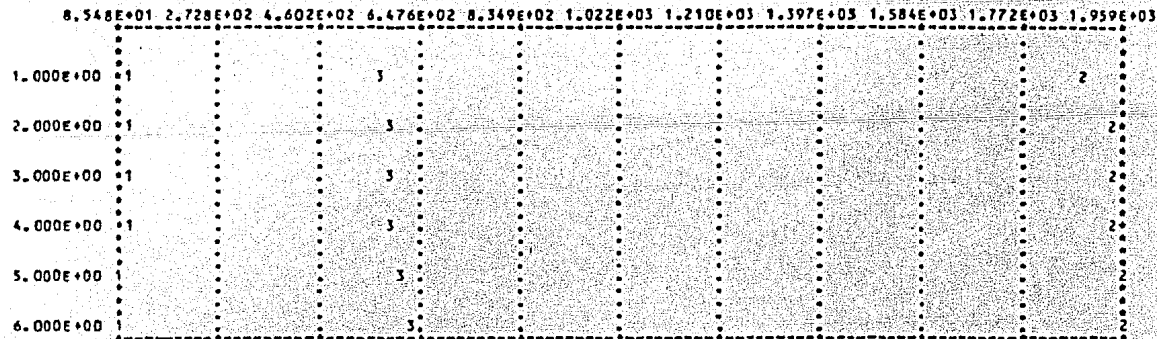
TABLA 7.3.1  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.3





SE PRESENTA A CONTINUACION UNA GRAFICA DE TEMPERATURA  
(ASIGNADOLE FL #1), FLUJO DE VAPOR (#2) Y FLUJO DE  
LIQUIDO (#3) COMO ORDENADAS EN CONTRA DEL NUMERO DE  
ETAPAS COMO ABCISAS

FLUJOS



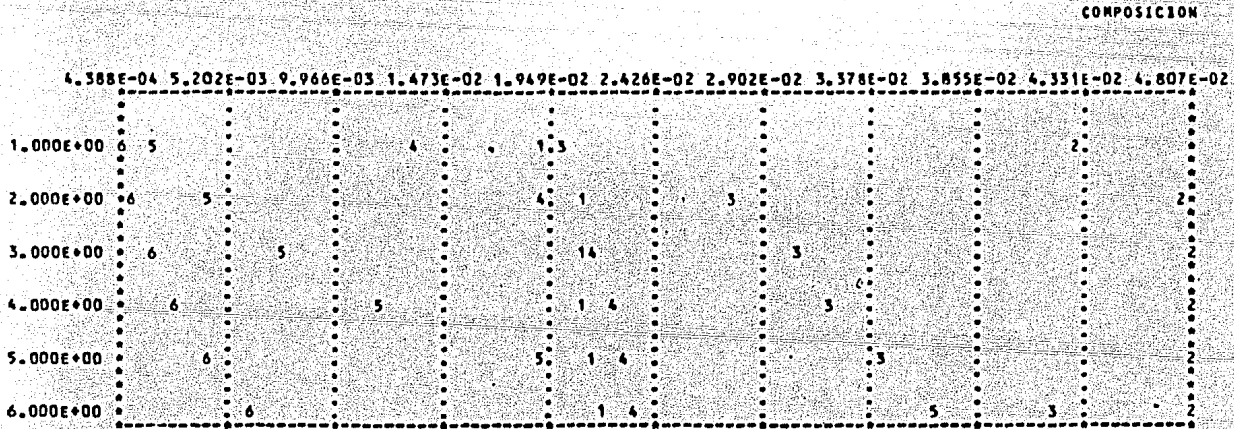
NUMERO  
DE ETAPA

TABLA 7.3.3  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.3





SE PRESENTA A CONTINUACION UNA GRAFICA DE COMPOSICIONES  
EN LA FASE LIQUIDA Y VAPOR PARA LOS SIGUIENTES COMPONENTES 3 (41 Y 2),  
4 (#3 Y 4) Y FINALMENTE EL 5 (#5 Y 6) COMO ORDENADAS EN  
CONTRA EL NUMERO DE ETAPAS COMO ABSCISAS



NUMERO  
DE ETAPA

TABLA 7.3.4  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.3

7.4 PROBLEMA: *Absorción (Resolución del Problema 7.3).*  
 METODO: *Ishii/Otto (método alternativo).*  
 CONVERGENCIA: *Criterio de Tomich.*  
 PROPIEDADES TERMODINAMICAS: *Polinomios en función de la temperatura.*

*Para obtener la solución a este problema se necesitaron seis iteraciones con un criterio de convergencia de  $5.8868E-06$  y con una tolerancia de  $6.0E-06$ . A continuación se presentan los resultados obtenidos para este problema (Tablas 7.4.1 a 7.4.4 ).*

7.5 PROBLEMA: *Destilación con condensador parcial.*  
 METODO: *Método alternativo de Ishii-Otto.*  
 CONVERGENCIA: *Suma de cuadrados.*

ESPECIFICACIONES: *Las mismas que en el problema 7.1 a excepción de:*

DESTILADO FASE VAPOR: *20.00 Lbmol/hr*

DESTILADO FASE LIQUIDA: *0.01 Lbmol/hr*

PROPIEDADES TERMODINAMICAS: *Polinomios en función de la temperatura.*

*La convergencia de este problema; así como sus resultados se muestran en las Tablas 7.5.1 a 7.5.5.*

RESULTADOS FINALES

SALIDAS DE PRODUCTOS Y CARGAS EN LOS INTERCAMBIADORES

CORRIENTE	DE LA ETAPA	FASE	TEMP. (GDS. °F)	FLUJO (LBMOL/HR)	FRACCIONES MOL PARA LOS COMPONENTES 1 A 6				
					1	4	6		
GAS SALIENTE	1	VAP	95.61	1559.91443	7.35994	0.05346	6.04302	0.01318	0.00041
					0.00009				
LIQ SALIENTE	6	LIQ	84.86	622.53557	1.12390	0.01372	0.02223	0.04264	0.03690
					J.95331				

TABLA 7.4.1  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.4

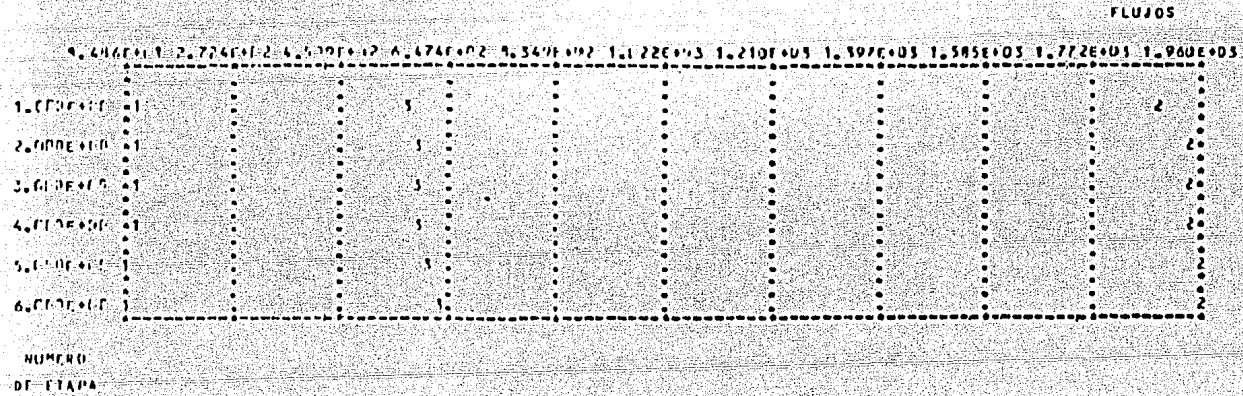
RESULTADOS FINALES

CONDICIONES INTERNAS

ETAPA	TEMP. (60S. F)	FLUJOS POR ETAPAS VAPOR (LBMOL/HR)	FLUJOS POR ETAPAS LIQUIDO (LBMOL/HR)	FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO COMPONENTES 1 AL 6				FRACCIONES MOL DEL VAPOR COMPONENTE 1 AL 6				
1	95.61	1939.91443						0.95984	0.00346	0.04302	0.01318	0.00041
1	95.61		577.96731	0.02915	0.01272	0.31876	0.01939	0.00192	0.00309			
2	97.14	1933.72225						0.84743	0.08525	0.34759	0.01867	0.00394
2	97.04		584.62996	0.02759	0.01293	0.02062	0.32692	0.70609	0.00309			
3	96.97	1746.54329						0.94427	0.08504	0.04805	0.02092	0.00163
3	96.99		599.00207	0.02750	0.01293	0.02093	0.33013	0.70710	0.00309			
4	95.48	1944.31651						0.94250	0.08468	0.04806	0.02193	0.00255
4	95.48		595.07965	0.02768	0.01299	0.02106	0.33244	0.01152	0.00309			
5	92.69	1257.99239						0.94356	0.08474	0.04805	0.02266	0.00391
5	92.69		403.97275	0.02901	0.01321	0.02135	0.33529	0.01396	0.00309			
6	84.96	1250.31718						0.93757	0.09453	0.04805	0.02357	0.00621
6	84.06		422.55557	0.02809	0.01372	0.02205	0.04264	0.03690	0.00307			

TABLA 7.4.2  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.4

SE PRESENTA A CONTINUACION UNA GRAFICA DE TEMPERATURA (ASIGNADO EL #1), FLUJO DE VAPOR (#2) Y FLUJO DE LIQUIDO (#3) COMO ORDENADAS EN CONTRA DEL NUMERO DE ETAPAS COMO ANSCISAS



TAHA 7.4.3  
 RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.4

SE PRESENTA A CONTINUACION UNA GRAFICA DE COMPOSICIONES  
 EN LA FASE LIQUIDA Y VAPOR PARA LOS SIGUIENTES COMPONENTES 2 (H Y Z),  
 3 (M Y 4) Y FINALMENTE EL 4 (M Y 6) COMO ORDENADAS EN  
 FUNCIÓN DEL NÚMERO DE ETAPAS COMO ABSCISAS

COMPOSICION

	1.277E-02	2.115E-02	3.750E-02	3.454E-02	4.140E-02	4.916E-02	5.631E-02	6.357E-02	7.073E-02	7.788E-02	8.534E-02
1.000E+00	16	35	5	4	4	2	2	2	2	2	2
2.000E+00	1	6.3	5	4	4	4	4	4	4	4	4
3.000E+00	1	1	5	4	4	4	4	4	4	4	2.36
4.000E+00	1	5.4	5	4	4	4	4	4	4	4	2
5.000E+00	1	1.6	5	4	4	4	4	4	4	4	2
6.000E+00	1	3.3	5	4	4	4	4	4	4	4	2

NÚMERO  
 DE ETAPA

TAJUA 7.4.4  
 RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.4

E.T.4.

RESULTADOS FINALES

SALIDAS DE PRODUCTOS Y CARGAS EN LOS INTERCAMBIADORES

CORRIENTE	DE LA ETAPA	FASE	TEMP (C) (S. F)	FLUJO (L/OPD/HR)	FRACCIONES MOL PARA LOS COMPONENTES 1 2 3 4 5				
DESTILADO	1	VAP	126.41	20.0000	0.14727	0.88022	0.85248	0.00003	0.00000
DESTILADO	1	LIQ	126.41	0.01000	0.05369	0.82241	0.12370	0.00020	0.00000
SALIDA	17	VAP	254.24	37.17441	0.00012	0.05341	0.68121	0.24522	0.01405
SALIDA	3	LIQ	156.24	3.00000	0.01494	0.62099	0.35595	0.00318	0.00001
FORNOS	16	LIQ	376.71	39.59000	0.00000	0.00148	0.24278	0.64440	0.11135

CARGA EN EL CONDENSADOR = -- 87082E+06 BTU/HR

CARGA DEL REFRIGERADOR = - 1220E+07 BTU/HR

TABLA 7.5.1  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.5

RESULTADOS FINALES

CONDICIONES INTERIAS

ETAPA	TEMP. (GRS. F)	FLUJOS POR VAPOR (LBMOL/HR)	ETAPAS LIQUIDO (LBMOL/HR)	FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO COMPONENTES 1 AL 5	FRACCIONES MOL DEL VAPOR COMPONENTE 1 AL 5
1	126.41	23.03633			0.14727 0.08022 0.05248 0.00003 0.00000
1	126.41		159.11771 11.4 5369 1.92241 0.12370 0.11020 0.00000		
2	142.61	170.33533			0.02476 0.01978 0.11528 0.00018 0.00000
2	142.61		147.14217 1.02123 0.75059 0.22690 0.00025 0.00300		
2	156.24	167.37217			0.03633 0.75625 0.20660 0.00077 0.00000
2	156.24		107.46445 1.4 1.94 1.62991 0.33393 0.01398 0.00001		
4	162.34	173.47455			0.03195 0.65645 0.30919 0.00270 0.00001
4	162.34		103.57209 0.02193 0.50077 0.48754 0.00969 0.00006		
5	180.02	126.53229			0.03059 0.55128 0.40962 0.00001 0.00005
5	180.02		107.12296 0.11 0.15 0.38714 0.57192 0.02553 0.00034		
6	191.17	123.13294			0.03085 0.44746 0.42738 0.02083 0.00028
6	191.17		56.43974 1.00751 0.29866 0.63259 0.05965 0.00148		
7	202.57	117.44373			0.03132 0.36134 0.52798 0.04821 0.00136
7	202.57		51.65533 1.0 1.0 1.23367 0.62838 0.12391 0.00659		
8	217.57	114.43553			0.03175 0.34348 0.52012 0.09903 0.00518
8	217.57		142.73329 1.00462 0.18355 0.55053 0.22431 0.02359		
9	227.22	115.74321			0.02988 0.26752 0.54800 0.12543 0.00798
9	227.22		193.10746 1.30415 1.15055 1.55236 0.26207 0.03066		
10	236.11	121.12746			0.02676 0.22937 0.61521 0.13970 0.00887
10	236.11		231.65456 0.05127 0.10955 0.58625 0.27201 0.03153		

TABLA 7.5.2  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.5



RESULTADOS FINALES

(CONTINUACION)

ETAPA	TEMP. (GRS. °F)	FLUJOS POR VAPOR (L3 POL/HR)	ETAPAS LIQUIDO (L3 POL/HR)	FRACCIONES POR DEL LIQUIDO					FRACCIONES POR DEL VAPOR					
				COMPONENTES 1 AL 5					COMPONENTE 1 AL 5					
11	244.35	134.65456		0.00202	0.16084	0.66880	0.95923	0.00991						
11	244.31		203.99073	0.00036	0.07286	0.60434	0.25375	0.03169						
12	253.16	127.01333		0.00055	0.18058	0.65355	0.91140	0.01133						
12	253.16		204.76904	0.00079	0.04327	0.59617	0.32684	0.03369						
13	264.28	177.77974		0.00012	0.05341	0.62181	0.24982	0.01485						
13	264.28		203.51667	0.00002	0.02138	0.54668	0.35296	0.03957						
14	276.66	163.52667		0.00002	0.02624	0.62197	0.33749	0.02126						
14	276.66		201.77366	0.00000	0.00976	0.66323	0.47721	0.04981						
15	287.62	151.07356		0.00000	0.01181	0.51794	0.63571	0.03455						
15	287.62		193.76755	0.00000	0.00465	0.55634	0.52824	0.07139						
16	306.71	151.77733		0.00000	0.00678	0.32654	0.54983	0.06131						
16	306.71		19.99230	0.00000	0.00148	0.24278	0.64440	0.11135						

TABLA 7.5.3  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.5

SE PRESENTA A CONTINUACION UNA MATRIZ DE TEMPERATURA (ASIGNÁNDOLE EL 01), FLUJO DE VAPOR (02) Y FLUJO DE LIQUIDO (03) COMO ORIENTADAS EN CONTRA DEL NÚMERO DE ETAPAS COMO ANTERIAS

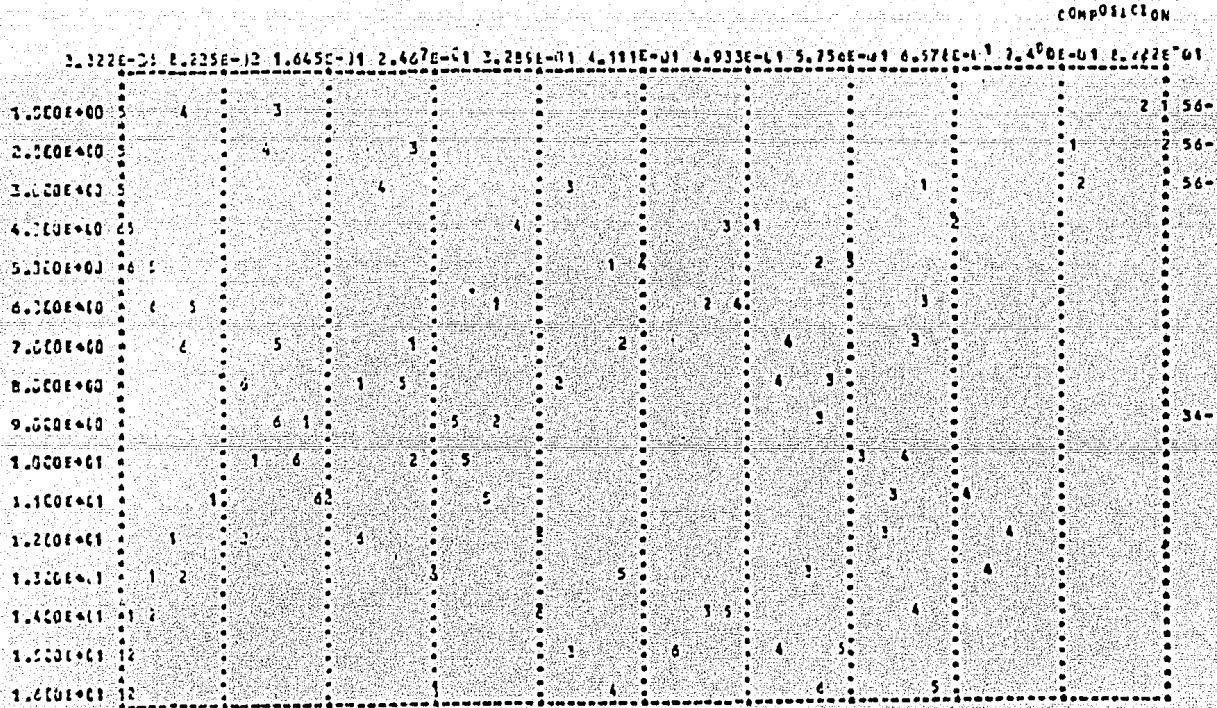
FLUJOS

	1.000E+01	1.257E+01	7.724E+01	1.365E+02	1.247E+02	1.454E+02	1.920E+02	2.767E+02	2.494E+02	2.789E+02	2.887E+02
1.000E+02	2				1	3					
2.000E+02						1	2				
3.000E+02							1	4			
4.000E+02									1		
5.000E+02					1	2				1	
6.000E+02						3					
7.000E+02							2				
8.000E+02						2		3			
9.000E+02							2		3	1	
1.000E+01						2				3	1
1.100E+01							2				3
1.200E+01								2			
1.300E+01									2		
1.400E+01										2	
1.500E+01											2
1.600E+01											

NUMERO DE ETAPA

TABLA 7.5.4  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.5

SE PRESENTA A CONTINUACION UNA GRAFICA DE COMPOSICIONES  
 EN LA FASE LIQUIDA Y VAPOR PARA LOS SIGUIENTES COMPONENTES 2 (#1 Y 2),  
 3 (#3 Y 4) Y FINALMENTE EL 4 (#5 Y 6) COMO Cadenas EN  
 CONTRA DEL NUMERO DE ETAPAS COMO ABSCISAS



NUMERO  
 DE ETAPAS

TABLA 7.5.5  
 RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.5

7.6 PROBLEMA: Destilación con condensador total.  
 METODO: Propuesto por Fredenslund y coautores.  
 CONVERGENCIA: Criterio de Discrepancias.

Esta columna fue descrita por Fredenslund (3), el programa también fue desarrollado por él y colaboradores.

ESPECIE QUIMICA	ALIMENTACION 1 (MOL/HR)	ALIMENTACION 2 (MOL/HR)
Etolol	0.00	25.00
N-Propanol	12.50	12.50
Agua	12.50	12.50
Acido Acético	25.00	0.00

NUMERO DE ETAPAS: Treinta, incluyendo condensador y rehervidor  
 (las etapas se numeran de abajo a arriba).

ALIMENTACIONES:

Localización	Etapas 7	Etapas 23
Fase	Líquida	Vapor
Flujo (Mol/hr)	50.0	50.0
Temperatura (°C)	85	110

PRESION DE LA COLUMNA: 1 ATM.

TEMPERATURAS INICIALES:

Etapas 1	100 °C
Etapas 30	80 °C

DESTILADO VAPOR 40 Mol/hr

REFLUJO EXTERNO 2.0

SALIDA LATERAL DEL  
LIQUIDO EN EL PLATO 10 20 Mol/hr

PROPIEDADES: *Entalpias por medio de polinomios en función de la temperatura. Relaciones de equilibrio con parámetros de UNIFAC.*

*El método converge en tan sólo cinco iteraciones con una tolerancia de 0.01 y un criterio de 3.4518E-02. Ver tablas 7.6.1 a 7.6.6.*



RESULTADOS FINALES

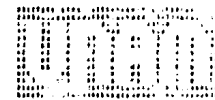
SALIDAS DE PRODUCTOS

CORRIENTE	ETAPA	FASE	TEMP. (GDS. C)	FLUJO (MOL/HR)	FRACCIONES MOL PARA LOS COMPONENTES 1 AL 4			
					1	2	3	4
DESTILADO	30	VAP	82.15	40.00000	0.53639	0.15890	0.33470	0.00001
SALIDA	11	LIQ	86.22	20.00000	0.09139	0.37671	0.52764	0.00527
FONDOS	1	LIQ	117.511	40.00000	0.01282	0.36182	0.20474	0.42063

CARGA EN EL CONDENSADOR = 7.70567E+05 CAL/HR

CARGA DEL REHERVIDOR = 6.66387E+05 CAL/HR

TABLA 7.6.1.  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.6



RESULTADOS FINALES

CONDICIONES INTERIAS

ETAPA	TEMP (GRS. C)	FLUJOS VAPOR (MOL/HR)	PUR. LTAPAS LIQUIDO (MOL/HR)	FRACCIONES MOL DEL VAPOR COMPONENTES 1 AL 4				FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO COMPONENTES 1 AL 4			
				1	2	3	4	1	2	3	4
1	107.51	81.917	40.443	1.01621	0.28586	0.018928	0.01865	0.01282	0.36182	0.20474	0.42363
2	102.14	77.577	121.917	1.01165	0.33690	0.16685	0.48561	0.01739	0.38000	0.29293	0.30948
3	99.17	74.312	117.577	1.01372	0.34796	0.22363	0.41471	0.02200	0.38450	0.37128	0.22222
4	97.00	72.270	114.312	1.01648	0.34998	0.27260	0.36095	0.02582	0.38161	0.43095	0.16162
5	95.60	71.060	112.270	1.01884	0.34750	0.30922	0.32445	0.02907	0.37642	0.47137	0.12314
6	94.75	70.362	111.060	1.02084	0.34330	0.33375	0.30161	0.03189	0.37144	0.49657	0.10009
7	94.26	68.419	110.362	1.02259	0.34042	0.34895	0.28914	0.03443	0.36743	0.51138	0.08076
8	88.59	67.689	50.419	1.04458	0.41269	0.44607	0.09727	0.05044	0.38043	0.53175	0.03738
9	86.98	67.270	57.689	1.06349	0.42790	0.46914	0.03946	0.06869	0.38213	0.53469	0.01458
10	86.22	67.119	57.270	1.08502	0.43024	0.47204	0.01269	0.09039	0.37071	0.52764	0.00527

TABLA 7.6.2  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.6

RESULTADOS FINALES

(CONTINUACION)

ETAPA	TEMP. (GRS. C)	FLUJO DE VAPOR (MOL/Hr.)	FLUJO POR ETAPA DE LIQUIDO (MOL/Hr.)	FRACCIONES MOL DEL VAPOR COMPONENTES 1 AL 4				FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO COMPONENTES 1 AL 4			
11	35.74	67.119	77.119	0.10394	0.42502	0.46586	0.00518	0.11200	0.32864	0.51742	0.03487
12	35.77	67.162	77.160	0.12281	0.41865	0.45692	0.00163	0.13420	0.35932	0.50581	0.00066
13	85.74	67.172	77.062	0.14200	0.41135	0.44682	0.00038	0.15710	0.34027	0.49361	0.00023
14	85.51	67.139	77.172	0.16211	0.40177	0.43605	0.00009	0.18092	0.33865	0.48335	0.00008
15	85.32	67.111	77.079	0.18275	0.39251	0.42461	0.00010	0.20580	0.32751	0.46666	0.00003
16	35.23	67.170	77.111	0.21436	0.38281	0.41274	0.00013	0.23182	0.31589	0.45230	0.00001
17	85.17	67.163	77.176	0.24702	0.37268	0.40030	0.00001	0.25895	0.30380	0.43725	0.00000
18	84.89	67.104	77.163	0.25065	0.36213	0.38722	0.00000	0.28723	0.29127	0.42151	0.00000
19	34.70	67.223	77.174	0.27526	0.35120	0.37353	0.00000	0.31653	0.27836	0.40510	0.00000
20	34.50	67.274	77.278	0.31478	0.33994	0.35928	0.00000	0.34672	0.26518	0.38311	0.00000

TAHLA 7.6.3  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.6

22  
21  
20  
1



RESULTADOS FINALES

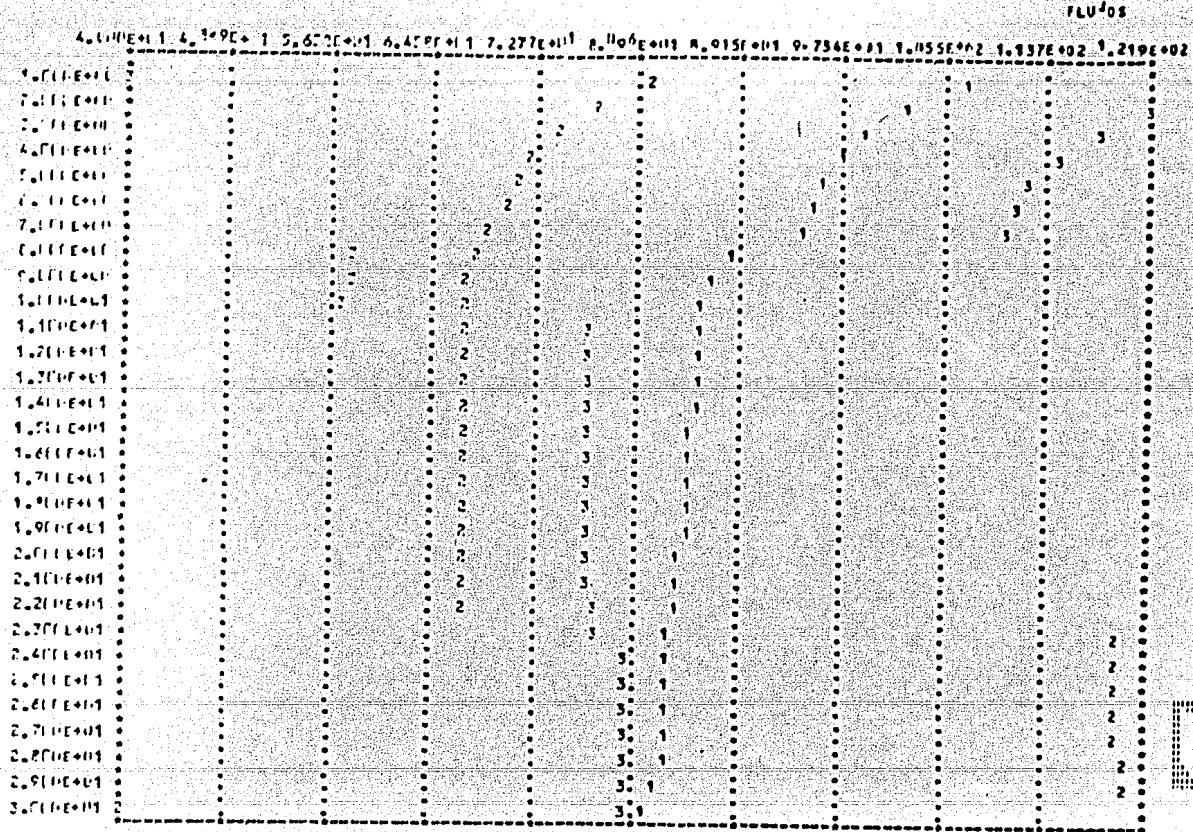
(CONTINUACION)

ETAPA	TEMP (GRS. C)	FLUJO VAPOR (MOL/Hr)	POP ETAPAS (L/HR)	FRACCIONES MOL DEL VAPOR				FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO			
				1	2	3	4	1	2	3	4
21	84.22	67.217	77.244	0.32717	0.32844	0.34450	0.00000	0.37755	0.25184	0.37061	0.00000
22	84.16	67.245	77.213	0.35792	0.31679	0.32929	0.00000	0.40674	0.23851	0.35275	0.00000
23	83.87	110.815	77.245	0.38109	0.30595	0.31376	0.00000	0.45994	0.22535	0.33471	0.00000
24	83.75	110.706	79.813	0.37161	0.27694	0.35226	0.00000	0.44291	0.21314	0.34395	0.00000
25	83.64	110.312	79.706	0.37615	0.25781	0.36614	0.00000	0.44851	0.20223	0.34927	0.00000
26	83.54	110.018	79.812	0.38447	0.24947	0.37491	0.00000	0.45803	0.19151	0.35546	0.00000
27	83.27	110.701	79.818	0.39077	0.22536	0.37509	0.00000	0.47318	0.17973	0.34709	0.00000
28	83.17	110.916	79.700	0.42153	0.21764	0.37183	0.00000	0.49618	0.16547	0.33935	0.00000
29	82.71	120.100	79.916	0.45610	0.19620	0.35771	0.00000	0.52069	0.14727	0.32304	0.00000
30	82.10	41.011	81.610	0.51639	0.15891	0.33471	0.00000	0.57628	0.12402	0.29970	0.00000

TABLA 7.6.4  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.6



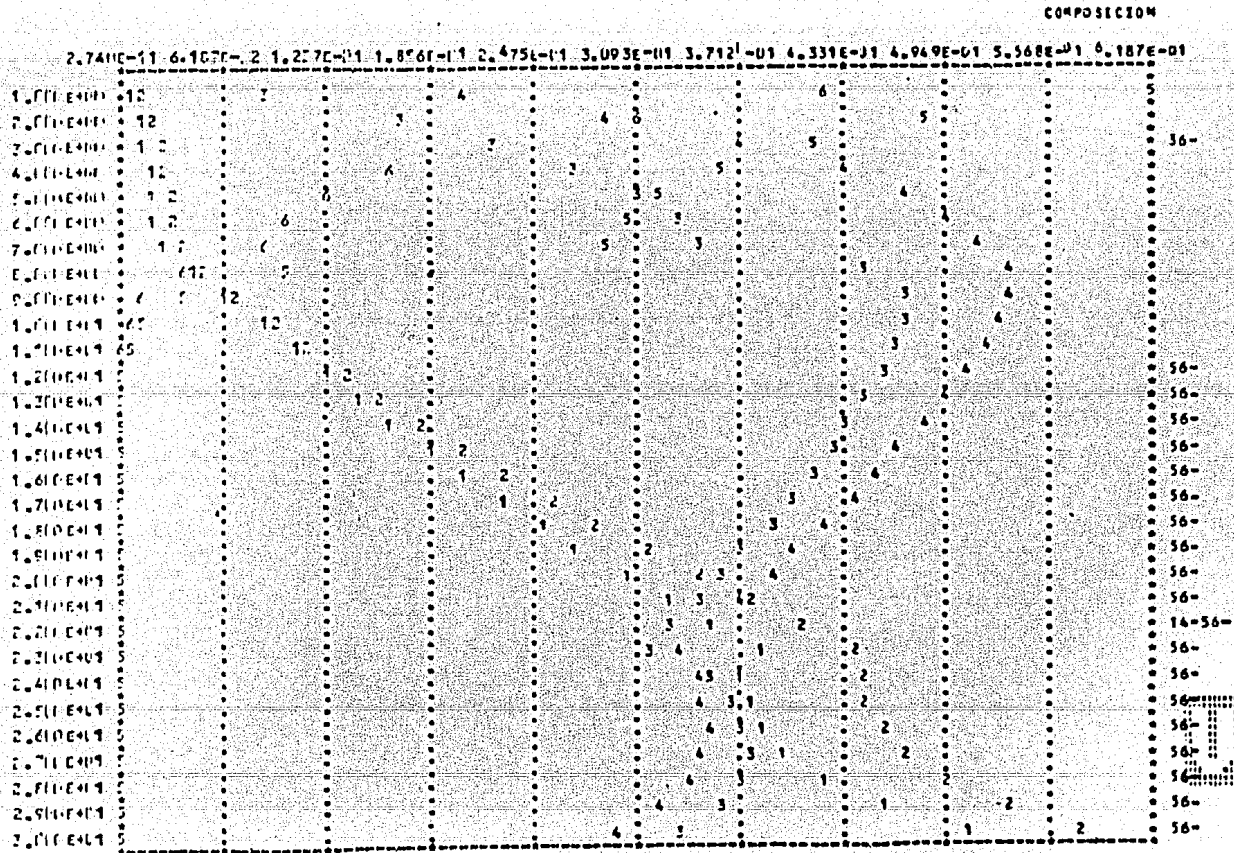
SE PRESENTA A CONTINUACION UNA GRAFICA DE TEMPERATURA  
 (SIGUIENDOLE EL #1), FLUJO DE VAPOR (#2) Y FLUJO DE  
 LIQUIDO (#3) COMO ORDENADAS EN CONTRA DEL NUMERO DE  
 ETAPAS COMO ABCISAS



NUMERO  
 DE ETAPA

TABLA 7.6.5  
 RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.6

SE PRESENTA A CONTINUACION UNA GRAFICA DE COMPOSICIONES  
EN LA FASE LIQUIDA Y VAPOR PARA LOS SIGUIENTES COMPONENTES 1 (#1 Y 2),  
2 (#3 Y 4) Y FINALMENTE EL 4 (#5 Y 6) COMO ORDENADAS EN  
CENTRA DEL NUMERO DE ETAPAS COMO ASCISAS



NUMERO  
DE ETAPA

TABLA 7.6.6  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.6

7.7	PROBLEMA	Resolución del problema 7.5
	METODO	Iskit-Otto original.
	CONVERGENCIA	Suma de cuadrados
	PROPIEDADES:	Polinomios en función de la temperatura.

Para obtener la solución a este problema se requirieron siete iteraciones, con un criterio de convergencia de  $4.38E-07$  y una tolerancia de  $1.60E-05$ . Los resultados se observan en las tablas 7.7.1 a la 7.7.3.

7.8	PROBLEMA	Destilación con condensador total
	METODO	Naphtali - Sandholm
	CONVERGENCIA	Funciones de discrepancia.
	PROPIEDADES:	Entalpias por correlación de Chao-Seader.

Esta columna fue descrita por Perry y Chilton (10)

<u>ESPECIE</u> <u>QUIMICA</u>	<u>ALIMENTACION</u> <u>(FRACCION MOL)</u>
Propano	0.05
i-Butano	0.15
n-Butano	0.25
i-Pentano	0.20
n-Pentano	0.35

Número de etapas	doce
Alimentación	
Localización:	etapa 6
Fase:	líquida
Flujo (lbmol-hr)	100
Temperatura	183 ° F
Presión de la columna	120 Psia

## TEMPERATURAS INICIALES:

ETAPA 1	165 ° F
ETAPA 12	236.2 ° F
REFLUJO EXTERNO:	2.58
FONDOS:	51.10 Lbmol/hr
PROPIEDADES TERMODINAMICAS:	Correlación de Chao-Seader y entalpías por ecuación de estado.

Después de ocho iteraciones se encontró la solución con una tolerancia de  $1.32E-04$  y un criterio de convergencia de  $1.06E-04$ . Los resultados obtenidos se encuentran en las Tablas 7.8.1 a la 7.8.5

RESULTADOS FINALES

SALIDAS DE PRODUCTOS Y CARGAS EN LOS INTFCAMBIADORES

CORRIENTE	DE LA ETAPA	FASE	TIMP. (GDS. F)	FLUJO (L/MOL/HR)	FRACCIONES MOL PARA LOS COMPONENTES 1 A 5				
DESTILADO	1	VAP	126.36	27.00000	0.14732	0.87634	0.05230	0.03003	0.00000
DESTILADO	1	LIQ	126.39	0.01000	0.05372	0.82270	0.12339	0.00020	0.00000
SALIDA	13	VAP	264.27	37.00000	0.00012	0.05342	0.69184	0.24977	0.01485
SALIDA	3	LIQ	156.13	3.00000	0.11095	0.61049	0.35537	0.00317	0.00031
FONDOS	16	LIQ	316.70	39.99000	0.00003	0.03148	0.24282	0.64437	0.11134

CARGA EN EL CONDENSADOR = -0.95198E+06 BTU/HR

CARGA DEL REHERVIDOR = .12292E+07 BTU/HR

TABLA 7.7.1  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.7

RESULTADOS FINALES

CONDICIONES INTERNAS

ETAPA	TEMP. (GDS. F)	FLUJOS POR ETAPAS VAPOR (LBMOL/HR)	FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO COMPONENTES 1 AL 5	FRACCIONES MOL DEL VAPOR COMPONENTE 1 AL 5
1	126.31	21.00000		0.14732 0.00034 0.05230 0.00003 0.00000
1	126.31		150.07500 0.05372 0.82270 0.12333 0.00020 0.00000	
2	142.55	170.11950		0.06478 0.82006 0.11498 0.00018 0.00000
2	142.55		147.91117 0.02125 0.75147 0.22641 0.00087 0.00000	
3	156.13	167.93107		0.03634 0.75732 0.20557 0.00077 0.00000
3	156.13		147.51221 0.01095 0.63049 0.35537 0.00317 0.00001	
4	163.32	130.53221		0.03194 0.65664 0.30872 0.00269 0.00001
4	163.32		103.61216 0.00891 0.50133 0.48001 0.00967 0.00006	
5	179.97	126.63214		0.03094 0.55182 0.40920 0.00799 0.00005
5	179.97		111.15616 0.00905 0.38757 0.57854 0.02950 0.00034	
6	191.13	123.17616		0.03084 0.46079 0.48729 0.02080 0.00028
6	191.13		96.46654 0.00750 0.29995 0.63227 0.05959 0.00168	
7	202.95	117.43654		0.03111 0.39154 0.52782 0.04817 0.00136
7	202.95		91.47936 0.00706 0.23383 0.62427 0.12385 0.00698	
8	217.55	114.47954		0.03178 0.34358 0.52008 0.09899 0.00559
8	217.55		142.75343 0.01662 0.18562 0.55953 0.22425 0.02398	
9	227.31	115.77363		0.02107 0.29757 0.54798 0.12540 0.00798
9	227.31		194.12648 0.00415 0.15059 0.55258 0.26282 0.00060	
10	236.10	121.14641		0.00675 0.22941 0.49531 0.13966 0.00886
10	236.10		209.67228 0.00127 0.10959 0.51623 0.27196 0.00002	

TABLA 7.7.2

CONDICIONES INTERNAS DEL PROCESO

RESULTADOS FINALES

(CONTINUACION)

ETAPA	TEMP. (CDS) °F	FLUJO POR ETAPAS VAPOR (LBMOL/HRS)	LIQUIDO (LBMOL/HRS)	FRACCIONES MOL DEL LIQUIDO COMPONENTES 1 AL 5					FRACCIONES MOL DEL VAPOR COMPONENTES 1 AL 5					
11	244.34	124.69268												
11	244.34		204.62796	0.00036	0.07283	0.01433	0.29770	0.03169						
12	253.15	127.02736							0.00355	0.10103	0.09557	0.19136	0.01152	
12	253.15		2.471624	0.00009	0.04323	0.05915	0.32679	0.03169						
13	264.27	127.97624												
13	264.27		213.52336	0.00002	0.02138	0.04673	0.39290	0.03197	0.00312	0.05342	0.09184	0.24977	0.03485	
14	276.46	163.34386												
14	276.46		211.09291	0.00003	0.00976	0.04324	0.47716	0.04980	0.00002	0.02621	0.02101	0.33164	0.32127	
15	290.75	161.11221												
15	290.75		194.76753	0.00005	0.02405	0.03639	0.56920	0.07137	0.00003	0.01182	0.01709	0.43566	0.33453	
16	316.71	153.73753												
16	316.71		19.99100	0.00000	0.00163	0.02232	0.64437	0.11134	0.00000	0.03470	0.08499	0.56901	0.30433	

TABLA 7.7.5  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.7



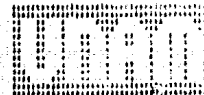
DESTILACION DE MULTICOMPONENTES

PAGINA 6

PROBLEMA 7.8 DE DESTILACION

DESPUES DE 8 ITERACIONES, LA SUMA DE CUADRADOS ES:

0.0009544E-03



PLATO 1 PRESION 12.00 TEMPERATURA 147.19 EFICIENCIA 1.000

	DESTILADO		REFLUJO	
	MOLES	FRACCION MOL	MOLES	FRACCION MOL
PROPIANO	2.000000	0.122327	12.89749	0.122327
I-PENTANO	23.000000	0.312811	33.11115	0.312811
N-PENTANO	49.000000	0.492758	86.12216	0.492758
I-HEXANO	7.000000	0.061350	8.21138	0.061350
N-HEXANO	7.000000	0.061350	8.21138	0.061350
<b>MOLES TOTALES</b>	<b>100.0000</b>		<b>126.1620</b>	
<b>ENTALPIA</b>	<b>72.1700</b>		<b>138.7814</b>	

PLATO 2 PRESION 12.00 TEMPERATURA 163.456 EFICIENCIA 1.000

	VAPOR		LIQUIDO	
	MOLES	FRACCION MOL	MOLES	FRACCION MOL
PROPIANO	47.000000	0.122327	4.06129	0.464882
I-PENTANO	24.000000	0.312811	28.18796	0.281312
N-PENTANO	52.000000	0.492758	48.28846	0.477266
I-HEXANO	6.000000	0.061350	6.06646	0.061354
N-HEXANO	6.000000	0.061350	6.06646	0.061354
<b>MOLES TOTALES</b>	<b>135.0000</b>		<b>122.6536</b>	
<b>ENTALPIA</b>	<b>17.5034</b>		<b>281.1439</b>	

PLATO 3 PRESION 12.00 TEMPERATURA 175.351 EFICIENCIA 1.000

	VAPOR		LIQUIDO	
	MOLES	FRACCION MOL	MOLES	FRACCION MOL
PROPIANO	2.000000	0.224490	1.48572	0.052456
I-PENTANO	4.000000	0.417770	10.74173	0.2405215
N-PENTANO	11.000000	0.417770	11.14360	0.3006225
I-HEXANO	4.000000	0.091172	3.27240	0.0115798
N-HEXANO	4.000000	0.091172	3.27240	0.0115798
<b>MOLES TOTALES</b>	<b>25.0000</b>		<b>31.4036</b>	
<b>ENTALPIA</b>	<b>17.7734</b>		<b>114.6036</b>	

TAULA 7.8.1  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.8

101

DESTILACION DE MULTICOMPONENTES

PROBLEMA 7.5 DE REYLACION

PROBLEMA 7.5 DE REYLACION

PLATO	PRECION	TEMPERATURA	EFICIENCIA		
4	12.2	195.821	1.0000		
	MOLES	FRACCION MOL	MOLES	LIQUIDO	FRACCION MOL
	VAPOR				
PROFANO	7.43557	0.443797	3.28574	0.149685	0.49511
I-BUTANO	7.2749	0.244444	18.22951	0.130598	0.49511
N-BUTANO	7.2749	0.244444	18.22951	0.130598	0.49511
I-PENTANO	7.2749	0.244444	18.22951	0.130598	0.49511
N-PENTANO	7.2749	0.244444	18.22951	0.130598	0.49511
MOLES TOTALES	107.2153		116.2536		
ENTALPIA	1051.406		359.4021		

PLATO	PRECION	TEMPERATURA	EFICIENCIA		
5	13.2	193.411	1.0000		
	MOLES	FRACCION MOL	MOLES	LIQUIDO	FRACCION MOL
	VAPOR				
PROFANO	6.72797	0.275526	2.47165	0.328166	0.49511
I-BUTANO	6.72797	0.275526	2.47165	0.328166	0.49511
N-BUTANO	6.72797	0.275526	2.47165	0.328166	0.49511
I-PENTANO	6.72797	0.275526	2.47165	0.328166	0.49511
N-PENTANO	6.72797	0.275526	2.47165	0.328166	0.49511
MOLES TOTALES	135.126		114.8262		
ENTALPIA	1355.426		394.8616		

PLATO	PRECION	TEMPERATURA	EFICIENCIA		
6	13.2	190.659	1.0000		
	MOLES	FRACCION MOL	MOLES	LIQUIDO	FRACCION MOL
	VAPOR				
PROFANO	6.27167	0.290419	2.57165	0.110475	0.49511
I-BUTANO	6.27167	0.290419	2.57165	0.110475	0.49511
N-BUTANO	6.27167	0.290419	2.57165	0.110475	0.49511
I-PENTANO	6.27167	0.290419	2.57165	0.110475	0.49511
N-PENTANO	6.27167	0.290419	2.57165	0.110475	0.49511
MOLES TOTALES	121.126		102.1762		
ENTALPIA	1211.426		392.1762		

TABLA 7.8.2  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.8



DESTILACION DE MULTICOMPONENTES  
PRIMERA T. DE DESTILACION

PAGINA 9



PLATO 10	PRECION 17.0	TEMPERATURA 224.642	EFICIENCIA 1.0000
	MOLLS	VAPOR FRACCION MOL	MOLES LIQUIDO FRACCION MOL
PROFANO	1.111336	0.095442E-1	1.281353E-11
1-ETILANO	1.111336	0.365019E-1	1.248161E-1
1-PROPIANO	1.111336	0.161419E-1	1.209347E-1
1-PIRANO	1.111336	0.454217E-1	1.210337E-1
1-PIRANO	1.111336	0.454217E-1	1.210337E-1
MOLLS TOTALES	165.3957		2178.2701
ENTALPIA	2250.370		1195.522

PLATO 11	PRECION 12.0	TEMPERATURA 220.614	EFICIENCIA 1.0000
	MOLLS	VAPOR FRACCION MOL	MOLES LIQUIDO FRACCION MOL
PROFANO	1.111336	0.170532E-1	1.1175427E-1
1-ETILANO	1.111336	0.405219E-1	1.091913E-1
1-PROPIANO	1.111336	0.405219E-1	1.091913E-1
1-PIRANO	1.111336	0.405219E-1	1.091913E-1
1-PIRANO	1.111336	0.537866E-1	1.091913E-1
MOLLS TOTALES	165.3957		2178.2701
ENTALPIA	2250.370		1142.276

PLATO 12	PRECION 12.0	TEMPERATURA 223.599	EFICIENCIA 1.0000
	MOLLS	VAPOR EN FONDO FRACCION MOL	MOLES FONDO FRACCION MOL
PROFANO	1.111336	0.053702E-1	1.1175427E-1
1-ETILANO	1.111336	0.112449E-1	1.091913E-1
1-PROPIANO	1.111336	0.053702E-1	1.091913E-1
1-PIRANO	1.111336	0.053702E-1	1.091913E-1
1-PIRANO	1.111336	0.190169E-1	1.091913E-1
MOLLS TOTALES	165.3957		2178.2701
ENTALPIA	2250.370		275.703

TABLA 7.8.4  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.8

DESTILACION DE MULTICOMPONENTES  
PROBLEMA 7.8 DE DESTILACION

PAGINA 90



CALOR ANADIDO AL CONDENSADOR -1443.527  
CALOR ANADIDO AL REHEFRIADOR 1427.004

TABLA 7.8.5.  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.8

7.9	PROBLEMA:	Resolución del Problema 7.1
	METODO:	Naphtali - Sandholm
	CONVERGENCIA:	Funciones de discrepancia
	PROPIEDADES TERMODINAMICAS:	Polinomios en función de la temperatura.

Se requirieron sesenta y ocho iteraciones para lograr la convergencia de este problema; teniendo una tolerancia de  $7.0 \text{ E}^{-01}$  y un criterio de  $6.7 \text{ E}^{-01}$ . Los resultados se encuentran reportados en las Tablas 7.9.1 a la 7.9.6.

7.10	PROBLEMA:	Resolución del Problema 7.3
	METODO:	Naphtali - Sandholm
	CONVERGENCIA:	Funciones de discrepancia.
	PROPIEDADES TERMODINAMICAS:	Polinomios en función de la temperatura.

La solución se consiguió con un criterio de convergencia de 0.76366 después de diecinueve iteraciones, (utilizando una tolerancia de 1.0); Los resultados pueden ser observados en las Tablas 7.10.1 a la 7.10.3.

El problema que se presenta en la Tabla 7.11; dentro de un cierto rango de especificaciones presenta problemas de convergencia; como lo puntualiza Magnussen (11). Se encuentra que con idénticas especificaciones para la columna y utilizando un mismo modelo matemático para el cálculo de las propiedades físicas se pueden determinar tres diferentes conjuntos de variables independientes (temperaturas y composiciones); las cuales además satisfacen los balances de masa y relaciones de equilibrio. Es decir, existen múltiples soluciones para un mismo problema.

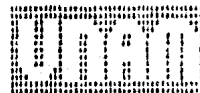
DESTILACION DE MULTICOMPONENTES

PAGINA 11

PROBLEMA NUMERO 7.9 PARA DESTILACION

DESPUES DE 65 ITERACIONES LA SUMA DE CUADRADOS ES:

0.6715093



PLATO 1	PRESION (PSI)	TEMPERATURA	02.178	EFICIENCIA	1.0000																																																
<table border="0" style="width:100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td></td> <td style="text-align: center;">MOLES DESTILADO</td> <td style="text-align: center;">FRACCION MOL</td> <td style="text-align: center;">MOLES</td> <td style="text-align: center;">REFLUJO</td> <td style="text-align: center;">FRACCION MOL</td> </tr> <tr> <td>ETANO</td> <td>0.000000</td> <td>0.1466473</td> <td>21.99944</td> <td>0.1466628</td> <td></td> </tr> <tr> <td>PROPANO</td> <td>1.645000</td> <td>0.1224400</td> <td>1.317781</td> <td>0.1118309</td> <td></td> </tr> <tr> <td>N-BUTANO</td> <td>1.645000</td> <td>0.1159277E-1</td> <td>0.218896</td> <td>0.1159277E-1</td> <td></td> </tr> <tr> <td>N-PENTANO</td> <td>0.000000</td> <td>0.000000E-1</td> <td>0.000000</td> <td>0.000000E-1</td> <td></td> </tr> <tr> <td>N-HEXANO</td> <td>0.000000</td> <td>0.000000E-1</td> <td>0.000000</td> <td>0.000000E-1</td> <td></td> </tr> <tr> <td><b>MOLLS TOTALES</b></td> <td><b>3.290000</b></td> <td></td> <td><b>23.31733</b></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td><b>ENTALPIA</b></td> <td><b>14.95641</b></td> <td></td> <td><b>1093957.</b></td> <td></td> <td></td> </tr> </table>							MOLES DESTILADO	FRACCION MOL	MOLES	REFLUJO	FRACCION MOL	ETANO	0.000000	0.1466473	21.99944	0.1466628		PROPANO	1.645000	0.1224400	1.317781	0.1118309		N-BUTANO	1.645000	0.1159277E-1	0.218896	0.1159277E-1		N-PENTANO	0.000000	0.000000E-1	0.000000	0.000000E-1		N-HEXANO	0.000000	0.000000E-1	0.000000	0.000000E-1		<b>MOLLS TOTALES</b>	<b>3.290000</b>		<b>23.31733</b>			<b>ENTALPIA</b>	<b>14.95641</b>		<b>1093957.</b>		
	MOLES DESTILADO	FRACCION MOL	MOLES	REFLUJO	FRACCION MOL																																																
ETANO	0.000000	0.1466473	21.99944	0.1466628																																																	
PROPANO	1.645000	0.1224400	1.317781	0.1118309																																																	
N-BUTANO	1.645000	0.1159277E-1	0.218896	0.1159277E-1																																																	
N-PENTANO	0.000000	0.000000E-1	0.000000	0.000000E-1																																																	
N-HEXANO	0.000000	0.000000E-1	0.000000	0.000000E-1																																																	
<b>MOLLS TOTALES</b>	<b>3.290000</b>		<b>23.31733</b>																																																		
<b>ENTALPIA</b>	<b>14.95641</b>		<b>1093957.</b>																																																		

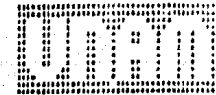
PLATO 2	PRESION (PSI)	TEMPERATURA	102.29	EFICIENCIA	1.0000																																																
<table border="0" style="width:100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td></td> <td style="text-align: center;">MOLES VAPOR</td> <td style="text-align: center;">FRACCION MOL</td> <td style="text-align: center;">MOLES LIQUIDO</td> <td style="text-align: center;">FRACCION MOL</td> <td></td> </tr> <tr> <td>ETANO</td> <td>0.000000</td> <td>0.1466473</td> <td>0.324125</td> <td>0.338338E-1</td> <td></td> </tr> <tr> <td>PROPANO</td> <td>1.645000</td> <td>0.1224400</td> <td>1.418179</td> <td>0.1118309</td> <td></td> </tr> <tr> <td>N-BUTANO</td> <td>1.645000</td> <td>0.1159277E-1</td> <td>0.318117</td> <td>0.270171E-1</td> <td></td> </tr> <tr> <td>N-PENTANO</td> <td>0.000000</td> <td>0.000000E-1</td> <td>0.000000</td> <td>0.000000E-1</td> <td></td> </tr> <tr> <td>N-HEXANO</td> <td>0.000000</td> <td>0.000000E-1</td> <td>0.000000</td> <td>0.000000E-1</td> <td></td> </tr> <tr> <td><b>MOLLS TOTALES</b></td> <td><b>3.290000</b></td> <td></td> <td><b>1.742304</b></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td><b>ENTALPIA</b></td> <td><b>14.95641</b></td> <td></td> <td><b>1313518.</b></td> <td></td> <td></td> </tr> </table>							MOLES VAPOR	FRACCION MOL	MOLES LIQUIDO	FRACCION MOL		ETANO	0.000000	0.1466473	0.324125	0.338338E-1		PROPANO	1.645000	0.1224400	1.418179	0.1118309		N-BUTANO	1.645000	0.1159277E-1	0.318117	0.270171E-1		N-PENTANO	0.000000	0.000000E-1	0.000000	0.000000E-1		N-HEXANO	0.000000	0.000000E-1	0.000000	0.000000E-1		<b>MOLLS TOTALES</b>	<b>3.290000</b>		<b>1.742304</b>			<b>ENTALPIA</b>	<b>14.95641</b>		<b>1313518.</b>		
	MOLES VAPOR	FRACCION MOL	MOLES LIQUIDO	FRACCION MOL																																																	
ETANO	0.000000	0.1466473	0.324125	0.338338E-1																																																	
PROPANO	1.645000	0.1224400	1.418179	0.1118309																																																	
N-BUTANO	1.645000	0.1159277E-1	0.318117	0.270171E-1																																																	
N-PENTANO	0.000000	0.000000E-1	0.000000	0.000000E-1																																																	
N-HEXANO	0.000000	0.000000E-1	0.000000	0.000000E-1																																																	
<b>MOLLS TOTALES</b>	<b>3.290000</b>		<b>1.742304</b>																																																		
<b>ENTALPIA</b>	<b>14.95641</b>		<b>1313518.</b>																																																		

PLATO 3	PRESION (PSI)	TEMPERATURA	141.904	EFICIENCIA	1.0000																																																
<table border="0" style="width:100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td></td> <td style="text-align: center;">MOLES VAPOR</td> <td style="text-align: center;">FRACCION MOL</td> <td style="text-align: center;">MOLES LIQUIDO</td> <td style="text-align: center;">FRACCION MOL</td> <td></td> </tr> <tr> <td>ETANO</td> <td>0.000000</td> <td>0.1466473E-1</td> <td>0.461300</td> <td>0.1159277E-1</td> <td></td> </tr> <tr> <td>PROPANO</td> <td>1.645000</td> <td>0.1224400</td> <td>0.26728</td> <td>0.2001550</td> <td></td> </tr> <tr> <td>N-BUTANO</td> <td>1.645000</td> <td>0.1159277E-1</td> <td>0.17803</td> <td>0.167701E-1</td> <td></td> </tr> <tr> <td>N-PENTANO</td> <td>0.000000</td> <td>0.000000E-1</td> <td>0.000000</td> <td>0.000000E-1</td> <td></td> </tr> <tr> <td>N-HEXANO</td> <td>0.000000</td> <td>0.000000E-1</td> <td>0.000000</td> <td>0.000000E-1</td> <td></td> </tr> <tr> <td><b>MOLLS TOTALES</b></td> <td><b>3.290000</b></td> <td></td> <td><b>0.806613</b></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td><b>ENTALPIA</b></td> <td><b>14.95641</b></td> <td></td> <td><b>1157243.</b></td> <td></td> <td></td> </tr> </table>							MOLES VAPOR	FRACCION MOL	MOLES LIQUIDO	FRACCION MOL		ETANO	0.000000	0.1466473E-1	0.461300	0.1159277E-1		PROPANO	1.645000	0.1224400	0.26728	0.2001550		N-BUTANO	1.645000	0.1159277E-1	0.17803	0.167701E-1		N-PENTANO	0.000000	0.000000E-1	0.000000	0.000000E-1		N-HEXANO	0.000000	0.000000E-1	0.000000	0.000000E-1		<b>MOLLS TOTALES</b>	<b>3.290000</b>		<b>0.806613</b>			<b>ENTALPIA</b>	<b>14.95641</b>		<b>1157243.</b>		
	MOLES VAPOR	FRACCION MOL	MOLES LIQUIDO	FRACCION MOL																																																	
ETANO	0.000000	0.1466473E-1	0.461300	0.1159277E-1																																																	
PROPANO	1.645000	0.1224400	0.26728	0.2001550																																																	
N-BUTANO	1.645000	0.1159277E-1	0.17803	0.167701E-1																																																	
N-PENTANO	0.000000	0.000000E-1	0.000000	0.000000E-1																																																	
N-HEXANO	0.000000	0.000000E-1	0.000000	0.000000E-1																																																	
<b>MOLLS TOTALES</b>	<b>3.290000</b>		<b>0.806613</b>																																																		
<b>ENTALPIA</b>	<b>14.95641</b>		<b>1157243.</b>																																																		

TABLA 7.9.1  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.9

DESTILACION DE MULTICOMPONENTES  
 PROBLEMA NUMERO 7.9 PARA DESTILACION

PAGINA 12



PLATO 4 PRESION 25.0 TEMPERATURA 159.325 EFICIENCIA 1.0000

	MOLES	VAPOR FRACCION MOL	MOLES	LIQUIDO FRACCION MOL
ETANO	6.4578E-1	0.20571E-1	1.31645E-1	0.1171447E-1
PROPANO	2.9147E-1	0.42715E-1	1.1922E-1	0.51591E-1
N-BUTANO	1.4224E-1	0.21461E-1	4.2346E-2	0.37692E-1
N-PIRANO	0.7012E-1	0.10732E-1	2.1126E-2	0.18359E-1
N-HEXANO	0.3506E-1	0.53743E-2	1.0562E-2	0.91213E-2
MOLES TOTALES	1.1702E-1		1.1217E-1	
ENTALPIA	111.026		116997.	

PLATO 5 PRESION 25.0 TEMPERATURA 175.529 EFICIENCIA 1.0000

	MOLES	VAPOR FRACCION MOL	MOLES	LIQUIDO FRACCION MOL
ETANO	4.1423E-1	0.11757E-1	1.9537E-1	0.14926E-1
PROPANO	1.8139E-1	0.5043E-1	5.1777E-1	0.55467E-1
N-BUTANO	9.069E-2	0.2247E-1	1.0131E-1	0.51577E-1
N-PIRANO	0.4534E-1	0.11767E-1	5.2528E-2	0.17681E-1
N-HEXANO	0.2267E-1	0.2945E-2	0.2628E-2	0.22878E-2
MOLES TOTALES	0.7702E-1		1.1157E-1	
ENTALPIA	116265.		1265273.	

PLATO 6 PRESION 25.0 TEMPERATURA 189.350 EFICIENCIA 1.0000

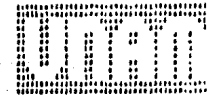
	MOLES	VAPOR FRACCION MOL	MOLES	LIQUIDO FRACCION MOL
ETANO	0.5570E-1	0.2360E-1	1.2214E-1	0.74344E-2
PROPANO	0.2785E-1	0.4471E-1	2.0177E-1	0.1131E-1
N-BUTANO	0.1392E-1	0.2471E-1	2.0177E-1	0.20868E-1
N-PIRANO	0.0696E-1	0.1235E-1	5.0859E-2	0.44693E-1
N-HEXANO	0.0348E-1	0.5970E-2	1.1379E-2	0.12352E-1
MOLES TOTALES	0.1072E-1		1.1157E-1	
ENTALPIA	1110.11		1161623.	

TABLA 7.9.2  
 RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.9



DESTILACION DE MULTICOMPONENTES  
 PROBLEMA NUMERO 7.9 PARA DESTILACION

PAGINA 13



PLATO 7 PRESION 25.1 TEMPERATURA 201.422 EFICILNCIA 1.0000

	MOLES	V.VOR FRACCION MOL	MOLES	LIQUIDO FRACCION MOL
ETANO	1.110000	0.700224E-11	1.7532913	0.6114271E-12
PROPANO	2.000000	0.2194438	36.31073	0.0000000
AMETANO	2.000000	0.2194438	74.31073	0.0000000
N-PIRANO	1.000000	0.2194438	11.73073	0.0000000
N-PIRANO	1.1337174	0.1107733E-12	1.0151977	0.0000000E-12
MOLES TOTALES	17.24000		117.6400	
ENTALPIA	262417.7		1525031.	

PLATO 8 PRESION 25.1 TEMPERATURA 215.947 EFICILNCIA 1.0000

	MOLES	V.VOR FRACCION MOL	MOLES	LIQUIDO FRACCION MOL
ETANO	1.110000	0.712722E-11	1.0689207	0.6114271E-12
PROPANO	2.000000	0.2144438	18.21073	0.0000000
AMETANO	2.000000	0.2144438	11.21073	0.0000000
N-PIRANO	1.000000	0.2144438	3.21073	0.0000000
N-PIRANO	1.000000	0.2144438	2.46373	0.0000000E-11
MOLES TOTALES	17.24000		172.1936	
ENTALPIA	262417.7		2412343.	

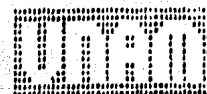
PLATO 9 PRESION 25.1 TEMPERATURA 227.721 EFICILNCIA 1.0000

	MOLES	V.VOR FRACCION MOL	MOLES	LIQUIDO FRACCION MOL
ETANO	1.110000	1.000224E-11	1.7000000	0.6114271E-12
PROPANO	2.000000	0.2144438	12.01073	0.0000000
AMETANO	2.000000	0.2144438	23.01073	0.0000000
N-PIRANO	1.000000	0.2144438	8.115732	0.0000000E-11
MOLES TOTALES	17.24000		34.83861	
ENTALPIA	262417.7		346386.1	

TABLA 7.9.3  
 RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.9

DESTILACION DE MULTICOMPONENTES  
 PROBLEMA NUMERO 7.9 PARA DESTILACION

PAGINA 14



PLATO 11 PRECISION 25.0 TEMPERATURA 237.915 EFICIENCIA 1.0000

	MOLES VAPOR	FRACCION MOL	MOLES LIQUIDO	FRACCION MOL
ETANCO	1.420342E-1	0.172E-12	2.21979E-1	0.45332E-13
PROPANO	1.111204E-1	1.26240E-12	3.20113E-1	0.31576E-11
N-BUTANO	1.124755E-1	1.10497E-12	5.78972E-1	0.23613E-11
N-PENTANO	1.11574E-1	0.95349E-12	6.27527E-1	0.56211E-11
MOLES TOTALES	4.77425E-1		2.64225E-1	
ENTALPIA	200173.		277267.	

PLATO 11 PRECISION 25.0 TEMPERATURA 245.259 EFICIENCIA 1.0000

	MOLES VAPOR	FRACCION MOL	MOLES LIQUIDO	FRACCION MOL
ETANCO	1.420342E-1	0.172E-12	6.32623E-1	0.24571E-13
PROPANO	1.111204E-1	1.26240E-12	1.58304E-1	0.13901E-01
N-BUTANO	1.124755E-1	1.10497E-12	6.51491E-1	0.24117E-11
N-PENTANO	1.11574E-1	0.95349E-12	6.51847E-1	0.25321E-11
MOLES TOTALES	4.77425E-1		2.57425E-1	
ENTALPIA	200173.		477387.	

PLATO 12 PRECISION 25.0 TEMPERATURA 253.734 EFICIENCIA 1.0000

	MOLES VAPOR	FRACCION MOL	MOLES LIQUIDO	FRACCION MOL
ETANCO	1.420342E-1	0.172E-12	1.61113E-1	0.21566E-14
PROPANO	1.111204E-1	1.26240E-12	6.64374E-1	0.24534E-11
N-BUTANO	1.124755E-1	1.10497E-12	1.76589E-1	0.24742E-11
N-PENTANO	1.11574E-1	0.95349E-12	4.18434E-1	0.22286E-11
MOLES TOTALES	4.77425E-1		2.77115E-1	
ENTALPIA	200194.		278342.	

TABLA 7.9.4  
 RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.9



PLATO 13 PRECISION 25.00 TEMPERATURA 264.814 EFICIENCIA 1.0000

	MOLES	V. POR FRACCION MOL	MOLES	LIQUIDO FRACCION MOL
ETANO	1.75017E-11	0.77017E-11	1.40767E-12	1.117518E-11
PROPANO	1.75017E-11	0.111602E-11	1.56018E-12	1.632827E-11
N-BUTANO	1.75017E-11	0.219341E-11	1.849046E-12	0.285321E-11
N-PENTANO	1.75017E-11	0.219341E-11	1.849046E-12	0.285321E-11
N-HEXANO	1.75017E-11	0.1177353E-11	9.389773E-13	0.285321E-11
<b>MOLLES TOTALES</b>	<b>1.75017E-11</b>		<b>3.158106E-12</b>	
<b>ENTALPIA</b>	<b>4.67977E-11</b>		<b>5478446E-12</b>	

PLATO 14 PRECISION 25.00 TEMPERATURA 278.435 EFICIENCIA 1.0000

	MOLES	V. POR FRACCION MOL	MOLES	LIQUIDO FRACCION MOL
ETANO	1.20533E-12	0.267233E-14	7.46234E-13	1.922197E-15
PROPANO	1.20533E-12	0.162713E-14	3.69918E-13	0.952497E-12
N-BUTANO	1.20533E-12	0.267233E-14	3.69918E-13	0.475319E-11
N-PENTANO	1.20533E-12	0.267233E-14	3.69918E-13	0.475319E-11
N-HEXANO	1.20533E-12	0.172087E-14	1.619829E-13	0.163580E-11
<b>MOLLES TOTALES</b>	<b>1.20533E-12</b>		<b>7.892174E-13</b>	
<b>ENTALPIA</b>	<b>53.811E-11</b>		<b>714.523E-11</b>	

PLATO 15 PRECISION 25.00 TEMPERATURA 294.212 EFICIENCIA 1.0000

	MOLES	V. POR FRACCION MOL	MOLES	LIQUIDO FRACCION MOL
ETANO	7.44735E-17	0.212323E-16	1.67131E-13	0.331877E-16
PROPANO	7.44735E-17	0.267233E-16	3.37159E-13	0.111893E-12
N-BUTANO	7.44735E-17	0.267233E-16	3.37159E-13	0.222706E-11
N-PENTANO	7.44735E-17	0.267233E-16	3.37159E-13	0.222706E-11
N-HEXANO	7.44735E-17	0.144706E-16	3.61479E-13	0.364196E-11
<b>MOLLES TOTALES</b>	<b>7.44735E-17</b>		<b>5.693011E-13</b>	
<b>ENTALPIA</b>	<b>7.5131E-11</b>		<b>7.134317E-11</b>	

TABLA 7.9.5  
 RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.9

DISTILACION DE MULTICOMPONENTES  
 PROBLEMA NUMERO 7.9 PARA DISTILACION

PAGINA 10



PLATO 16    PRESTON 25.7    TEMPERATURA 319.724    EFICIENCIA 1.0000

	V.P.P.A. IN FONDOS	FRACCION MOL	MOLCS	FONDOS	FRACCION MOL
ETANO	1654777E-17	0.000000E+00	0.000000E+00	1643549E-15	0.000000E+00
PROPANO	4420048E-17	0.000000E+00	0.000000E+00	3396433E-11	0.000000E+00
N-BUTANO	4420048E-17	0.000000E+00	0.000000E+00	8.810987E-07	0.000000E+00
N-PENTANO	4420048E-17	0.000000E+00	0.000000E+00	2.231574E-05	0.000000E+00
N-HEXANO	4420048E-17	0.000000E+00	0.000000E+00	4.871367E-04	0.000000E+00
MOLCS TOTALES	436.6177		436.6177		
ENTALPIA	1.7176E+06		837518.5		

CALOR ANADIDO AL CONDENSADOR -1,149422.

CALOR ANADIDO AL REHEVADOR 121.101.

TABLA 7.9.6  
 RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.9

DESTILACION DE MULTICOMPONENTES

PAGINA 6

PROBLEMA NUMERO 7.10 PARA ABSORCION

DESPUES DE 19 ITERACIONES, LA SUMA DE CUADRADOS ES:

0.7636605

PLATO 1 PRESION 75.1 TEMPERATURA 95.293 EFICIENCIA 1.0000

	DESTILADO		REFLUJO	
	MOLES	FRACCION MOL	MOLES	FRACCION MOL
METANO	10.24000	0.00000	16.45054	0.036444E+11
ETANO	1.00000	0.00000	7.41577	0.127932E+11
N-BUTANO	1.00000	0.00000	11.71345	0.1847165E+11
N-PENTANO	1.00000	0.00000	11.01140	0.1811959E+11
N-HEXANO	1.00000	0.00000	11.82000	0.1866720E+11
ACEITE ADSORBEDOR	1.00000	0.00000	533.1127	0.9185117
MOLES TOTALES	13.24000		581.2061	
ENTALPIA	1.00000E+10		1.1089196E+10	

PLATO 2 PRESION 75.1 TEMPERATURA 96.850 EFICIENCIA 1.0000

	VAPOR		LIQUIDO	
	MOLES	FRACCION MOL	MOLES	FRACCION MOL
METANO	10.24000	0.00000	16.31660	0.276311E+11
ETANO	1.00000	0.00000	7.41577	0.127932E+11
N-BUTANO	1.00000	0.00000	11.71345	0.227494E+11
N-PENTANO	1.00000	0.00000	11.01140	0.266319E+11
N-HEXANO	1.00000	0.00000	11.82000	0.257632E+11
ACEITE ADSORBEDOR	1.00000	0.00000	533.1127	0.9185117
MOLES TOTALES	13.24000		581.2061	
ENTALPIA	1.00000E+10		1.133337E+10	

TABLA 7.10.4  
RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.10



DISTRIBUCION DE MULTICOMPONENTES  
 PROBLEMA 7.10.2 PARA ABSORCION

PAGINA 7



PLATO 3	PRECION 75.0	TEMPERATURA 97.433	EFICIENCIA 1.000	VAPOR		LIQUIDO	
				MOLES	FRACCION MOL	MOLES	FRACCION MOL
MEYANO	164.1336	0.043744	16.29939	0.27537	16.29939	0.27537	16.29939
ETANO	105.8742	0.011602	7.811469	0.16294	7.811469	0.16294	7.811469
N-PROPANO	40.8742	0.004174	18.11784	0.04726	18.11784	0.04726	18.11784
I-BUTANO	4.2424	0.000470	4.2424	0.00112	4.2424	0.00112	4.2424
ACEITE ABSORBEDOR	1.1111	0.015016	533.133	0.99112	533.133	0.99112	533.133
MOLES TOTALES	175.2222		591.464		591.464		591.464
ENTALPIA	275.2222		111027.0		111027.0		111027.0

PLATO 4	PRECION 75.0	TEMPERATURA 97.133	EFICIENCIA 1.000	VAPOR		LIQUIDO	
				MOLES	FRACCION MOL	MOLES	FRACCION MOL
MEYANO	164.1336	0.043744	16.4663	0.27537	16.4663	0.27537	16.4663
ETANO	105.8742	0.011602	7.864329	0.16294	7.864329	0.16294	7.864329
N-PROPANO	40.8742	0.004174	18.11784	0.04726	18.11784	0.04726	18.11784
I-BUTANO	4.2424	0.000470	4.2424	0.00112	4.2424	0.00112	4.2424
ACEITE ABSORBEDOR	1.1111	0.015016	532.9961	0.99112	532.9961	0.99112	532.9961
MOLES TOTALES	175.2222		591.3711		591.3711		591.3711
ENTALPIA	275.2222		111021.0		111021.0		111021.0

PLATO 5	PRECION 75.0	TEMPERATURA 94.515	EFICIENCIA 1.000	VAPOR		LIQUIDO	
				MOLES	FRACCION MOL	MOLES	FRACCION MOL
MEYANO	164.1336	0.043744	16.70701	0.27537	16.70701	0.27537	16.70701
ETANO	105.8742	0.011602	7.840111	0.16294	7.840111	0.16294	7.840111
N-PROPANO	40.8742	0.004174	18.11784	0.04726	18.11784	0.04726	18.11784
I-BUTANO	4.2424	0.000470	4.2424	0.00112	4.2424	0.00112	4.2424
ACEITE ABSORBEDOR	1.1111	0.015016	523.9625	0.99112	523.9625	0.99112	523.9625
MOLES TOTALES	175.2222		601.2111		601.2111		601.2111
ENTALPIA	275.2222		111021.0		111021.0		111021.0

TABLA 7.10.2  
 RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.10

DESTILACION DE MULTICOMPONENTES  
 PROBLEMA NUMERO 7.1. PARA ABSORCION

PAGINA 9



PLATO 6 PRECION 75.00 TEMPERATURA 86.415 EFICIENCIA 1.000

	VAPORES EN FONDOS		FONDOS	
	MOLES	FRACCION MOL	MOLES	FRACCION MOL
HEXANO	102.1957	= 877.479	17.24422	= 2385.161E-11
ETANO	235.2034	= 347.971E-11	3.245712	= 1337895E-11
N-PROPANO	64.11226	= 211.439E-11	13.76113	= 148187E-11
N-BUTANO	17.12574	= 125.705E-11	44.98331	= 625103E-11
N-PENTANO	1.127850	= 6750.35E-12	573.3267	= 110566917
ACEITE ABSORBIDO				
<b>TOTALES</b>	<b>407.744</b>		<b>671.9711</b>	
<b>ENTRADA</b>	<b>150420E+10</b>		<b>1158178E+13</b>	

CALOR ANADIDO AL CONDENSADOR = 2313765E+11

CALOR ANADIDO AL RECALENTADOR = 2285.99

TABLA 7.10.3  
 RESULTADOS DEL PROBLEMA 7.10

TABLA 7.11

COMPUESTOS:	Etanol	
	Agua	
	Benceno	
NUMERO DE ETAPAS:	27	
ALIMENTACIONES		
Localización	Etapa 6	Etapa 1
Flujo (Moles)	Etanol: 89	Etanol: 9.8
	Agua: 11	Agua: 1.8
	Benceno: 33.9	Benceno: 33.62
	Líquido saturado	
DESTILADO:	63.1 moles/hr	
REFLUJO:	5.47	
PRESION:	una atmósfera	

Los perfiles que se obtienen se muestran en las figuras 7.1.

La figura 7.1.a corresponde al caso de una destilación azeotrópica normal. En el caso "c", la concentración de benceno baja rápidamente y de ahí una gran cantidad de agua se encuentra en el fondo. La figura "b", es un resultado intermedio de las dos anteriores.

Para obtener cada una de estas soluciones se deben realizar diferentes estimados iniciales de temperaturas y flujos de líquido y vapor.



La solución "a", se obtiene con el siguiente estimado inicial:

- a).- El flujo de agua debe ser cero.
- b).- El flujo de benceno y etanol son constantes a través de la columna correspondiendo a la suma de sus alimentaciones.
- c).- Se requiere de un perfil lineal de temperaturas.

La solución "c", se obtiene con el siguiente estimado:

- a).- El flujo de benceno es cero.
- b).- El flujo de etanol y el de agua son constantes a lo largo del equipo.
- c).- Perfil lineal de temperaturas.

En el apéndice "C", se pretende explicar el por que de la existencia de varias soluciones para un sistema de ecuaciones no lineales y en caso específico para problemas de equilibrio líquido y vapor.

También existe una multiplicidad de soluciones para el sistema Etanol - pentano - agua, con las siguientes especificaciones:

NUMERO DE ETAPAS DE EQUILIBRIO: 19

ALIMENTACIONES

Localización	Etapa 4	Etapa 1
Flujos (mol)	Agua: 40.6	Agua: 8.9
	Etanol: 242.0	Etanol: 130.7
	Liq. Saturado	Pentano: 750.3

DESTILADO: 758.2 mol/hr

Presión 3.5 atm.

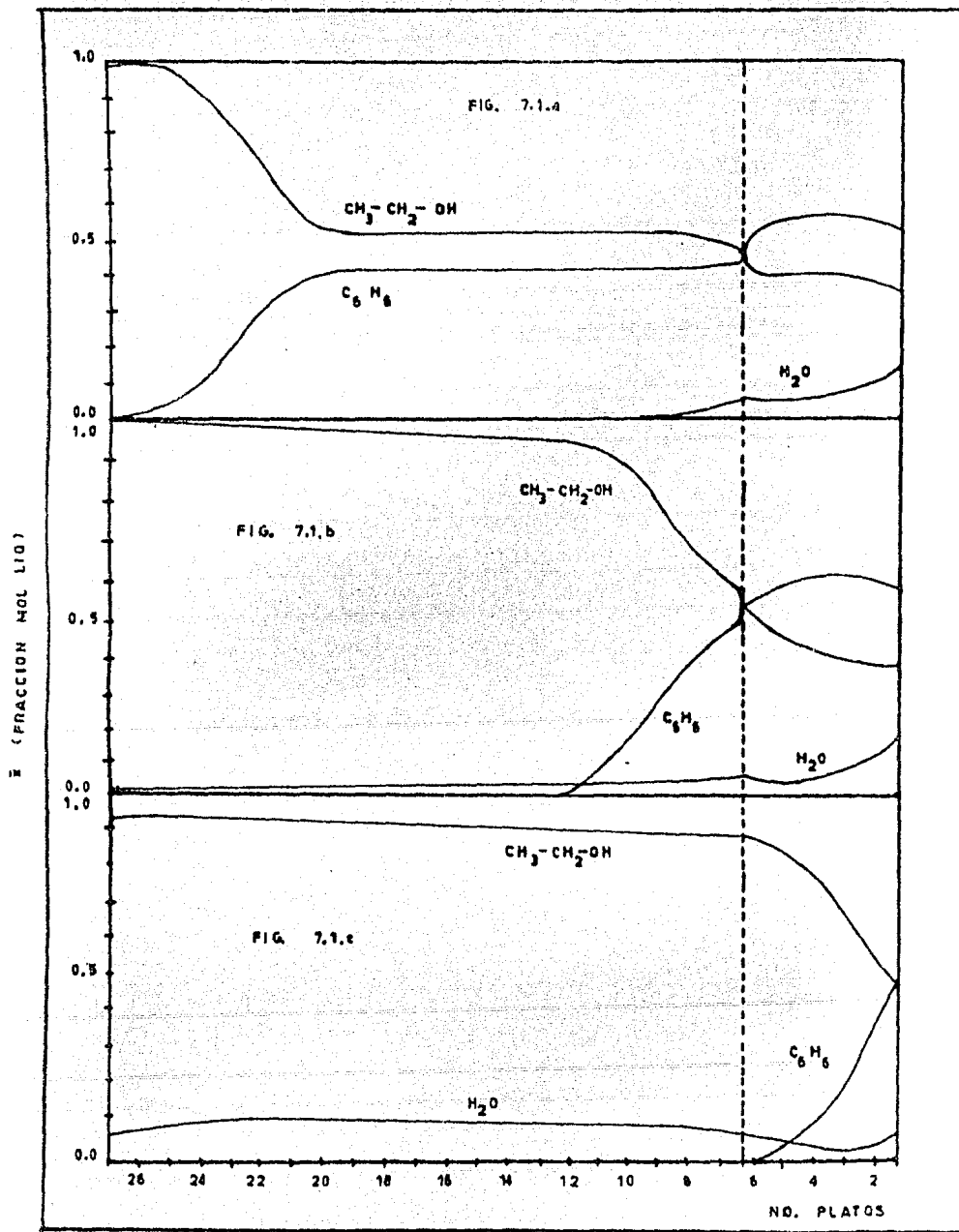


FIG. 7.1 PERFILES DE SOLUCION DEL PROBLEMA 7.11

*El erudito aspira a saber todas las respuestas. El sabio intenta comprender todas las preguntas. El hombre culto ni aspira ni intenta; so siega, vive, concilia. estos dos extremados esmeros.*

*ALFONSO RAMIREZ POZO*

" CONCLUSIONES "

Con los resultados obtenidos en el presente trabajo, se puede concluir que los Métodos Rigurosos de Solución Simultánea son capaces de resolver una gran variedad de problemas de separación de multicomponentes, donde coexistan una fase líquida y otra vapor, en cambio los Métodos de Corte (o descomposición), no son capaces de realizar lo anterior; por que tienen la desventaja de promover la propagación del error de redondeo.

Una dificultad que se presenta en la comparación de los métodos surge en el momento de evaluar el criterio de convergencia utilizado por cada uno de ellos; ya que se utiliza el criterio de Tomich, el de las funciones de discrepancia y también el criterio de la sumatoria de cuadrados de las diferencias de dos conjuntos sucesivos de temperaturas (llamado simplemente suma de cuadrados).

Se procuró correr los mismos problemas bajo el mismo criterio de convergencia y se puede demostrar que el último criterio mencionado es totalmente inadecuado para ser utilizado. El problema 7.1 se probó con el Método de Wang-Henke sin obtener una solución adecuada después de 30 iteraciones bajo un criterio de convergencia diferente al propuesto por los autores - (ver problema 7.2). Este mismo problema se resolvió con el Método de Naph-tali (problema 7.7), convergiendo en 68 iteraciones utilizando el criterio riguroso de funciones de discrepancia; obteniéndose un perfil de temperaturas diferente al reportado por Wang-Henke y Seader-Johanson.

Por lo anterior, se concluye que el Criterio de Suma de Cuadrados es inoperante; ya que si el método en un momento determinado no es capaz de crear un desplazamiento adecuado hacia la solución, el criterio de convergencia se verifica deteniendo consecuentemente la búsqueda; dando por tanto, resultados equívocos. Además se puede decir que el resultado reportado por Seader-Johanson para el problema 7.1 no da solución a éste.

Se propuso un método alternativo de solución al Método de Ishii-Otto, simplemente con el objeto de mostrar que un procedimiento de cálculo bien definido puede enfocarse de una manera diferente; tratanto de no efectuar la simplificación de igualar  $S_j$  con cero, incorporando a su vez nuevos algoritmos que faciliten su aplicabilidad como pueden ser el Método de Montalvo-Kaufmann y la inversión de matrices con la técnica LU, manejando también las ecuaciones en un momento determinado con el objeto de acelerar la convergencia.

Esta forma alternativa de cálculo es de aplicabilidad general a separaciones de líquido-vapor como lo es el método original.

Si se analizan las ecuaciones que presentan los balances de Masa y Energía; se observa que son relaciones no lineales; que al combinarse con las ecuaciones de equilibrio generan sistemas de mayor complejidad con un comportamiento no predecible.

Por lo anterior, es de esperarse que tengan varias soluciones, probablemente la presencia de una multiplicidad de soluciones se debe al cálculo de propiedades y a la constante de equilibrio ( $k$ ).

Fredenslund, Michelsen y Magnussen proponen que estas regiones pueden encontrarse debido a peculiaridades en los modelos de evaluación de las  $K^i$ , tanto en el Método de NRTL, como en el de UNIQUAC.

En este trabajo se establece que observando dichas ecuaciones se presentan las siguientes características:

- a).- Son funciones continuas y definidas en un intervalo cerrado (acotado por las especificaciones del problema).
- b).- Al evaluar estas funciones, sus elementos se encuentran siempre entre los límites de este mismo intervalo, garantizando con esto que la sucesión de puntos generada por el Método Iterativo está definida en estos mismos límites. (Ver postulados en el Apéndice "C").
- c).- En ciertas regiones se verifica el Criterio de Cauchy y la condición de Lipschitz. Implicando consecuentemente que la sucesión generada por el método llega siempre a un límite que es simplemente el vector solución.

Con las características anteriores se confirma que los Métodos Rigurosos en la simulación de equipos de separación líquido-vapor convergen a diferentes soluciones, algunas con significado físico, para un mismo problema; dependiendo en alto grado del estimado inicial de las variables de corte (temperatura y flujo de líquido y de vapor) y de la evaluación de las constantes de equilibrio.

*Con lo anterior, surge la problemática de interpretar y elegir las soluciones obtenidas; pudiendo eliminar con relativa facilidad aquellas que no tengan un verdadero significado físico.*

*El talento da forma a la inteligencia.*

**ALFONSO RAMIREZ POZO**



APENDICE "A"

En este apéndice se presentan los métodos más utilizados para la resolución de las ecuaciones que conforman la matriz tridiagonal  $M_j$  (algoritmo de Thomas y el de Boston y Sullivan), así como el método de Müller utilizado para resolver la función del punto de burbuja.

I).- Solución de sistemas de ecuaciones en forma de matriz tridiagonal, usando el Método de Thomas:

Se tienen las ecuaciones:

$$M_{ij} = L_{j-1} x_{ij-1} + V_{j+1} K_{ij+1} x_{ij+1} + F_j z_{ij} - (L_j + SL_j) x_{ij} - (V_j + SV_j) K_{ij} x_{ij} \quad (A.1)$$

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - SL_m - SV_m) - V_1 \quad (A.2)$$

sustituyendo (A.2) en (A.1) se obtiene:

$$M_{ij} = [V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - SL_m - SV_m) - V_1] x_{ij-1} + V_{j+1} K_{ij+1} x_{ij+1} + F_j z_{ij} - [V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - SL_m - SV_m) - V_1 + SL_j] x_{ij} - (V_j + SV_j) K_{ij} x_{ij} \quad (A.3)$$

ordenando:

$$\begin{aligned}
 & -(V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - SL_m - SV_m) - V_1 + SL_j + (V_j + SV_j) K_{ij}) x_{ij} \\
 & + (V_j + \sum_{m=1}^j (F_m - SL_m - SV_m) - V_1) x_{ij-1} + V_{j+1} K_{ij+1} x_{ij+1} = -F_j z_{ij}
 \end{aligned} \tag{A.4}$$

definiendo:

$$\begin{aligned}
 A_j &= V_j \sum_{m=1}^j (F_m - SL_m - SV_m) - V_1 \\
 B_j &= -V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - SL_m - SV_m) - V_1 + SL_j + (V_j + SV_j) K_{ij} \\
 C_j &= V_{j+1} K_{ij+1} \\
 D_j &= -F_j z_{ij}
 \end{aligned}$$

entonces se tiene que:

$$A_j x_{ij-1} + B_j x_{ij} + C_j x_{ij+1} = D_j \tag{A.5a}$$

por lo tanto, escribiendo las ecuaciones para toda la columna se ten  
drá:

$$\begin{aligned}
 B_1 x_{i1} + C_1 x_{i2} &= D_1 \\
 A_2 x_{i1} + B_2 x_{i2} + C_2 x_{i3} &= D_2 \\
 A_3 x_{i2} + B_3 x_{i3} + C_3 x_{i4} &= D_3 \\
 \vdots &\vdots \\
 A_j x_{ij-1} + B_j x_{ij} + C_j x_{ij+1} &= D_j \\
 \vdots &\vdots \\
 A_{N-1} x_{iN-2} + B_{N-1} x_{iN-1} + C_{N-1} x_{iN} &= D_{N-1} \\
 A_N x_{iN-1} + B_N x_{iN} &= D_N
 \end{aligned}$$

en forma matricial:

$$\left( \begin{array}{ccc|ccc}
 B_1 & C_1 & & x_{i1} & & D_1 \\
 A_2 & B_2 & C_2 & x_{i2} & & D_2 \\
 & A_3 & B_3 & C_3 & & D_3 \\
 & & \vdots & & & \vdots \\
 & & A_j & B_j & C_j & D_j \\
 & & & \vdots & & \vdots \\
 & & & A_{N-1} & B_{N-1} & C_{N-1} & D_{N-1} \\
 & & & & A_N & B_N & D_N
 \end{array} \right) = \quad (A.5b)$$

Nótese que se tendrán que resolver tantos sistemas como componentes existan en el caso de estudio.

Para ejemplificar la solución de un sistema tridiagonal escalar de este tipo, se hará a continuación la deducción del algoritmo de Thomas.

Se tiene:

$$B_1 x_{i1} + C_1 x_{i2} = D_1$$

resolviendo para  $x_{i1}$ :

$$x_{i1} = \frac{D_1 - C_1 x_{i2}}{B_1}$$

entonces:

$$x_{i1} = q_1 - p_1 x_{i2}$$

siendo:

$$q_1 = \frac{D_1}{B_1} \quad ; \quad p_1 = \frac{C_1}{B_1}$$

para la segunda etapa:

$$A_2 x_{i1} + B_2 x_{i2} + C_2 x_{i3} = D_2$$

sustituyendo el valor de  $x_{i1}$  :

$$A_2 (q_1 - p_1 x_{i2}) + B_2 x_{i2} + C_2 x_{i3} = D_2$$

$$A_2 q_1 + (B_2 - A_2 p_1) x_{i2} + C_2 x_{i3} = D_2$$

despejando  $x_{i2}$  :

$$x_{i2} = \frac{D_2 - A_2 q_1}{B_2 - A_2 p_1} - \frac{C_2}{B_2 - A_2 p_1} x_{i3}$$

definiendo:

$$q_2 = \frac{D_2 - A_2 q_1}{B_2 - A_2 p_1} \quad p_2 = \frac{C_2}{B_2 - A_2 p_1}$$

obteniéndose:

$$x_{i2} = q_2 - p_2 x_{i3}$$

y así sucesivamente, teniéndose en general:

$$x_{ij} = q_j - p_j x_{i,j+1} \quad \text{para } j=1, 2, \dots, N-1$$

$$x_{iN} = q_N \quad \text{para } j = N$$

donde:

$$q_j = \frac{D_j - A_j q_{j-1}}{B_j - A_j p_{j-1}} ; \quad p_j = \frac{C_j}{B_j - A_j p_{j-1}}$$

lo que se ha hecho es la transformación de la matriz tridiagonal en la forma siguiente:

$$\begin{array}{ccccccc} B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & x_{i1} & D_1 \end{array} \quad (A.6)$$

$$\begin{array}{ccccccc} A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 & x_{i2} & D_2 \end{array} \quad (A.7)$$

dividiendo (A.6), entre  $B_1$  se obtiene:

$$\begin{array}{ccccccc} 1 & C_1/B_1 & 0 & 0 & 0 & x_{i1} & D_1/B_1 \end{array}$$

o sea:

$$\begin{array}{ccccccc} 1 & p_1 & 0 & 0 & 0 & x_{i1} & q_1 \end{array}$$

multiplicando (A.8) por  $A_2$  se tiene:

$$\begin{array}{ccccccc} A_2 & A_2 p_1 & 0 & 0 & 0 & x_{i1} & A_2 q_1 \end{array} \quad (A.9)$$

restando (A.7) de (A.9), se obtiene:

$$0 \quad B_2 - A_2 p_1 \quad C_2 \quad 0 \quad 0 \quad x_{i2} \quad D_2 - A_2 q_1 \quad (A.10)$$

dividiendo (A.10), entre  $B_2 - A_2 p_1$ :

$$0 \quad 1 \quad \frac{C_2}{B_2 - A_2 p_1} \quad 0 \quad 0 \quad x_{i2} \quad \frac{D_2 - A_2 q_1}{B_2 - A_2 p_1}$$

o sea:

$$0 \quad 1 \quad p_2 \quad 0 \quad 0 \quad x_{i2} \quad q_2$$

se divide (A.9), entre  $A_2$  para obtener:

$$1 \quad p_1 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad x_{i1} \quad q_1$$

Resumiendo se han obtenido dos ecuaciones que son:

$$1 \quad p_1 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad x_{i1} \quad q_1$$

$$0 \quad 1 \quad p_2 \quad 0 \quad 0 \quad x_{i2} \quad q_2$$

trabajando de la misma forma en todo el sistema, la matriz originalmente tridiagonal se ha transformado en:

$$\begin{array}{c|ccc|c|c|c}
 1 & p_1 & & & x_{i1} & & q_1 \\
 & 1 & p_2 & & x_{i2} & & q_2 \\
 & & 1 & p_3 & x_{i3} & & q_3 \\
 & & & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 & & & 1 & p_j & & q_j \\
 & & & & \vdots & & \vdots \\
 & & & & 1 & p_{N-1} & q_{N-1} \\
 & & & & & 1 & q_N
 \end{array} = \quad (A.11)$$

se observa que:

$$x_{iN} = q_N$$

Haciendo sustituciones regresivas se llegará a la ecuación general:

$$x_{ij-1} = q_{j-1} - p_{j-1} x_{ij} = r_{j-1}$$

ya que:

$$x_{iN} = q_N - p_N x_{iN+1} = q_N = r_N$$

$$x_{iN-1} = q_{N-1} - p_{N-1} x_{iN} = q_{N-1} - p_{N-1} r_N = r_{N-1}$$

⋮

⋮

$$x_{i2} = q_2 - p_2 x_{i3} = q_2 - p_2 r_3 = r_2$$

$$x_{i1} = q_1 - p_1 x_{i2} = q_1 - p_1 r_2 = r_1$$



Transformando la ecuación (A.11), en la ecuación (A.12):

$$\begin{array}{c}
 \left| \begin{array}{cccccccc}
 1 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\
 0 & 1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\
 0 & 0 & 1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
 0 & 0 & \cdot & 0 & 1 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1 & \cdot & 0 \\
 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1
 \end{array} \right|
 \begin{array}{c}
 \left| \begin{array}{c}
 X_{i1} \\
 X_{i2} \\
 X_{i3} \\
 \cdot \\
 \cdot \\
 X_{ij} \\
 \cdot \\
 \cdot \\
 X_{iN-1} \\
 X_{iN}
 \end{array} \right|
 =
 \begin{array}{c}
 r_1 \\
 r_2 \\
 r_3 \\
 \cdot \\
 \cdot \\
 r_j \\
 \cdot \\
 \cdot \\
 r_{N-1} \\
 r_N
 \end{array}
 \end{array}
 \end{array}$$

y de esta forma se obtienen los valores de las composiciones mol de la fase líquida.

## II).-Algoritmo de Thomas para la solución de sistemas matriciales tridiagonales.

El algoritmo es similar al usado en un sistema escalar, pero conservando las reglas de Algebra Matricial (omitiendo el subíndice "i", por comodidad), sea:

$$\begin{array}{rcl}
 \bar{B}_1 \bar{X}_1 + \bar{C}_1 \bar{X}_2 & = & \bar{D}_1 \\
 \bar{A}_2 \bar{X}_1 + \bar{B}_2 \bar{X}_2 + \bar{C}_2 \bar{X}_3 & = & \bar{D}_2 \\
 \bar{A}_3 \bar{X}_2 + \bar{B}_3 \bar{X}_3 + \bar{C}_3 \bar{X}_4 & = & \bar{D}_3 \\
 \vdots & & \vdots \\
 \bar{A}_j \bar{X}_{j-1} + \bar{B}_j \bar{X}_j + \bar{C}_j \bar{X}_{j+1} & = & \bar{D}_j \\
 \vdots & & \vdots \\
 \bar{A}_{N-1} \bar{X}_{N-2} + \bar{B}_{N-1} \bar{X}_{N-1} + \bar{C}_{N-1} \bar{X}_N & = & \bar{D}_{N-1} \\
 \bar{A}_N \bar{X}_{N-1} + \bar{B}_N \bar{X}_N & = & \bar{D}_N
 \end{array}$$

Despejando  $\bar{X}_1$  de la primera ecuación:

$$\bar{X}_1 = \bar{B}_1^{-1} (\bar{D}_1 - \bar{C}_1 \bar{X}_2)$$

sustituyendo en la segunda ecuación:

$$\bar{A}_2 \bar{B}_1^{-1} (\bar{D}_1 - \bar{C}_1 \bar{X}_2) + \bar{B}_2 \bar{X}_2 + \bar{C}_2 \bar{X}_3 = \bar{D}_2$$

rearrreglando:

$$(\bar{B}_2 - \bar{A}_2 \bar{B}_1^{-1} \bar{C}_1) \bar{X}_2 + \bar{C}_2 \bar{X}_3 = \bar{D}_2 - \bar{A}_2 \bar{B}_1^{-1} \bar{D}_1$$

definiendo:

$$\alpha_2 = \bar{B}_2 - \bar{A}_2 \bar{B}_1^{-1} \bar{C}_1$$

$$\beta_2 = \bar{D}_2 - \bar{A}_2 \bar{B}_1^{-1} \bar{D}_1$$

se tendrá:

$$\alpha_2 \bar{X}_2 + \bar{C}_2 \bar{X}_3 = \beta_2$$

despejando  $\bar{X}_2$

$$\bar{X}_2 = \alpha_2^{-1} (\beta_2 - \bar{C}_2 \bar{X}_3)$$

sustituyendo en la tercera ecuación:

$$\bar{A}_3 (\alpha_2^{-1} (\beta_2 - \bar{C}_2 \bar{X}_3)) + \bar{B}_3 \bar{X}_3 + \bar{C}_3 \bar{X}_4 = \bar{D}_3$$

rearrreglando:

$$(\bar{B}_3 - \bar{A}_3 \alpha_2^{-1} \bar{C}_2) \bar{X}_3 + \bar{C}_3 \bar{X}_4 = \bar{D}_3 - \bar{A}_3 \alpha_2^{-1} \beta_2$$

definiendo:

$$\alpha_3 = \bar{B}_3 - \bar{A}_3 \alpha_2^{-1} \bar{C}_2$$

$$\beta_3 = \bar{D}_3 - \bar{A}_3 \alpha_2^{-1} \beta_2$$

y así sucesivamente, tomando la penúltima ecuación:

$$\bar{X}_{N-1} = \alpha_{N-1}^{-1} (\beta_{N-1} - \bar{C}_{N-1} \bar{X}_N)$$

sustituyendo en la última ecuación:

$$\bar{A}_N \left[ \alpha_{N-1}^{-1} (\beta_{N-1} - \bar{C}_{N-1} \bar{X}_N) \right] + \bar{B}_N \bar{X}_N = \bar{D}_N$$

rearrreglando:

$$(\bar{B}_N - \bar{A}_N \alpha_{N-1}^{-1} \bar{C}_{N-1}) \bar{X}_N = \bar{D}_N - \bar{A}_N \alpha_{N-1}^{-1} \beta_{N-1}$$

Definiendo:

$$\alpha_N = \bar{B}_N - \bar{A}_N \alpha_{N-1}^{-1} \bar{C}_{N-1}$$

$$\beta_N = \bar{D}_N - \bar{A}_N \alpha_{N-1}^{-1} \beta_{N-1}$$

$$\beta_N = \alpha_N \bar{X}_N$$

y despejando  $\bar{X}_N$ :

$$\bar{X}_N = \alpha_N^{-1} \beta_N$$

por lo tanto, el procedimiento se puede resumir como sigue:

1.- Calcular:

$$\alpha_1 = B_1$$

$$\beta_1 = D_1$$

2).- Calcular:

$$\alpha_j = E_j - A_j \alpha_{j-1}^{-1} C_{j-1}$$

$$B_j = D_j - A_j \alpha_{j-1}^{-1} B_{j-1} \quad \text{para } j=2, 3, \dots, N$$

3).- Calcular:

$$X_j = \alpha_j^{-1} (B_j - C_j X_{j+1}) \quad \text{para } j=N-1, N-2, \dots, 1$$

$$X_N = \alpha_N^{-1} B_N \quad \text{para } j=N$$

### III).- Método de Müller

El método de Müller se utiliza para encontrar todas las raíces reales o complejas de una función arbitraria y como caso específico de estudio la función del punto de turbuja.

$$S_j = \sum_{i=1}^j K_{ij} x_{ij} - 1 \quad \text{para } j=1, 2, \dots, N$$

donde:

$$K_{ij} = f(T_j)$$

Este algoritmo no es más que una extensión del Método de la Secante. Se fijan tres puntos y se traza una ecuación cuadrática (parábola), sobre la curva de la función a la que se desea encontrar una de sus raíces (en este caso particular la función  $S_j$ ) (ver fig.A.1).

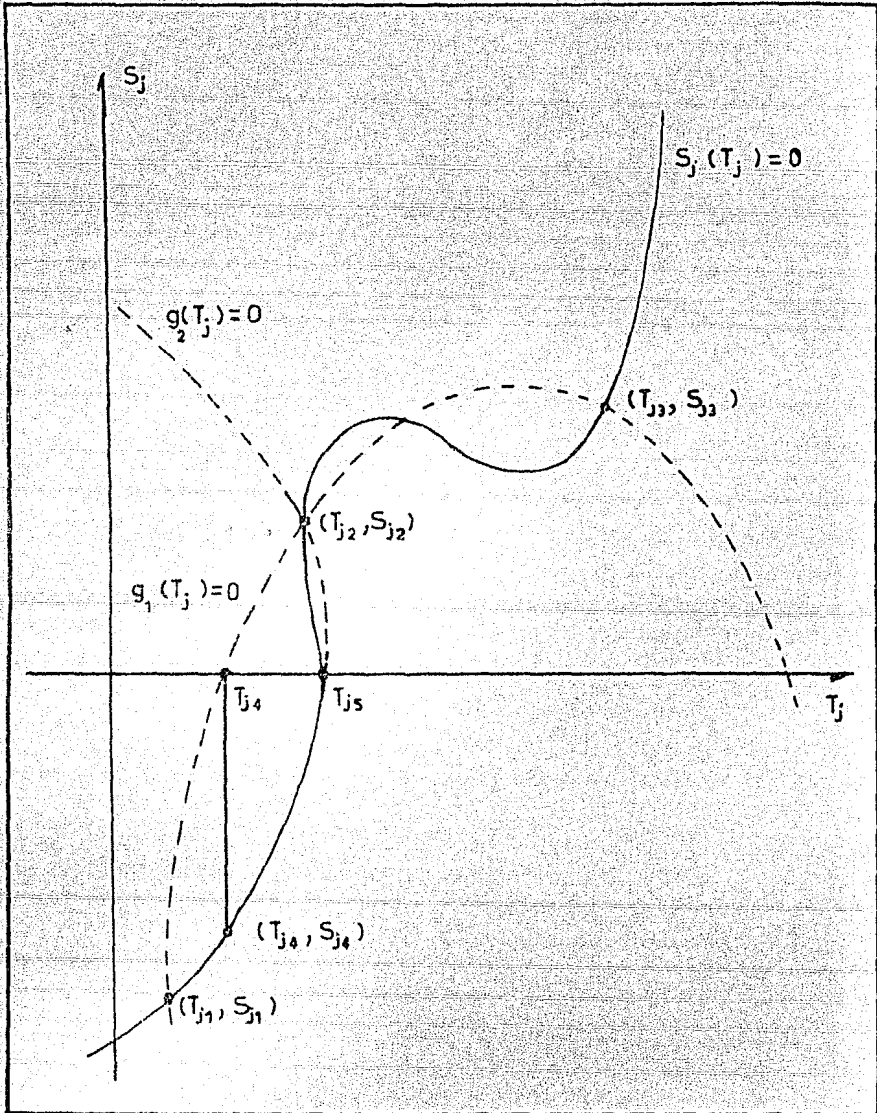


FIG. A.1 METODO DE MÜLLER

Entonces la raíz de esta parábola servirá como una primera aproximación de la raíz de  $S_j$  ( $T_j$ ) = 0, evaluando posteriormente esta función; si el valor de la raíz es el buscado el proceso finaliza. Si no lo es se realiza una nueva iteración acotando la función.

A continuación se presenta el Método en forma detallada:

- 1).- Sean  $x_k, x_{k-1}, x_{k-2}$  tres aproximaciones al cero de la función  $f(x)$  y además sea  $k=3$ :

Calcular  $f_k, f_{k-1}, f_{k-2}$

- 2).- Calcular la diferencia o paso:

$$h_k = x_k - x_{k-1}$$

- 3).- Calcular el incremento o delta:

$$d_k = \frac{h_k}{x_{k-1} - x_{k-2}}$$

y:

$$d_{k+1} = \frac{-2 f_{k-1} (1 + d_{k-1})}{b \pm \sqrt{b^2 - 4 f_{k-1} d_{k-1} (1 + d_{k-1})} c}$$

donde:

$$b = (f_{k-3}) (d_{k-1})^2 - (f_{k-2}) (1 + d_{k-1})^2 + (f_{k-1}) (1 + 2d_{k-1})$$

$$c = f_{k-3} d_{k-1} - f_{k-2} (1 + d_{k-1}) + f_{k-1}$$

4).- Calcular:

$$x_{k+1} = x_k + h_k d_{k+1} \quad y \quad f_{k+1}$$

5).- Calcular los criterios I y II:

$$k = k + 1$$

$$I).- f_k < \epsilon_2$$

$$II).- \frac{|x_k - x_{k-1}|}{x_k} < \epsilon_1$$

si II) es mayor que  $\epsilon_1$  entonces calcular:

$$a' = x_k - x_{k-3}$$

$$b' = x_k - x_{k-1}$$

$$c' = x_k - x_{k-2}$$

si  $c' > b'$  y  $a' < c'$  entonces  $x_{k-2} = x_{k-3}$

si  $c' < b'$  y  $a' < b'$  entonces  $x_{k-1} = x_{k-3}$

repetir desde el punto dos hasta el punto cinco hasta satisfacer alguno de los dos criterios especificados.



IV).- Método de Boston y Sullivan (Thomas modificado).

La ecuación (A.1), se puede escribir de la forma:

$$M_{ij} = l_{ij-1} + v_{ij+1} + f_{ij} - (L_j + SL_j) \frac{l_{ij}}{L_j} - (V_j + SV_j) \frac{v_{ij}}{V_j}$$

o bien:

$$M_{ij} = l_{ij-1} + v_{ij+1} + f_{ij} - (1 + SL_j/L_j) l_{ij} - (1 + SV_j/V_j) v_{ij}$$

siendo por definición:

$$v_{ij} = V_j y_{ij}$$

sustituyendo la relación de equilibrio se obtiene:

$$M_{ij} = l_{ij-1} + V_{j+1} K_{ij+1} x_{ij+1} + f_{ij} - (1 - SL_j/L_j) l_{ij} - (1 + SV_j/V_j) V_j K_{ij} x_{ij}$$

sustituyendo  $x_{ij} = l_{ij} / L_j$

$$M_{ij} = l_{ij-1} + v_{j+1} k_{ij+1} \frac{l_{ij+1}}{L_{j+1}} + f_{ij} - \left(1 - \frac{SV_j}{V_j}\right) v_j K_{ij} \frac{l_{ij}}{L_j} - \left(1 - \frac{SL_j}{L_j}\right) l_j$$

agrupando términos:

$$M_{ij} = l_{ij-1} - \left(1 + \frac{SV_j}{L_j} + \left(1 + \frac{SV_j}{V_j}\right) \left(\frac{V_j}{L_j}\right) K_{ij}\right) l_{ij} + \left(\frac{V_{j+1}}{L_{j+1}}\right) K_{ij+1} l_{ij+1} + f_{ij} \quad (A.14)$$

se define:

$$Q_{L_j} = \frac{SL_j}{L_j} \quad ; \quad Q_{V_j} = \frac{SV_j}{V_j} \quad ; \quad S_j = \left(\frac{V_j}{L_j}\right) K_{ij}$$

$$R_{L_j} = 1 + Q_{L_j} \quad ; \quad R_{V_j} = 1 + Q_{V_j}$$

obteniéndose:

$$M_{ij} = l_{ij-1} - l_{ij} \left(1 + Q_{L_j} + \left(1 + Q_{V_j}\right) S_j\right) + S_{j+1} l_{ij+1} + f_{ij}$$

o bien:

$$f_{ij} = -l_{ij-1} + l_{ij} (R_{L_j} + R_{V_j} S_j) - S_{j+1} l_{ij+1}$$

se define ahora:

$$b_j = R_{L_j} + R_{V_j} S_j$$

$$c_j = S_{j+1}$$

y finalmente se tiene:

$$f_{ji} = -l_{ij-1} + b_j l_{ij} - c_j l_{ij+1} \quad (A.15)$$

Aplicando la técnica de Thomas se obtiene un sistema como el siguiente:

$$\begin{array}{cccc|c|c} b_1 & -c_1 & & & l_{i1} & f_{i1} \\ -1 & b_2 & -c_2 & & l_{i2} & f_{i2} \\ & -1 & b_3 & -c_3 & l_{i3} & f_{i3} \\ & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & -1 & b_j & -c_j & l_{ij} & f_{ij} \\ & & & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & -1 & b_{N-1} & -c_{N-1} & l_{iN-1} & f_{iN-1} \\ & & & & -1 & b_N & l_{iN} & f_{iN} \end{array}$$

aplicando el procedimiento de sustituciones progresivas la matriz se transforma en:

$$\begin{array}{cccc|ccc}
 & 1 & -g_1 & & l_{i1} & & z_1 \\
 & & 1 & -g_2 & l_{i2} & & z_2 \\
 & & & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 & & & 1 & -g_j & l_{ij} & = & z_j \\
 & & & & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 & & & & 1 & -g_{N-1} & l_{iN-1} & z_{N-1} \\
 & & & & & 1 & l_{iN} & z_N
 \end{array}$$

(A.17)

siendo las ecuaciones generales:

$$g_j = \frac{c_j}{b_j - g_{j-1}} \quad z_j = \frac{f_j + z_{j+1}}{b_j - g_{j-1}} \quad (\text{A.18 a})$$

(A.18 b)

se hacen sustituciones regresivas obteniéndose:

$$l_{iN} = z_N$$

$$z_{N-1} = l_{iN-1} - g_{N-1} l_{iN}$$

$$z_{N-1} = l_{iN-1} - g_{N-1} z_N$$

$$l_{iN-1} = z_{N-1} + g_{N-1} z_N$$

en general:

$$l_{ij} = z_j + g_j z_{j+1} \quad (A.19)$$

Hasta el momento el algoritmo de Thomas no ha sufrido modificación alguna, pero Boston y Sullivan desarrollaron un nuevo algoritmo basándose en el anterior, con el objeto de evitar la propagación del error de redondeo que se tiene en el denominador de las ecuaciones (A.18).

Las modificaciones realizadas son:

$$g_j = c_j / (b_j - g_{j-1}) = c_j / b'_j$$

siendo:

$$b'_j = b_j - g_{j-1} \quad (A.20)$$

$$g_{j-1} = \frac{c_{j-1}}{b'_{j-1}} \quad (A.21)$$

sustituyendo (A.21), en (A.20) se obtiene:

$$b'_j = b_j - \frac{c_{j-1}}{b'_{j-1}}$$

se tiene:

$$b_j = R_{Lj} + R_{Vj} \quad S_j$$

y:

$$c_{j-1} = S_j$$

entonces:

$$b'_j = R_{L_j} + R_{v_j} S_j - S_j/b'_{j-1} \quad (\text{A.22})$$

siendo:

$$R_{v_j} + (-Q_{v_j}) = 1 \quad (\text{A.23})$$

teniendo:

$$b'_j = 1 + Q_{L_j} + S_j + S_j Q_{v_j} - S_j/b'_{j-1}$$

factorizando a  $S_j/b'_{j-1}$  se obtiene:

$$b'_j = 1 + Q_{L_j} + (S_j/b'_{j-1}) (b'_{j-1} + Q_{v_j} b'_{j-1} - 1) \quad (\text{A.24})$$

sustituyendo (A.23) en (A.24) dá lugar a:

$$b'_j = 1 + Q_{L_j} + (S_j/b'_{j-1}) (b'_{j-1} (1 + Q_{v_j}) - R_{v_j} + Q_{v_j})$$

o bien:

$$b_j = 1 + Q_{L_j} + (S_j/b'_{j-1}) (b'_{j-1} R_{v_j} - R_{v_j} + Q_{v_j})$$

partiendo de  $R_{v_j}$ :

$$b'_j = 1 + (S_j/b'_{j-1}) (R_{v_j} (b'_{j-1} - 1) + Q_{v_j}) + Q_{L_j}$$

se define:

$$b''_j = b'_j - 1$$

entonces:

$$b'_j = 1 + (S_j/b'_{j-1}) (R_{v_j} b''_{j-1} + Q_{v_j}) + Q_{L_j}$$

definiendo:

$$b''_j = (S_j/b'_{j-1}) (R_{v_j} b''_{j-1} + Q_{v_j}) + Q_{L_j}$$

para  $j = 2, 3, \dots, N$

finalmente se tiene:

$$b'_j = b''_j + 1 \quad \text{para } j = 2, 3, \dots, N \quad (A.25)$$

$$b''_1 = S_1 + Q_{L_1}$$

$$b'_1 = 1 + b''_1 = 1 + S_1 + Q_{L_1}$$

y la ecuación (A.25) es la que se utiliza en las ecuaciones (A.18)

En el algoritmo de Thomas la única fuente de error de redondeo excesivo se encuentra en el siguiente paso:

$$b'_n = b_n - c'_{n-1} \quad (\text{A.26})$$

Ya que se trata de una substracción de dos cantidades que siempre son positivas.

Sustituyendo:

$$b_1 = R_{l_1} + S_1$$

$$b_n = R_{l_n} + R_{v_n} S_n$$

$$b_N = 1 + R_{v_N} S_N$$

$$c_n = S_{n+1}$$

en:

$$c'_{n-1} = c_{n-1}/b'_{n-1}$$

$$b'_n = b_n - c'_{n-1} \quad (\text{A.27})$$

y suponiendo por conveniencia que no existen salidas laterales, a excepción de una de vapor en el domo y de una líquida en el fondo.

Se tiene:

$$b'_1 = 1 + S_1$$

$$b'_n = b_n - c'_{n-1} = b_n - \frac{c_{n-1}}{b'_{n-1}}$$



Sustituyendo los valores de  $b_n$  y  $c_{n-1}$

$$b'_n = 1 + S_n - \frac{S_n}{b'_{n-1}}$$

sea  $n = 2$

$$\begin{aligned} b'_2 &= 1 + S_2 - \frac{S_2}{b'_1} = 1 + S_2 - \frac{S_2}{(1 + S_1)} \\ &= \frac{(1 + S_1) + (S_2) \cdot (1 + S_1) - S_2}{1 + S_1} = \frac{(1 + S_1) + S_1 S_2}{(1 + S_1)} \end{aligned}$$

sea  $n = 3$

$$\begin{aligned} b'_3 &= 1 + S_3 - \frac{S_3}{b'_2} = 1 + S_3 - \frac{S_3 (1 + S_1)}{(1 + S_1) + S_1 S_2} \\ &= \frac{(1 + S_3) [(1 + S_1) + S_1 S_2] - S_3 (1 + S_1)}{(1 + S_1) + S_1 S_2} \\ &= \frac{1 + S_1 + S_1 S_2 + S_1 S_2 S_3}{(1 + S_1) + S_1 S_2} \end{aligned}$$

Generalizando:

$$b'_1 = 1 + S_1$$

$$b'_n = \frac{1 + S_1 + S_1 S_2 + \dots + S_1 S_2 \dots S_n}{1 + S_1 + S_1 S_2 + \dots + S_1 S_2 \dots S_{n-1}}$$

dado que por definición  $S_n > 0$ , para toda  $n$ , por tanto  $b'_n > 0$  para toda  $n$ ., de aquí se deduce que para el cálculo de  $b'_n$  en la ecuación (A.27), se requerirá la substracción de una cantidad positiva  $c'_{n-1}$  de una cantidad mayor  $b_n$ . Dado que cualquier operación aritmética diferente de la substracción no provee errores acumulados de gran importancia, parece ser razonable esperar que la ecuación (A.26), sea una fuente potencial de error excesivo.

En el artículo de Boston y Sullivan se realiza un análisis detallado de la propagación del error en ambos métodos; siendo la siguiente deducción necesaria para encontrar las fórmulas recursivas que describen la propagación de errores relativos.

Para expresar la propagación de errores en una secuencia de una o más operaciones aritméticas, se emplean series de Taylor de primer orden. Por ejemplo, para la suma de dos cantidades  $A$  y  $B$ , la fórmula que proporciona el error total en dicha operación es:

$$\delta(A+B) = \frac{\partial(A+B)}{\partial A} \delta A + \frac{\partial(A+B)}{\partial B} \delta B + (A+B) \epsilon$$

donde  $\delta z$  es el error en la cantidad  $z$  y  $\epsilon$  es el error de redondeo cometido durante la operación.

Definiendo a  $\alpha_z$  como el error relativo en  $z$ .

$$\alpha_z = \delta z / z$$

Y utilizándola para encontrar la fórmula de propagación del error para las cuatro operaciones básicas se tiene:

$$\begin{aligned}
 I).- \quad \delta(A+B) &= \frac{\partial(A+B)}{\partial A} \delta A + \frac{\partial(A+B)}{\partial B} \delta B + (A+B) \epsilon \\
 &= \delta A + \delta B + (A+B) \epsilon \qquad (A.28)
 \end{aligned}$$

Sea:

$$\alpha_A = \delta A / A$$

$$\delta A = (A) \alpha_A \qquad (A.29)$$

$$\delta B = (B) \alpha_B \qquad (A.30)$$

Sustituyendo (A.29) y (A.30), en (A.28) se obtiene:

$$\delta(A+B) = A \alpha_A + B \alpha_B + (A+B) \epsilon \qquad (A.31)$$

además:

$$\delta(A+B) = (A+B) \alpha_{(A+B)} \qquad (A.32)$$

sustituyendo (A.32) en (A.31) se tiene:

$$\alpha_{(A+B)} = \frac{A}{(A+B)} \alpha_A + \frac{B}{(A+B)} \alpha_B + \epsilon \qquad (A.33)$$

y para las demás operaciones:

$$II).- \quad \alpha(A - B) = \frac{A}{A - B} \alpha A - \frac{B}{A - B} \alpha B + \epsilon$$

$$III).- \quad \alpha(AB) = \alpha A + \alpha B + \epsilon$$

$$IV).- \quad \alpha(A/B) = \alpha A - \alpha B + \epsilon$$

aplicando estas fórmulas a:

$$b'_1 = 1 + S_1$$

$$b'_n = 1 + S_n - S_n / b'_{n-1}$$

se obtienen las fórmulas recursivas que describen la propagación de errores en el algoritmo de Thomas; siendo éstas:

$$\alpha b'_1 = \epsilon_{a_1}$$

$$\alpha b'_n = \frac{1 + S_n}{b'_n} \epsilon_{an} - \frac{S_n / b'_{n-1}}{b'_n} (-\alpha b'_{n-1} + \epsilon_{dn})$$

$$+ \epsilon_{sn}$$

donde:

$\epsilon_{a_1}$  = error de redondeo relativa de adición.

$\epsilon_{sn}$  = error de redondeo relativo de sustracción.

$\epsilon_{dn}$  = error de redondeo relativo de división.

De manera similar con el algoritmo de Boston y Sullivan las fórmulas recursivas de la propagación de errores son:

$$\alpha b_1 = \epsilon_{a1}$$

$$\alpha b''_1 = 0$$

$$\alpha b''_n = \frac{1}{1 + b''_{n-1}} b''_{n-1} + \epsilon_{an-1} + \epsilon_{mn} + \epsilon_{dn}$$

$$\alpha b'_n = \frac{b''_n}{1 + b''_n} b''_n + \epsilon_{an}$$

donde:

$\epsilon_{mn}$  = error de redondeo de multiplicación.

$\epsilon_{dn}$  = error de redondeo de división.

$\epsilon_{an}$  = error de redondeo de adición.

V).- Dedución de la ecuación (4.8)

Se tiene que:

$$V_j = L_{j-1} - L_j + F_j - U_j - W_j + V_{j+1} \quad (A.34)$$

$$V_{j+1} = L_j - L_{j+1} + F_{j+1} - U_{j+1} - W_{j+1} + V_{j+2} \quad (A.35)$$

$$V_{j+2} = L_{j+1} - L_{j+2} + F_{j+2} - U_{j+2} - W_{j+2} + V_{j+3} \quad (A.36)$$

$$V_{j+3} = L_{j+2} - L_{j+3} + F_{j+3} - U_{j+3} - W_{j+3} + V_{j+4} \quad (\text{A.37})$$

Suponiendo que  $V_{j+4} = V_N$  se tiene:

$$V_N = L_{N-1} - L_N + F_N - U_N - W_N \quad (\text{A.38})$$

Sustituyendo (A.35) en (A.34):

$$\begin{aligned} V_j &= L_{j-1} + F_j - U_j - W_j - L_{j+1} + F_{j+1} - U_{j+1} - W_{j+1} \\ &\quad + V_{j+2} - L_j + L_j \end{aligned}$$

ordenando:

$$V_j = L_{j-1} - L_{j+1} + F_j + F_{j+1} - U_j - V_{j+1} - W_{j+1} + V_{j+2} \quad (\text{A.39})$$

sustituyendo (A.36) en (A.39):

$$\begin{aligned} V_j &= L_{j-1} - L_{j+1} + F_j + F_{j+1} - U_j - V_{j+1} - W_j - W_{j+1} \\ &\quad + L_{j+1} - L_{j+2} + F_{j+2} - U_{j+2} - W_{j+2} + V_{j+3} \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

δ:

$$V_j = L_{j-1} - L_{j+2} + \sum_{m=j}^{j+2} (F_m - U_m - W_m) + V_{j+3}$$

Sustituyendo (A.37) en (A.40):

$$V_j = L_{j-1} - L_{j+2} + \sum_{m=j}^{j+3} (F_m - U_m - W_m) + L_{j+2} - L_{j+3} \\ + V_{j+4}$$

5:

$$V_j = L_{j-1} - L_{j+3} + \sum_{m=j}^{j+3} (F_m - U_m - W_m) + V_{j+4} \quad (A.41)$$

Suponiendo que  $V_{j+4} = V_N$ , la ecuación (A.41) queda:

$$V_j = L_{j-1} - L_{N-1} + \sum_{m=j}^{N-1} (F_m - U_m - W_m)$$

Sustituyendo (A.38) en la ecuación anterior se obtiene:

$$V_j = L_{j-1} - L_{N-1} + \sum_{m=j}^{N-1} (F_m - U_m - W_m) + L_{N-1} \\ - L_{N-1} - L_N + F_N - U_N - W_N$$

Simplificando se obtiene la ecuación (4.6):

$$V_j = L_{j-1} - L_N + \sum_{m=j}^N (F_m - U_m - W_m)$$

VI).-Deducción de la fórmula 5.2:

$$-M_j = \Delta L_{j-1} + \Delta V_{j+1} - \Delta L_j - \Delta V_j \quad (\text{A.42})$$

despejando  $\Delta L_j$ :

$$\Delta L_j = \Delta L_{j-1} + \Delta V_{j+1} - \Delta V_j + M_j \quad (\text{A.43})$$

se tiene para  $\Delta L_{j-1}$ ,  $\Delta L_{j-2}$  y  $\Delta L_{j-3}$ :

$$\Delta L_{j-1} = \Delta L_{j-2} + \Delta V_j - \Delta V_{j-1} + M_{j-1} \quad (\text{A.44})$$

$$\Delta L_{j-2} = \Delta L_{j-3} + \Delta V_{j+1} - \Delta V_{j-2} + M_{j-2} \quad (\text{A.45})$$

$$\Delta L_{j-3} = \Delta L_{j-4} + \Delta V_{j+2} - \Delta V_{j-3} + M_{j-3} \quad (\text{A.46})$$

suponiendo que  $\Delta L_{j-4} = \Delta L_1$  se tiene:

$$\Delta L_1 = \Delta V_2 - \Delta V_1 + M_1 \quad (\text{A.47})$$

sustituyendo (A.44) en (A.43):

$$\Delta L_j = \Delta L_{j-2} + \Delta V_j - \Delta V_{j-1} + M_{j-1} + \Delta V_{j+1} - \Delta V_j + M_j$$

$$\Delta L_j = \Delta L_{j-2} - \Delta V_{j-1} + \Delta V_{j+1} + M_j + M_{j-1} \quad (\text{A.48})$$



sustituyendo (A.45) en (A.48):

$$\Delta L_j = \Delta L_{j-3} + \Delta V_{j-1} - \Delta V_{j-2} + M_{j-2} - \Delta V_{j-1} \\ + \Delta V_{j+1} + M_j + M_{j-1}$$

$$\Delta L_j = \Delta L_{j-3} - \Delta V_{j-2} + \Delta V_{j+1} + M_j + M_{j-1} + M_{j-2} \quad (A.49)$$

sustituyendo (A.46) en (A.49):

$$\Delta L_j = \Delta L_{j-4} + \Delta V_{j-2} - \Delta V_{j-3} + M_{j-3} + \Delta V_{j-2} + \Delta V_{j+1} \\ + M_j + M_{j-1} + M_{j-2}$$

$$\Delta L_j = \Delta L_{j-4} - \Delta V_{j-3} + \Delta V_{j+1} + \sum_{k=j-3}^j M_k \quad (A.50)$$

suponiendo que  $\Delta L_{j-4}$  es  $\Delta L_1$ , la ecuación (A.50), queda como:

$$\Delta L_j = \Delta L_1 - \Delta V_2 + \Delta V_{j+1} + \sum_{k=2}^j M_k$$

sustituyendo (A.47) en (A.52):

$$\Delta L_j = \Delta V_2 - \Delta V_1 + M_1 - \Delta V_2 + \Delta V_{j+1} + \sum_{k=2}^j M_k$$

obteniendo la ecuación 5.2:

$$\Delta L_j = \Delta V_{j+1} - \Delta V_1 + \sum_{k=1}^j M_k$$

$$j=1, \dots, N-1$$

$$\Delta L_N = \sum_{k=1}^N M_k - \Delta V_1$$

APENDICE "B"

En este *ápndice* se presentan los manuales de usuarios de los diferentes programas de simulación utilizados; así como sus archivos de datos correspondientes; siendo éstos:

- *Métodos de Corte o de descomposición:*
  - *Método del punto de burbuja (Wang-Henke).*
  - *Método de Suma de Flujos (Birmingham-Otto).*
  
- *Métodos de solución simultánea:*
  - *Método de Ishii-Otto*  
*(original y método alternativo).*
  - *Método de linealización de Naphtali-Sandholm*  
*con las sugerencias realizadas por Aage Fred*  
*enslund, Jurgen Gmehling et all.*
  - *Método de Linealización de Naphtali-Sandholm*  
*(método original).*

I).- MODELO DEL "PUNTO DE BURBUJA"

A continuación se muestra el manual de usuario del sistema del Punto de burbuja que tiene la finalidad de simular equipos de destilación; utilizando para ello el procedimiento de cálculo propuesto por Wang y Henke.

Este sistema se encuentra desarrollado en Fortran IV (versión 3.1), en una computadora Burroughs Modelo B-7800.

A).- INSTRUCCIONES PARA EL USO DEL SISTEMA

El usuario debe proporcionar la siguiente información:

- a).- Número de especies químicas a separar.
- b).- Presión de la columna.
- c).- Rango de validez para las propiedades físicas.
- d).- Coeficientes de las ecuaciones polinomiales que predicen los valores de entalpías y constantes de equilibrio.
- e).- Configuración del equipo:
  - Número de etapas de equilibrio.
  - Número de alimentaciones.
  - Número de salidas laterales en ambas fases.
  - Número de etapas en donde existe un intercambiador de calor.
- f).- Alimentaciones:
  - Etapa.
  - Flujo molar.
  - Fase.
  - Temperatura.
  - Composiciones mol de alimentación para cada componente.
- g).- Salidas laterales (si existen):
  - Etapa.
  - Fase.
  - Flujo.
- h).- Intercambiadores de calor (si existen):
  - Etapa y flujo de calor que se transmite.

El sistema utiliza el algoritmo de Thomas o el de Boston-Sullivan para

resolver la matriz tridiagonal creada para la obtención de las fracciones en la fase líquida. Tiene así mismo la posibilidad de escoger el método deseado para resolver la ecuación del punto de burbuja; ya sea por medio de derivadas o por el método de Müller.

Finalmente el sistema otorga la opción de escoger el criterio de convergencia, ya sea suma de cuadrados residuales:

$$\gamma = \sum_{j=1}^N (T_j^{k+1} - T_j^k)^2$$

" k= No. de la iteración.

el propuesto por Tomich:

$$\epsilon = \sum_{j=1}^N \left[ \left( \sum_{i=1}^c y_{ij} - 1 \right)^2 + \frac{F_j H_{Fj} + Q_j + L_{j-1} h_{j-1} + V_{j+1} H_{V_{j+1}}}{F_j H_{Fj} + Q_j + L_{j-1} h_{j-1}} \right. \\ \left. \dots - \frac{(L_j + SL_j) h_j - (V_j + SV_j) H_{V_j}}{V_{j+1} H_{V_{j+1}}} \right]^2$$

#### 1.- CARGA DE DATOS PARA EL METODO DEL PUNTO DE BURBUJA

Los datos se introducen de la siguiente forma:

1o.- Perforar una tarjeta con la siguiente información, formato (I10, 3F10.2, 3I17,I2):

a).- Número total de especies químicas (min=2, max=20)

a separar.

- b).- Temperatura mínima válida para la evaluación de propiedades (°F)
- c).- Temperatura máxima válida para la evaluación de propiedades. (°F)
- d).- Perfil inicial de presión (psia).
- e).- Número máximo de iteraciones permitidas para la columna (valor de omisión = 15). (max = 99)
- f).- Método de resolución para la matriz tridiagonal:
- 1 = Método de Thomas
  - 2 = Método de Boston - Sullivan
- g).- Método de resolución de la ecuación del punto de burbuja:
- 1 = Método de Müller
  - 2 = Derivadas
- h).- Criterio de convergencia a seleccionar:
- 0 = Suma de cuadrados residuales.
  - 1 = Criterio de Tomich
- (valor de omisión = 0)

20.- Perforar una tarjeta por cada componente, indicando su nombre (máximo doce caracteres).

30.- Perforar una tarjeta por cada componente, proporcionando los coeficientes del polinomio cúbico para evaluar las constantes de equilibrio. ( $a_i$ ;  $i = 1,4$ ), tal que:

$$K_{i,j} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 \quad (a_i = \text{adimensional})$$

( T en °F )

Con formato (3E15.5)

- 40.- Perforar una tarjeta por cada componente, indicando los coeficientes del polinomio cuadrático para calcular las entalpías en la fase vapor ( $b_i$ ;  $i=1,3$ ), tal que:

$$H_D = b_1 + b_2 T + b_3 T^2 \quad (\text{adimensionales})$$

( T en °F )

con formato (3E15.5)

- 50.- Realizar el mismo procedimiento que se efectuó para la 4a. tarjeta, pero evaluando la entalpía en la fase líquida.

- 60.- Perforar una tarjeta conteniendo los siguientes datos; con formato (7I10):

- a).- Número del problema a resolver.
- b).- Número de etapas de equilibrio (min=3, max=100)
- c).- Número de alimentaciones. ( max = 100)
- d).- Número existente de salidas laterales de vapor (sin tomar cuenta en cuenta las etapas 1 y/o N).
- e).- Exactamente lo mismo que el inciso anterior, pero para las salidas laterales de líquido.
- f).- Número de etapas en donde existen intercambiadores de calor (excepto las 1 y/o N). ( max = 35 )

70.- Perforar una tarjeta con formato (2F10.2), indicando:

- a).- Temperatura del fondo de la Torre ( °F)  
 b).- Temperatura del domo de la torre ( °F)

80.- Perforar dos tarjetas por cada alimentación existente:

PRIMERA TARJETA formato ( 2I10, 2F10.2)

- a).- Número de la etapa de alimentación.  
 b).- Fase de alimentación (1=vapor, 2=líquido).  
 c).- Temperatura de alimentación. ( °F)  
 d).- Flujo. (LBMOL/HR)

SEGUNDA TARJETA formato ( 5F10.5)

Fracciones mol de alimentación para cada componente. Utilizar una tarjeta por cada cinco componentes.

90.- Perforar una tarjeta por cada salida lateral de vapor (si existen), con la siguiente información:

- a).- Etapa.  
 b).- Flujo (LBMOL/HR)  
 con formato (I10, F10.2).

100.- Realizar el mismo procedimiento que en la tarjeta 9, pero en esta ocasión para las salidas laterales de líquido.

110.- Con formato ( I10, F15.5), perforar una tarjeta por cada etapa en donde exista un intercambiador de calor; indicando:

- a).- Etapa en donde se encuentra dicho cambiador.  
 b).- Flujo de calor (con signo positivo, si proviene de la etapa y con signo negativo si va a ésta). (BTU/HR)



120.- Perforar una tarjeta indicando el número del componente (en el orden introducido en la segunda tarjeta), cuyas composiciones en ambas fases se deseen graficar. Siendo forzosamente tres componentes a graficar. Formato (3I10).

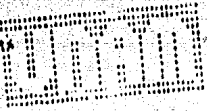
Nota: Si sólo se desean dos componentes; repetir entonces uno de ellos hasta completar los tres.

INDICACION:

Si el usuario desea efectuar la resolución de un nuevo problema utilizando para ello los mismos componentes y los mismos rangos de validez para la evaluación de propiedades; sólo tendrá que perforar de la tarjeta número seis en adelante y agregar éstas al final de las tarjetas del problema anterior y así sucesivamente con los problemas que desee resolver.

En la tabla B.1 se encuentra el archivo de datos utilizando en la resolución del Problema 7.1.

7:12 PM MONDAY, SEPTEMBER 17, 1944



ETR/T:515/DATOC: (S/17/34)

STATION	TIME	WIND	TEMP	HUMID	SEA	WAVE	SWELL	WAVE DIR	SWELL DIR	WAVE PER	SWELL PER	WAVE HGT	SWELL HGT	WAVE DIR	SWELL DIR	WAVE PER	SWELL PER	WAVE HGT	SWELL HGT
1	0000	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	0100	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	0200	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	0300	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	0400	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	0500	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	0600	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	0700	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	0800	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	0900	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	1000	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	1100	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	1200	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	1300	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	1400	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	1500	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	1600	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	1700	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	1800	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	1900	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	2000	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	2100	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	2200	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5
1	2300	010	24.0	85	1	2	3	045	045	10	10	1.5	1.5	045	045	10	10	1.5	1.5

TABLA B.1  
ARCHIVO DE DATOS DEL PROBLEMA 7.1

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
LYAC									
PROBAC									
N-JUTAC									
N-PENTAC									
N-HEXAC									
100									
170									
172									
174									
176									
178									
180									
182									
184									
186									
188									
190									
192									
194									
196									
198									
200									
202									
204									
206									
208									
210									
212									
214									
216									
218									
220									
222									
224									
226									
228									
230									
232									
234									
236									
238									
240									
242									
244									
246									
248									
250									
252									
254									
256									
258									
260									
262									
264									
266									
268									
270									
272									
274									
276									
278									
280									
282									
284									
286									
288									
290									
292									
294									
296									
298									
300									
302									
304									
306									
308									
310									
312									
314									
316									
318									
320									
322									
324									
326									
328									
330									
332									
334									
336									
338									
340									
342									
344									
346									
348									
350									
352									
354									
356									
358									
360									
362									
364									
366									
368									
370									
372									
374									
376									
378									
380									
382									
384									
386									
388									
390									
392									
394									
396									
398									
400									
402									
404									
406									
408									
410									
412									
414									
416									
418									
420									
422									
424									
426									
428									
430									
432									
434									
436									
438									
440									
442									
444									
446									
448									
450									
452									
454									
456									
458									
460									
462									
464									
466									
468									
470									
472									
474									
476									
478									
480									
482									
484									
486									
488									
490									
492									
494									
496									
498									
500									

TABLA 8.1.1  
ARCHIVO DE DATOS DEL PROBLEMA 7.2

## II).- MODELO DE SUMA DE FLUJOS ("SUM-RATES")

Este sistema tiene la finalidad de simular equipos de absorción y agotamiento utilizando para ello la técnica propuesta por Sujata, Birmingham y Otto. El modelo también se encuentra desarrollado en el lenguaje de Fortran IV (v.3.1), en la Burroughs B-7800.

### A).- INSTRUCCIONES PARA EL USO DEL SISTEMA

El usuario debe proporcionar la siguiente información:

- a).- Número de componentes a separar.
- b).- Rango de validez de las propiedades físicas.
- c).- Presión de la columna.
- d).- Coeficientes de los polinomios para evaluar las constantes de equilibrio y las entalpías en ambas fases.
- e).- Configuración de la torre:
  - Número de etapas de equilibrio.
  - Número de alimentaciones.
  - Número de salidas laterales de vapor.
  - Número de salidas laterales de líquido.
  - Número de etapas de transferencias de calor.
- f).- Alimentaciones:
  - Etapa de alimentación.
  - Fase de la alimentación.
  - Flujo de alimentación.
  - Composiciones de alimentación.
- g).- Salidas laterales (si existen):
  - Etapa de la salida lateral.
  - Flujo.

h).- Especificaciones para las transferencias de calor (si existen):

- Etapa.
- Flujo de calor

i).- Especificar el criterio de convergencia.

El sistema utiliza el algoritmo de Thomas para resolver la matriz tridiagonal, creada para la obtención de las fracciones mol en la fase líquida. También tiene la posibilidad de escoger el criterio de convergencia; ya sea el propuesto por Tomich:

$$\epsilon = \sum_{j=1}^N \left[ \left( \sum_{i=1}^c Y_{ij} - 1 \right)^2 + \frac{F_j H_{Fj} + Q_j + L_{j-1} h_{j-1} V_{j+1} H_{j+1}}{F_j H_{Fj} + Q_j + L_{j-1} h_{j-1}} \right]$$

$$\dots \frac{(L_j + SL_j) h_j - (V_j + SV_j) H_j}{+ V_{j+1} H_{j+1}}^2$$

o la suma de cuadrados residuales:

$$\delta = \sum_{j=1}^N (T_j^{k+1} - T_j^k)^2 \quad k = \text{No. iteración.}$$

#### B).- CARGA DE DATOS PARA EL MODELO DE SUMA DE FLUJOS ("SUM-RATES")

Los datos se introducen de la manera siguiente:

1a.- Perforar una tarjeta con la siguiente información, formato

(110, 3F10.2, 2110):

- a).- Número total de especies químicas a separar. (min=2, max=20)
- b).- Temperatura mínima válida para la evaluación de propiedades. ( °F)
- c).- Temperatura máxima válida para la evaluación de propiedades. ( °F)
- d).- Perfil inicial de presión. ( PSIA )
- e).- Número máximo de iteraciones permitidas para la columna (valor de omisión=15). (max=99)
- f).- Criterio de convergencia:  
 0 = suma de cuadrados residuales.  
 1 = criterio de Tomich.

2a.- Perforar una tarjeta por cada componente, indicando su nombre (máximo doce caracteres).

3a.- Perforar una tarjeta por cada componente, dando los coeficientes del polinomio cúbico para evaluar las constantes de equilibrio ( $a_i$ ;  $i=1,4$ ), tal que:

$$K_{ij} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 \quad (\text{adimensional})$$

con formato (4 E 15.5) (T en °F)

4a.- Perforar una tarjeta por cada componente, indicando los coeficientes del polinomio cuadrático para calcular las entalpías en la fase vapor ( $b_i$ ;  $i=1,3$ ), tal que:

$$H_v = b_1 + b_2 T + b_3 T^2 \quad (\text{adimensional})$$

con formato (3E15.5) (T en °F)

5a.- Exactamente el mismo procedimiento que para la cuarta tarjeta, pero evaluando la entalpía en la fase líquida.

6a.- Perforar una tarjeta conteniendo la siguiente información, formato ( 7I10):

- a).- Número del problema a resolver.
- b).- Número de etapas de equilibrio (min=3,max=100)
- c).- Número de alimentaciones (max = 100 )
- d).- Número de salidas laterales de vapor ( max = 98 )  
(excepto las etapas 1 y/o N).
- e).- Número de salidas laterales de líquido ( max = 98 )  
(excepto las etapas 1 y/o N).
- f).- Número de etapas donde hay intercambios de calor (excepto 1 y N). ( max = 98 )
- g).- Frecuencia de impresión de resultados intermedios (valor de omisión=10)

7a.- Perforar una tarjeta con formato ( 2F10.2), indicando:

- a).- Temperatura del fondo de la torre. ( °F )
- b).- Temperatura del domo de la torre. ( °F )

8a.- Perforar dos tarjetas por cada alimentación:

PRIMERA TARJETA formato ( 2I10, 2F10.2):

- a).- Número de la etapa de alimentación.
- b).- Fase de alimentación (1=vapor, 2=líquida).
- c).- Temperatura de alimentación. ( °F )
- d).- Flujo de alimentación. (LBMOL/HR)

SEGUNDA TARJETA formato (SF10.5).

Fracciones mol de alimentación para cada (adimen.)  
componente. Utilizar una tarjeta por cada cinco componentes.

9a.- Perforar una tarjeta por cada salida lateral de vapor (si existen), con la siguiente información: formato (I19, F10.2):

a).- Etapa.

b).- Flujo (LBMOL/HR)

10a.- El mismo procedimiento expuesto en la 9a. tarjeta, pero para las salidas laterales de líquido.

11a.- Perforar una tarjeta por cada etapa donde exista un intercambiador de calor, formato (I10, F15.5):

a).- Etapa donde exista un intercambiador.

b).- Flujo de calor (con signo negativo si va (BTU/HR)

a la etapa, positivo si proviene de ésta).

12a.- Perforar una tarjeta, indicando el número del componente (en el orden introducido en la 2a. tarjeta), cuyas composiciones en ambas fases se deseen graficar. (mínimo y máximo tres componentes, con formato 3 I12).

NOTA: Si sólo se desean dos componentes; repetir entonces uno de ellos dos veces hasta completar los tres.

INDICACION:

Si el usuario requiere resolver un mayor número de problemas, utilizando los mismos compuestos y en los mismos rangos de validez de las propiedades ff



uicas, entonces el programa le otorga la facilidad de hacerlo; simplemente introduciendo desde la tarjeta número seis hasta la doce para cada nuevo problema siempre agregándolas al final del problema anterior.

El archivo de datos, utilizado en la resolución del problema 7.3 se presenta en la tabla B.2.



100	150	200	250	300	350	400	450	500
110	MLTANO							0.000000
200	ETANO							0.000000
300	PROPANO							0.000000
400	BUTANO							0.000000
500	PENTANO							0.000000
600	ACEITE-ACSON							0.000000
800	1.220E+01	2.500E+01	-6.250E-04	0.000E+00				0.000000
900	4.750E+01	-4.270E-04	2.118E-04	-8.550E-08				0.000000
1000	2.250E+01	-1.210E-02	1.380E-04	-8.470E-08				0.000000
1100	-4.240E-01	1.210E-02	-1.120E-05	5.440E-08				0.000000
1200	-2.170E-01	4.160E-03	4.770E-07	3.080E-08				0.000000
1300	-5.110E-01	2.100E-06	0.000E-00	0.000E+00				0.000000
1400	4.000E+01	9.000E+01	0.000E+00					0.000000
1500	8.310E+01	1.320E+02	6.120E-02					0.000000
1600	-11950E+05	1.230E+02	2.210E-01					0.000000
1700	1.650E+05	9.010E+01	-3.780E-01					0.000000
1800	1.920E+05	2.950E+02	7.210E-02					0.000000
1900	3.740E+04	4.400E+01	0.000E+00					0.000000
2000	3.200E+05	1.100E+01	0.000E+00					0.000000
2100	3.620E+04	4.050E+02	-1.320E-01					0.000000
2200	6.200E+04	2.500E+02	4.650E-01					0.000000
2300	6.840E+04	2.050E+02	2.520E-01					0.000000
2400	7.920E+04	4.350E+02	3.020E-01					0.000000
2500	1.200E+04	7.300E+01	0.000E+00					0.000000
2600	1	2	0	0	0	3		0.000000
2700	150.	80.						0.000000
2800	1	2	91.	533.				0.000000
2900	1.00	1.00	0.00	0.00				0.000000
3000	1.							0.000000
3100	6	1	80.	197E+45				0.000000
3200	1.33	1.00	0.143	0.026	0.012			0.000000
3300	1.00							0.000000
3400	2	4	5					0.000000

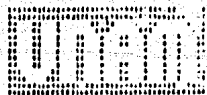


TABLA B.2  
ARCHIVO DE DATOS DEL PROBLEMA 7.3

111).- MODELO DE ISHII-OTTO (Método Alternativo)

Se muestra a continuación el manual de usuario del programa de simulación del Método de Ishii-Otto (versión alternativo), que tiene la finalidad de resolver problemas de destilación, absorción y agotamiento.

Este sistema se encuentra desarrollado en Fortran IV (versión 3.1), en un computador Burroughs Modelo B-7800 en el Programa Universitario de Cómputo de la U.N.A.M.

A).- INSTRUCCIONES PARA EL USO DEL SISTEMA

El usuario debe proporcionar la siguiente información:

- a).- Tipo de problema a resolver (absorción, destilación, etc.).
- b).- Presión de la columna.
- c).- Número de especies química a separar.
- d).- Polinomio para evaluar las propiedades físicas.
- e).- Temperaturas en la parte superior e inferior de la torre.
- f).- Configuración del equipo:
  - Número de etapas de equilibrio.
  - Número de alimentaciones.
  - Número de salidas laterales en ambas fases.
  - Intercambiadores de calor.
- g).- Alimentaciones:
  - Etapa.
  - Flujo molar.
  - Fase.
  - Temperatura.
  - Composiciones mol de alimentación.

h).- *Salidas laterales (si existen y en ambas fases).*

- *Etapa.*
- *Fase.*
- *Flujo.*

i).- *Intercambiadores de calor (si existen).*

- *Etapa.*
- *Flujo de calor que se transmite*

El sistema utiliza el algoritmo de Thomas para resolver matrices tridiagonales; así como también utiliza la técnica de LU para la inversión de matrices, con la fórmula de Crout. Cuando se requiere invertir matrices tridiagonales se utiliza el algoritmo creado por Ishii y Otto.

Finalmente el sistema aplica el criterio propuesto por Tomich - para obtener la convergencia.

B).- CARGA DE DATOS PARA EL METODO DE ISHII-OTTO (ALTERNO)

Los datos se introducen en el siguiente orden:

1o.- *Perforar una tarjeta con la siguiente información:*

*Formato (I10, 3F10.2, 3I10, I2):*

- a).- *Número total de especies químicas a* (min=3,max=20)  
*separar.*

- b).- *Temperatura mínima válida para la evaluación de propiedades.* (°F)
- c).- *Temperatura máxima válida para la evaluación de propiedades.* (°F)
- d).- *Perfil inicial de presión.* (Pcia)
- e).- *Número máximo de iteraciones permitidas para la columna (valor de omisión=15).* (max=99)

20.- *Perforar una tarjeta con formato (I10), indicando el tipo de separación deseado; a escoger entre:*

- 1).- *Destilación con condensador parcial.*
- 2).- *Destilación con condensador total.*
- 3).- *Absorbedor.*
- 4).- *Absorción con rehervidor.*
- 5).- *Agotamiento.*

30.- *Perforar una tarjeta por cada componente, proporcionando el nombre del compuesto (máximo 12 caracteres).*

- 40.- Perforar una tarjeta por cada componente, proporcionando los coeficientes del polinomio cúbico para evaluar las constantes de equilibrio ( $a_i$ ;  $i=1,4$ ), tal que:

$$K_{ij} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3$$

( $a_i$  = adimen.)

con formato (4E15.5).

- 50.- Perforar una tarjeta por cada componente, indicando los coeficientes del polinomio cuadrático para calcular las entalpías en la fase vapor ( $b_i$ ;  $i=1,3$ ), tal que:

$$H_v = b_1 + b_2 T + b_3 T^2$$

( $b_i$  = dimensionales)

- 60.- Con el mismo formato, realizar el procedimiento anterior, evaluando en esta ocasión la entalpía en la fase líquida.

- 70.- Introducir la siguiente información en una tarjeta:

- a).- Número del problema a resolver.
- b).- Número de etapas de equilibrio (min=3; max=50)
- c).- Número de alimentaciones (max = 50)
- d).- Número de salidas laterales de vapor (excepto las etapas I y/o N): (max = 48)

- e).- Número de salidas laterales de líquido (excepto las etapas 1 y/o N). (max = 48 )
- f).- Número de etapas donde hay intercambiadores de calor (excepto 1 y/o N). (max = 48 )
- g).- Frecuencia de impresión de resultados intermedios (valor de omisión = 5).

80.- Perforar una tarjeta indicando:

Si el tipo de separación es Destilación, con formato (5F10.2):

- a).- Relación de reflujo.
- b).- Temperatura del fondo de la torre ( °F )
- c).- Temperatura del domo de la torre ( °F )
- d).- Destilado en la fase vapor (Lbmol/hr)
- e).- Destilado en la fase líquida (Lbmol/hr)

Si el tipo de separación es absorbedor, con formato (2F10.2):

- a).- Temperatura en el fondo del equipo ( ° F )
- b).- Temperatura en la parte superior del equipo ( ° F )

Si el tipo de separación es absorción con rehevridor y con formato (3F10.2), introducir:

- a).- Temperatura en la parte inferior de la torre ( ° F )
- b).- Temperatura en el domo del equipo. ( ° F )
- c).- Flujo de vapor en la etapa 1 (Lbmol/hr)

90.- Perforar dos tarjetas por cada alimentación.

PRIMERA TARJETA

formato (2I10, 2F10.2):

- a).- Número de la etapa de alimentación.
- b).- Fase de alimentación (1=vapor, 2=líquido)
- c).- Temperatura de alimentación ( $^{\circ}$  F)
- d).- Flujo de alimentación (Lbmol/hr)

SEGUNDA TARJETA

formato ( 5F10.5)

Fracciones mol de alimentación para cada componente. Utilizar una tarjeta por cada cinco especies químicas.

100.- Perforar una tarjeta por cada salida lateral de vapor (si existen), con la siguiente información: formato (I10, F10.2):

- a).- Etapa.
- b).- Flujo (Lbmol/hr)

110.- Perforar una tarjeta con el procedimiento seguido en la tarjeta 10a.; refiriéndose ahora a las salidas laterales de líquido.

120.- Perforar una tarjeta por cada etapa donde exista un intercambiador de calor, formato (I10, F15.5):

- a).- Etapa donde existe el intercambiador.
- b).- Flujo de calor (con signo negativo si va a la etapa, positivo si proviene de ésta). (BTU/HR)



130.- Perforar una tarjeta con formato (I10), si se desea que el sistema calcule los perfiles iniciales de temperatura y de vapor:

0 = El sistema lo realizará.

1 = El usuario los proporcionará.

(valor de omisión = 0 )

140.- Si la opción elegida en la tarjeta 130. fue igual a 1, perforar tantas tarjetas como etapas de equilibrio existan; conteniendo la siguiente información por tarjeta:

a).- Temperatura de la etapa ( ° F )

b).- Flujo de vapor de la etapa (Lbmol/hr)

Lo anterior con formato ( 2F10.2 ).

150.- Perforar una tarjeta, indicando el número del componente (en el orden introducido en la 3a. tarjeta); cuyas composiciones en ambas fases se deseen graficar (forzosamente tres componentes, con formato 3I10).

NOTA: Si sólo se desean dos componentes; repetir entonces uno de ellos dos veces hasta completar los tres.

#### INDICACION:

Si el usuario requiere un mayor número de problemas a resolver utilizando los mismos compuestos y en los mismos rangos de validez

de las propiedades físicas. Solamente deberá introducir nuevamente desde la tarjeta número 7 hasta la 15 al final del archivo anterior y así sucesivamente para problemas subsecuentes con los mismos componente y el mismo tipo de separación.

Si no se alcanzará la convergencia en el número máximo de iteraciones especificado, no se graficarán los flujos de temperatura, vapor y líquido a lo largo del equipo; ni tampoco las composiciones en ambas fases.

En la tabla B.3 se presenta el archivo de datos correspondiente al problema 7.4; así como en la tabla B.4 está el del ejercicio 7.5.

Este mismo manual se utiliza para correr el Método de Ishii-Otto original.

100	6	53.	151.	75.	44		UC00100	
101	3						UC00101	
102	METANO						UC00102	
103	ETANO						UC00103	
104	PROPANO						UC00104	
105	BUTANO						UC00105	
106	PENTANO						UC00106	
107	ACEITO-ABSOR						UC00107	
200	1.025E+01	3.54E-11	-6.25E-04	0.000E+00			UC00200	
201	4.753E-01	-4.270E-04	2.080E-04	-8.550E-18			UC00201	
202	2.353E-07	-1.390E-02	1.380E-04	-8.470E-08			UC00202	
203	-4.247E-05	1.213E-02	-1.070E-05	5.440E-10			UC00203	
204	-7.077E-05	4.180E-02	4.776E-07	3.686E-08			UC00204	
205	-5.000E-17	2.000E-04	0.000E-00	0.000E-00			UC00205	
206	4.200E-05	9.000E-14	0.000E-00				UC00206	
207	0.239E-04	0.132E-12	0.0200E-02				UC00207	
208	0.119E-05	0.123E-12	0.2160E-01				UC00208	
209	0.165E-05	0.531E-01	0.7960E-01				UC00209	
210	0.192E-05	0.295E-12	0.7200E-02				UC00210	
211	0.274E-04	4.430E-01	1.071E-04				UC00211	
212	0.300E-05	1.130E-01	0.360E-04				UC00212	
213	0.260E-04	0.4350E-12	-0.1320E-01				UC00213	
214	0.423E-04	0.253E-12	0.6500E-01				UC00214	
215	0.286E-04	0.335E-12	0.2520E-01				UC00215	
216	0.152E-04	0.435E-12	0.2020E-01				UC00216	
217	0.229E-04	7.00E-11	1.041E-04				UC00217	
2000	1	6	2	6	0	0	4	UC002000
2100	150.	30.	2126.					UC002100
2200	1	2	97.	533.				UC002200
2300	0.5.	7.30	3.00	0.10				UC002300
2400	1.							UC002400
241	0	1	67.	1970-49				UC002401
242	0.03	1.374	1.000	1.000	0.652			UC002402
2700	0.00							UC002700
2750	0							UC002750
2800	2	3	4					UC002800

211

TABLA B. 3  
ARCHIVO DE DATOS DEL PROBLEMA 7.4

105		1	33.	35.	257.	30	0606106
107	CTAAG						0606107
109	PROFAXC						0606109
111	A-CUTALC						0606111
112	A-PENALAC						0606112
113	A-HEXAXC						0606113
200	.16650E+01		-0.15010E-12		.73500E-14		-0.21670E-17
300	.14000E+01		-0.40000E-12		.49600E-04		-0.3230E-07
400	-.17700E+00		.49500E-12		-.41500E-05		.22000E-07
500	-.17500E+01		.17700E-12		.20300E-06		.13100E-17
600	.63000E+00		-0.15390E-12		.10370E-04		-0.15500E-18
700	.63100E+00		.13200E+02		.60200E-02		
800	.11500E+02		.12300E+02		.22900E-11		
900	.10500E+02		.90000E+01		.37900E-01		
1000	.16200E+01		.29500E+02		.72000E-02		
1100	.22000E+02		.37000E+02		.20000E+01		
1200	.41000E+03		.93500E+01		.15000E-01		
1300	.20000E+03		.43500E+02		-.13200E-01		
1400	.40000E+04		.20000E+02		.46500E-01		
1500	.40000E+04		.33500E+02		.20000E-01		
1600	.75000E+04		.43500E+02		.30000E-01		
1700	1	16	2	1	1	1	5
1800	7.5	33.	35.	27.	3		
1900	1	2	213.73	51.			
2000	0.3	0.2	0.37	0.35	0.35		
2100	1	2	213.73	51.			
2200	0.3	0.2	0.37	0.35	0.35		
2300	13	17.					
2400	1	1.					
2500	1	0.10E+00					
2550	0						
2600	2	2	4				

TABLA B.4  
ARCHIVO DE DATOS DEL PROBLEMA 7.5

IV).- METODO DE SOLUCION SIMULTANEA PROPUESTO POR FREDENSLUND, GMEHLING  
MICHELSEN, RASMUSSEN Y PRAUSNITZ.

El modelo simula equipos de destilación con condensador total, utilizando el algoritmo original de Naphtali y Sandholm pero con las modificaciones propuestas por Aage Fredenslund y colaboradores que son básicamente la utilización de coeficientes de actividad calculados por medio del Método de contribución de grupos de UNIFAC; así como una simplificación del método original.

Así mismo, como los demás sistemas que se han presentado éste también se encuentra en un máquina Burroghs B-7800 y en Fortran IV (v.3.1).

Para la resolución del problema 7.6 el archivo de datos correspondiente se encuentra en la tabla B.5.

A).- INSTRUCCIONES PARA EL USO DEL SISTEMA

El usuario debe proporcionar la siguiente información al sistema:

- a).- Número de especies químicas a separar.
- b).- Presión a la que se encuentra operando la torre de destilación.
- c).- Coeficientes de las ecuaciones que predicen las propiedades físicas de los compuestos; como son:
  - Constantes de Antoine para las presiones de vapor.
  - Coeficientes para el cálculo de entalpías en ambas fases.
  - Según los coeficientes viriales para el cálculo de coeficientes de actividad y entalpía en exceso.
- d).- Configuración del equipo:
  - Número de etapas de equilibrio.

- Número de alimentaciones.
- Número de salidas laterales en cada fase.

e).- Para cada alimentación existente:

- Etapa.
- Flujo molar.
- Temperatura.
- Fracción de vaporización.
- Flujo molar para cada una de las especies químicas alimentadas.

f).- Salidas laterales (si existen):

- Etapa.
- Fase.
- Flujo total.

El sistema utiliza el mismo criterio de convergencia, indicado en los trabajos realizados por Naphtali - Sandholm.

### B).- CARGA DE DATOS PARA EL METODO DE FREDENSLUND ET ALL

Los datos se introducen de la manera siguiente:

- 10.- Perforar una tarjeta indicando el número de especies químicas a separar con formato (15) (max = 10)
- 20.- Perforar una tarjeta por cada componente, indicando su nombre (máximo doce caracteres).
- 30.- Perforar una tarjeta con la siguiente información y con formato (515):

- a).- Inclusión de coeficientes de actividad por medio de los parámetros de UNIFAC:

0 = calculados en forma ideal.

1 = deben incluirse en base a estos parámetros.

b).- Opción de coeficientes de fugacidad:

0 = calculados en forma ideal.

1 = usando coeficientes viriales.

c).- Opción de Dimerización:

0 = no se debe incluir la opción.

1 = habrá dimerización en la fase vapor.

d).- Inclusión de Entalpía en exceso:

0 = no debe incluirse esta opción.

1 = debe proceder el cálculo con la ayuda de los parámetros de UNIQUAC.

e).- Si existe dimerización indicar el número del compuesto que dimeriza. Su número de identificación será el mismo en el orden en que se introdujo su nombre.

40.- Si se escogió la opción de utilizar coeficientes de actividad en base a los parámetros UNIFAC, perforar esta tarjeta la 5a. y 6a.; de lo contrario pasar a la 7a. tarjeta.

Perforar una tarjeta por cada componente, proporcionando con formato (3F15.5), la siguiente información:

a).- Parámetro de área,  $q_k$ .

b).- Parámetro de volumen,  $r_k$ .

c).- Parámetro de definición  $l_k$ .

50.- Perforar una tarjeta por cada componente indicando las constantes  $A_{ji}^0$  de la ecuación polinomial siguiente: (auxiliares en el cálculo del parámetro UNIQUAC  $\tau_{ji}$ )

$$\tau_{ji} = A_{ji}^0 + A_{ji}^1 T$$

con formato ( 5E15.5 )

60.- Con el mismo formato, perforar una tarjeta por cada componente; indicando los parámetros  $A_{ji}^1$  de la ecuación anterior.

70.- Si se escogió la opción de coeficientes de fugacidad = 1, perforar esta tarjeta la 8a. y finalmente la novena; de lo contrario pasar a la décima tarjeta.

Perforar una tarjeta por componente, indicando los segundos coeficientes viriales ( $B_{ij}$ ), calculados en base a  $T_1$  con formato ( F10.3).

80.- Perforar una tarjeta por componente, indicando el segundo coeficiente virial evaluado a una temperatura  $T_2$  con formato ( F10.3).

90.- Perforar una tarjeta indicando las temperaturas  $T_1$  y  $T_2$  a las cuales se evaluaron  $B_{ij}(T_1)$  y  $B_{ij}(T_2)$ , con formato ( 2F10.3).

100.- Si existe dimerización en la fase vapor perforar una tarjeta, indicando los coeficientes de la ecuación para la dimerización en esta fase; siendo la ecuación:

$$- \log_{10} K_d = A - B/T$$



y los coeficientes (A) y (B), introducirlos con formato ( 2F10.3).

110.- Perforar una tarjeta por cada componente, proporcionando con formato ( 3F10.5), las tres constantes de Antoine para el cálculo de las presiones de vapor por componente puro.

120.- Con formato ( 4F10.3), perforar una tarjeta por componente, indicando los coeficientes apropiados para el cálculo de sus entalpías; tanto en la fase vapor como en la líquida ( $enp_k$ ;  $k=1,4$ ), tal que:

$$h_l = h_o + cp_l T \text{ (líquido)}$$

$$H_v = H_o + cp_v T \text{ (vapor)}$$

donde:

$k = 1$  corresponde a  $h_o$

$k = 2$  corresponde a  $cp_l$

$k = 3$  corresponde a  $H_o$

$k = 4$  corresponde a  $cp_v$

130.- Perforar una tarjeta conteniendo la siguiente información con formato ( E15):

a).- Número de etapas de equilibrio (min=3, max=30)

incluyendo condensador y rehervidor.

b).- Número de alimentaciones ( max = 28 )

c).- Número de salidas laterales de líquido ( max = 28 )

quido (excepto las etapas uno y/o n)

- d).- Número de salidas laterales de vapor ( max = 28 )  
(no introducir la etapa uno y/o N)
- e).- Número del problema a resolver.
- f).- Frecuencia de impresión de resultados intermedios (valor por omisión = 4 )

140.- Perforar una tarjeta con formato ( 5F10.5), indicando los parámetros:

- a).- Flujo de destilado ( MOL/ HR )
- b).- Relación de reflujo externo (Adimensional)
- c).- Presión en la columna. ( ATM )
- d).- Temperatura del domo de la Torre ( ° C )
- e).- Temperatura del fondo de la torre. ( ° C )

150.- Perforar una tarjeta, indicando si se desean eficiencias de Murphree etapa por etapa, con formato ( I5).

0 = Se leerán eficiencias de Murphree etapa por etapa.

1 = Se leerá una eficiencia para toda la columna.

160.- Si la opción en la tarjeta 15 fue de uno, perforar una sola tarjeta indicando la eficiencia de Murphree para toda la columna con formato ( F 10.5).

170.- Si por el contrario, la opción en la tarjeta 15 fue de cero; entonces perforar una tarjeta por cada etapa de equilibrio, indicando su eficiencia con formato ( F10.5).

18a.- Perforar dos tarjetas por cada alimentación existente:

PRIMERA TARJETA formato ( I 5 )

Indicar el plato de alimentación.

SEGUNDA TARJETA formato ( 7F10.5 )

- a).- Temperatura. ( ° C )
- b).- Fracción de vaporización de la alimentación. ( min=0.0, max=1.00 )
- c).- Flujo molar de alimentación para cada componente, cinco por tarjeta. ( MOL/HR )

19a.- Perforar dos tarjetas por cada salida lateral de líquido:

PRIMERA TARJETA formato ( I5 )

Indicar el número de la etapa en donde existe esta salida lateral.

SEGUNDA TARJETA formato ( F10.5 )

Indicar el flujo total de líquido a extraer en esta salida lateral ( MOL/HR )

20a.- Realizar el mismo procedimiento que en la tarjeta 19, tratándose ahora de salidas laterales de vapor.

21a.- Perforar una tarjeta con formato ( 3I5 ), indicando los tres componentes que se desean graficar. Completar exactamente los tres, si se desean dos; se deberá repetir el número de uno de ellos.

NOTA: Si el usuario desea efectuar la resolución de un nuevo problema, utilizando los mismos compuestos; sólo tendrá que perforar de la tarjeta número trece en adelante y agregarlas al final de las tarjetas - del problema anterior y así sucesivamente como problema de ser resuelto.

ET/ET/ES/EA/AD/DM (1/1/0/00)

5:43 PM TUESDAY, JANUARY 15, 17

100	4							
200	ETANGL							
300	N-FACPNDEL							
400	AGUA							
500	ACT-POLITICO							
600	2	2	2	2	4			
700		1.07199			2.10250			-0.43799
800		2.55200			2.77900			-0.44139
900		1.40000			1.90000			-0.32000
1000		2.07200			2.21200			-0.55039
1100		0.10000E+01			0.12000E+01			0.19200E+00
1200		0.77000E+01			0.10000E+01			0.37700E+00
1300		0.10000E+01			0.20000E+01			0.10000E+01
1400		0.40000E+01			0.27000E+01			0.29000E+01
1500		0.20000E+01			-0.20000E+03			0.90000E+03
1600		0.10000E+02			0.10000E+03			0.20000E+03
1700		-0.10000E+02			0.20000E+03			0.10000E+03
1800		-0.40000E+02			-0.20000E+02			-0.20000E+02
1900		-900.000			-477.755			-255.862
2000		-727.402			-403.957			-194.041
2100		-477.755			-100.000			-252.533
2200		-413.957			-900.000			-663.275
2300		-222.362			-200.000			-623.263
2400		-194.041			-219.071			-477.629
2500		-376.105			-374.054			-182.339
2600		-222.362			-344.758			-152.753
2700		355.000			375.000			
2800		100.000			200.000			
2900		8.04494			1074.330			222.651
3000		7.99703			1509.700			209.370
3100		7.94681			1668.200			208.000
3200		7.10007			1416.700			211.000
3300		2000.000			20.000			7903.720
3400		-2312.900			35.160			7722.400
3500		-1440.000			100.000			9200.620
3600		-2246.400			28.090			4574.750
3700		30			2			18.676
3800		40			2			26.770
3900		2			1			8.705
4000		7			10			17.920
4100		05			0			
4200		25			25			
4300		11			25			
4400		10			25			
4500		20						
4600		1			3			
4700					4			

TABLA 0.5  
ARCHIVO DE DATOS DEL PROBLEMA 7.6

## V).- METODO DE SOLUCION SIMULTANEA DE NAPHTALI-SANDHOLM

Se presenta el manual de usuario del programa de Simulación que utiliza la técnica propuesta por Naphtali y Sandholm, con el objetivo de dar solución a las más variadas técnicas de separación líquido-vapor.

El programa fue adaptado a una máquina Burroughs B-7800, en FORTRAN IV versión 3.1.

### A).- INSTRUCCIONES PARA EL USO DEL SISTEMA

El usuario deberá proporcionar la siguiente información:

- a).- Escogerá de que manera se evaluarán las propiedades físicas, ya sean por datos termodinámicos o mediante correlaciones (Chao-Seader, Margules, etc.).
- b).- Proporcionará el número de especies químicas a separar (así como su nombre).
- c).- Configuración del equipo:
  - Número de etapas del equipo.
  - Número de alimentaciones (flujo, número y localización).
  - Salidas laterales (número, localización y flujo).
  - Intercambiadores de calor.

d).- Especificaciones en el Domo:

- Tipo de Condensador (parcial o total)
- Relación de reflujo.
- Temperatura.
- Flujo de destilado.
- Carga en el condensador.

e).- Especificaciones en el Fondo (opcionales):

- Relación en el rehervidor.
- Carga en el mismo.
- Flujo.
- Temperatura, etc.

f).- Perfil inicial de presión.

g).- Eficiencias de Murphree.

El sistema determinará por la condición térmica de la alimentación, si esta es de una fase o de dos fases; mediante el cálculo de un Flash. Los datos termodinámicos se pueden obtener mediante:

a).- Correlación de Chan-Seader.

b).- Tablas de propiedades vs. Temperatura.

c).- Polinomios.

d).- La ecuación de tres sufijos de Margules para el cálculo de coeficientes de actividad.

Si se elige la opción de Chao-Seader, el sistema contiene un pequeño banco de datos de sesenta compuestos con sus más importantes propiedades; los compuestos son parafinas, cicloparafinas, aromáticos y nohidrocarburos.

B).- CARGA DE DATOS PARA EL METODO DE NAPHTALI-SANDHOLM

- 1.- Perforar una tarjeta proporcionando un título a la corrida con un máximo de ochenta caracteres.
- 2.- En la columna número tres perfore una X, si se usarán datos termodinámicos previamente calculados por el sistema e indique el número de especies químicas a separar con formato I10 de las columnas once a la veinte.
- 3.- Perfore una X en la opción deseada para la evaluación de las propiedades físicas:

<u>COLUMNA</u>	<u>OPCION</u>
3	Polinomios
8	Tablas
13	Chao - Seader (ideal)
18	Chao - Seader (no-ideal)
23	Entalpias por polinomios en función de la temperatura y relaciones de equilibrio por la correlación de Chao-Seader.



- 4.- Perfore una tarjeta por cada componente con formato (3A6,I4), indicando su nombre y su número de identificación según la tabla B.6. Para componentes hipotéticos se deberá utilizar la opción de Chao - Seader ideal o no-ideal (Ver tarjeta 7 y 8).

*NOTA:* Si sólo se dan los nombres de los compuestos, el programa les asignará un número; en este caso deben escribirse correctamente incluyendo blancos, números y guiones cuando así se requiera. Si sólo se utiliza el número de identificación según la tabla B.6, el programa asignará los nombres.

- 5.- Si se escogió la opción de evaluar propiedades por medio de polinomios perforar dos tarjetas:

PRIMER TARJETA (FORMATO 2F10.0)

- Indicar temperatura mínima de evaluación del polinomio.
- Indicar temperatura máxima de evaluación del polinomio.

SEGUNDA TARJETA (una por cada componente con formato 7F10.0)

- Coeficiente A del polinomio de las constantes de equilibrio.
- Coeficiente B del mismo polinomio.
- Coeficientes C del mismo polinomio.

CONSTANTES DE EQUILIBRIO

$$\ln K = \frac{A}{T + 459.6} + B + C (T + 459.6)$$

(T en °F)

- Coeficiente  $K$  del polinomio de la entalpía molar del líquido.
- Coeficiente  $L$  del mismo polinomio.

#### ENTALPIA MOLAR DE LIQUIDO

$$H_L = K T + L \quad (T \text{ en } ^\circ\text{F})$$

- Coeficiente  $U$  del polinomio de entalpía molar de vapor.
- Coeficiente  $W$  del mismo polinomio.

#### ENTALPIA MOLAR DE VAPOR

$$H_V = U T + W \quad (T \text{ en } ^\circ\text{F})$$

6.- Si se escogió la opción de evaluar las propiedades por medio de tablas (propiedad vs. temperatura), perforar las siguientes siete tarjetas:

#### TARJETA 1 Formato (E15.8,3I5)

- Presión absoluta a la que se evaluaron las propiedades.
- Número de temperaturas que se proporcionarán en la Tabla de constantes de equilibrio.
- Número de temperaturas que se proporcionarán en la tabla de entalpía de líquido.
- Número de temperatura que se proporcionarán en la tabla de entalpía de vapor.

TARJETA 2            *FORMATO ( 5E15.6)*

- *Temperaturas a las cuales se evaluaron las constantes de equilibrio (cinco temperaturas por tarjeta).*

TARJETA 3            *FORMATO ( 5E15.6)*

- *Perforar una tarjeta por componente, indicando los valores de las constantes de equilibrio evaluadas a las temperaturas introducidas en la tarjeta anterior (cinco evaluaciones por tarjeta).*

TARJETA 4            *FORMATO (5E15.6)*

- *Introducir las temperaturas a las cuales fueron evaluadas las entalpías de líquido.*

TARJETA 5            *FORMATO ( 5E15.6)*

- *Introducir una tarjeta por cada componente, indicando el valor de la entalpía del líquido evaluada a la temperatura correspondiente introducida en la tarjeta anterior.*

TARJETA 6            *FORMATO ( 5E15.6)*

- *El mismo procedimiento que la tarjeta cuatro, pero para entalpías de vapor.*

TARJETA 7            *FORMATO ( 5E15.6)*

- *Mismo procedimiento que la tarjeta cinco, pero para entalpías de vapor.*

7.- Si la opción elegida fue la de Chao-Seader (ya sea ideal o no-ideal), introducir con formato I5; el número de componentes hipotéticos a utilizar.

8.- Si existen componentes hipotéticos, introducir una tarjeta por cada uno de ellos con la siguiente información. FORMATO (3A6, I4, 7F8.1):

- Nombre
- Número de identificación (usar del número 61 al 100 ).
- Punto de ebullición ( °F )                    opcional                    (a)
- Punto de ebullición molar ( °F )            opcional                    (a)
- Punto de ebullición medio ( °F )            opcional                    (b)
- Temperatura crítica ( °R )    (c)
- Presión crítica (Psia)    (c)
- P API
- Peso molecular

NOTA: Se puede escoger o la opción (a) o la (b), forzosamente una de ellas.; (c), es completamente opcional, es decir se puede proporcionar o suprimir.

9.- Si la opción para evaluar propiedades fue la de entalpías por medio de polinomios y constantes de equilibrio por la correlación de Chao-Seader, perforar una tarjeta por componente; indicando los coeficientes de los polinomios para calcular la entalpía del líquido (coeficiente (K), y (L) y la entalpía de vapor (coeficientes (U) y (V) con formato 4F10.0.

Se utilizarán las fórmulas:

$$H_L = K T + L \quad (T \text{ en } ^\circ F)$$

$$H_V = U T + W \quad (T \text{ en } ^\circ F)$$

10.- Especificaciones del problema:

Perforar una tarjeta con la siguiente información:

	<u>FORMATO</u>
- Número de etapas de equilibrio.	I5
- Número de alimentaciones + intercambios de calor.	I5
- Número de salidas laterales totales	I5

Escoger una de estas dos opciones:

1).- Marque una X para condensador total columna 18

- Grados de subenfriamiento col 26 - 40

2).- Marque una X para condensador parcial columna 43.

NOTA: Las etapas de equilibrio incluyen condensador y rehedidor, si no se requiere condensador, marcar condensador parcial y especificar  $Q_D = 0.0$  en la siguiente tarjeta.

11.- Especificaciones en el domo:

Marque con una X una de las siguientes opciones, e introduzca el valor apropiado de su elección.

<u>COLUMNA</u>	<u>OPCION</u>
3	L/D reflujo externo
10	$Q_2$ carga en el condensador

<u>COLUMNA</u>	<u>OPCION</u>
15	$T_D$ temperatura en el condensador.
21	$D$ destilado total
27	$d_i$ flujo del componente $i$ en el destilado.
33	$x_{D_i}$ Fracción mol del componente $i$ en el destilado.
41 - 60	Valor de la opción elegida.
61 - 65	Número del componente si se escogió la opción $d_i$ o $x_{D_i}$

12.- Especificaciones en el Fondo del equipo.

Marque con una X una de las opciones:

<u>COLUMNA</u>	<u>OPCION</u>
3	V/B relación de rehervidor externo.
10	$Q_B$ carga en el rehervidor (positivo si se añade).
15	$T_B$ temperatura en el rehervidor.
21	$B$ producto del fondo.
27	$b_i$ flujo del componente $i$ en el fondo.
33	$x_{B_i}$ fracción mol del componente $i$ en el fondo.
41 - 60	valor de la opción.
61 - 65	número del compuesto si se escogió la opción $b_i$ o la $x_{B_i}$

13.- ALIMENTACIONES Y/O INTERCAMBIADORES DE CALOR

Perforar dos tarjetas por cada alimentación existente o una por cada intercambiador, con la siguiente información (iniciando con la alimentación o el intercambiador de calor que se encuentre localizado más cerca del domo).

TARJETA 1

<u>COLUMNA</u>	<u>CONCEPTO U OPCION</u>
1 - 5	No. de la alimentación o intercambiador (FORMATO I5).
6 - 10	Localización de ésta (No. del plato con formato I5).
- Marque una X en las opciones apropiadas	
A).- 13	Intercambiador de calor.
B).- 18	Se da el V/F (alimentaciones solamente).
C).- 23	Se proporciona la entalpia de alimentación.
D).- 28	Se dá la temperatura de alimentación.
E).- 33	La alimentación es líquida.
F).- 38	La alimentación es vapor.
41 - 55	Valor de la opción A (cantidad de calor transferido), B, C o D.

56 - 71

Presión de la alimentación o del intercambiador.

72

Si se diseña un plato con ambas fases.

NOTA: Si se desea alimentación en dos fases marque las columnas 33 y 38 con una X.

TARJETA 2

(SOLO ALIMENTACIONES)

FORMATO ( 5GI5.6)

- Perforar una tarjeta por cada cinco componentes, indicando las moles totales de alimentación de cada componente.

14.-Si existen salidas laterales perforar una tarjeta por cada salida indicando:

<u>COLUMNA</u>	<u>FORMATO</u>	<u>C O N C E P T O</u>
1 - 5	I5	No. de la salida lateral a tratar.
6 - 10	I5	Localización de ésta.
13	Marcar con una X	Salida líquida.
18	Marcar con una X	Salida vapor.

Escoger una de estas tres opciones:

23	Si se dara la relación de la salida lateral al sobrante de la corriente.
28	Moles totales de la salida.
33	Moles totales del componente i en la salida.



Especificar de la columna 36 - 50 el valor de la opción elegida. De la columna 51 - 55 con formato I5 proporcionar el número del componente si se eligió la última opción.

15.- Parámetros del sistema con formato ( 4I5, EI5.0)

- Índice de salidas (ver tabla B II)
- Máximo No. de puntos de búsqueda (omisión = 8 )
- Mínimo No. de puntos de búsqueda (omisión = 5 )
- Máximo No. de iteraciones (omisión = 20 )
- Tolerancia para detener el sistema

Marque una X para una de las dos opciones siguientes:

- En la columna 39                    Para imprimir resultados en disco.
- En la columna 45                   Para estimar flujos totales de vapor y líquido en lugar de flujos por componente.

16.- Parámetros dentro del sistema    Formato (4F10.5, I10, F10.5):

- Mínimo factor escalar en la fórmula de recurrencia de Newton-Raphson.
- Máximo número de iteraciones con una mayor suma de cuadrados.
- Máxima delta para la evaluación de temperaturas.

17.- Estimados iniciales:

Perforar dos tarjetas para estos estimados.

TARJETA 1      FORMATO (4E15.8)

- *Número del plato estimado.*
- *Presión existente en el plato.*
- *Eficiencia del plato.*
- *Temperatura del plato estimado.*

TARJETA 2 a      *(Si se escogió la opción de flujos por componente en la tarjeta No.15).*

- *Indicar los flujos de vapor para los componentes 1,2,3,...n, seguidos por los del líquido, cinco por tarjeta (formato 5E15.8).*

TARJETA 2 b      *(Si la opción elegida en la tarjeta 15 fue de flujos totales).*

- *Flujo total de vapor            formato E15.8.*
- *Flujo total de líquido        formato E15.8.*

*NOTA: Como mínimo deben darse los estimados del domo y del fondo de la columna; aunque se recomienda proporcionar un mayor número de estimados iniciales.*

INDICACIONES:

*El archivo de datos para el problema 7.8 se presenta en la tabla B.7.*

*En las tablas B.8 y B.9 se presentan los archivos para los problemas 7.9 y 7.10 respectivamente.*

TABLA B. 6

PARAFINAS Y OLEFINAS:

<u>Componente</u>	<u>#</u>	<u>Componente</u>	<u>#</u>
Metano	2	2-Metilpentano	52
Etano	3	3-Metilpentano	53
Propano	4	2,2-Dimetilbutano	54
i-Butano	5	2,3-Dimetilbutano	55
n-Butano	6	Etileno	22
i-Pentano	7	Propileno	23
n-Pentano	8	1-Butano	24
n-Hexano	10	cis-2-Buteno	25
n-Heptano	11	trans-2-Buteno	26
n-Octano	12	i-Butano	27
n-Nonano	13	1-Penteno	29
n-Decano	14	cis-2-Penteno	30
n-Undecano	15	trans-2-Penteno	31
n-Dodecano	16	2-Metil-1-Buteno	32
n-Tridecano	17	3-Metil-1-Buteno	33
neo-Pentano	9	1-Hexeno	35
n-Tetradecano	18	2-Metil-2-Buteno	34
n-Pentadecano	19	1-Hepteno	56
n-Hexadecano	20	Propadieno	57
n-Heptadecano	21	1,2-Butadieno	58
		1,3-Butadieno.....	28

CICLOPARAFINAS:

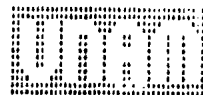
Ciclopentano	36	Ciclohexano	38
Metilciclopentano	37	Metilciclohexano	39
Etilciclopentano	59	Etilciclohexano	60

AROMATICOS:

Benceno	40	m-Xileno	43
Tolueno	41	p-Xileno	44
o-Xileno	42	Etil benceno	45

NO-HIDROCARBUROS

<u>Componente</u>	<u>#</u>	<u>Componente</u>	<u>#</u>
Hidrógeno	1	Dióxido de carbono	49
Nitrógeno	46	Sulfuro de hidrógeno	50
Oxígeno	47	Dióxido de sulfuro	51
Monóxido de carbono .....	48		



PROBLEMA 7.8 DE DESTILACION

100									
200				5					
300				X					
400	ETANO			4					
500	PROPANO			5					
600	N-BUTANO			6					
700	N-PENTANO			7					
800	N-HEXANO			8					
900	O								
1000	12	1		X					
1100	X						2.58		
1200				X			51.1		
1300	1	6		X			0.10	120.	
1400				5.	15.	25.	20.		35.
1500	4.					X	X		
1600	C.50			5	25.0				
1700		1.0			121.	1.	165.		
1800		48.2			126.1				
1900		12.1			121.	1.	236.1		
2000		175.			51.1				

TABLA B.7  
ARCHIVO DE DATOS DEL PROBLEMA 7.8

TEMP	PROBLEMA	NUMERO	7.9			PARA DESTILACION		
200		5						
200	X							
400	ETANO	3						
500	PROPANO	4						
600	N-BUTANO	6						
700	N-HEXANO	6						
800	N-HEXANO	10						
500	750.0	5	5	5				
1000	5000		750.0		1000.0		200.0	300.0
1100	1.3370		2.0545		2.3550		4.5970	7.7881
1200	0.7267		0.7556		0.8377		1.7591	2.2392
1300	0.0029		0.1802		0.2985		0.9832	1.6141
1400	0.0027		0.0515		0.0402		0.4141	0.8736
1500	0.0410		0.2352		0.0442		0.2124	0.5651
1600	5000		750.0		1000.0		200.0	300.0
1700	6603.00		6915.63		7205.00		8745.00	10460.00
1800	5612.00		6532.25		7538.00		11542.00	14916.48
1900	7666.25		8416.56		9245.00		13510.65	18498.65
2000	3328.00		9369.25		10942.00		16336.32	21196.72
2100	10170.00		11352.38		12572.00		18336.82	24307.22
2200	5000		750.0		1000.0		200.0	300.0
2300	5905.00		9332.66		9691.20		11347.48	12980.52
2400	12622.75		13000.76		13406.00		15510.11	17902.31
2500	17500.00		17438.28		17829.00		20100.19	22975.69
2600	9300.00		9009.25		10942.00		16036.32	21196.72
2700	10170.00		11352.38		12572.00		18336.82	24307.22
2800	10	2	2	X				
2900	X					7.5		
3000				X		4.0		
3100	1	2	X			29000.00	250.00	
3200	1	3		X	Y	212.93	250.00	X
3300			1.50		10.00	18.50	17.50	2.50
3400	1	3		X	X	212.93	250.00	X
3500			1.50		10.00	18.50	17.50	2.50
3600	1	2	X		X	3.00		
3700	2	12	X		X	37.00		
3800	5	8	5	80	7.0E-01	Y	X	
3900	1.5		5		25.0			
4000	1.0E+01		2.5E+02		1.0	120.00		
4100	0.0001		1.0E+01		1.0			
4200	2.0E+01		3.5E+02		1.0	134.00		
4300	170.00		150.00		1.0			
4400	1.0E+01		2.5E+02		1.0	201.00		
4500	310.00		240.00		1.0			
4600	1.0E+01		2.5E+02		1.0	307.00		
4700	2.0E+01		400.00		1.0			

TABLA B.8  
ARCHIVO DE DATOS DEL PROBLEMA 7.9

ESTADÍSTICA DE LOS...

PROBLEMA NUMERO 2.10 PARA ASOCIACION

...	...	...	...	...	...	...
1						
2		6				
3	X					
4	METANO	2				
5	ETANO	7				
6	N-PROPANO	4				
7	N-BUTANO	3				
8	N-PENTANO	2				
9	ACETILACETON	61				
10		5	5	5		
11			75.00	100.00	125.00	150.00
12	23.1677	27.4944	31.8211	36.1478	40.4745	44.8012
13	5.2332	5.0559	6.7118	7.7706	9.0774	10.6774
14	2.204	2.132	2.2953	2.7192	3.2461	3.9241
15	1.2522	0.4261	1.7284	1.0254	1.2351	1.5351
16	1.116	1.1317	0.2446	0.3816	0.5317	0.6917
17	1.0116	1.116	1.1111	0.0516	0.1116	0.1716
18	1.1	75.00	100.00	125.00	150.00	
19	225.00	4125.00	4400.00	4675.00	4950.00	
20	240.00	6525.00	7325.00	8125.00	8925.00	
21	260.00	546.75	925.00	1131.56	1376.25	
22	280.00	906.75	1742.00	1204.25	1312.00	
23	300.00	1331.25	12572.00	1389.36	15124.50	
24	320.00	1875.00	2711.00	21025.00	23750.00	
25	340.00	75.00	100.00	125.00	150.00	
26	360.00	2475.00	571.00	5925.00	6150.00	
27	380.00	9325.00	969.00	1054.06	11425.45	
28	400.00	13310.00	1341.00	1339.06	14299.75	
29	420.00	17425.00	17229.00	1626.88	17252.00	
30	440.00	21450.00	22221.00	2319.00	23797.00	
31	460.00	27475.00	4111.00	429.00	4411.00	
32	480.00					
33	500.00					
34		X		621.97		
35			XX	95.00	75.00 X	
36						
37						
38	2	Y	Y	0.00	75.00 X	
39	166.00	166.00	94.97	51.441	23.74	
40						
41	5	5	5	5	5	
42	1.00	25.00	1.00	1.00	1.00	
43	1.00	75.00	1.00	1.00	1.00	
44	1.00	125.00	1.00	1.00	1.00	
45	1.00	175.00	1.00	1.00	1.00	
46	1.00	225.00	1.00	1.00	1.00	

TABLA B. 9  
ARCHIVO DE DATOS DEL PROBLEMA 7.10

APENDICE " C "

En este apéndice se pretende demostrar matemáticamente que los algoritmos probados pueden converger a diferentes soluciones para un mismo problema (bajo las mismas condiciones).

Haciendo un análisis para ecuaciones no lineales primeramente y extrapolando para un sistema de ecuaciones de este tipo posteriormente, se observa que:

Se tiene que resolver ecuaciones de la forma

$$x = f(x) \tag{C.1}$$

Consista el método de iteración correspondiente en escoger un  $x_0$  arbitrario y generar la sucesión  $\{x_n\}$  recursivamente mediante:

$$x_n = f(x_{n-1}) \tag{C.2}$$

donde  $f$  es una función dada definida en el intervalo cerrado  $I = [a, b]$  y cuyos valores se encuentran en el mismo intervalo.

Lo anterior implica que si  $x_0 \in I$ , todos los elementos de  $\{x_n\}$ , también se encuentran en  $I$ . Si algún  $x_n \in I$  con  $n \geq 0 \in I$ , entonces también  $x_{n+1} = f(x_n) \in I$ ; puesto que  $f$  tiene su valor en  $I$ . (ver figura C.1).

Cabe aclarar que estas hipótesis no eliminan la posibilidad de la existencia de varias soluciones (llamadas puntos fijos), en el intervalo  $[a, b]$ . (ver. figura C.2).



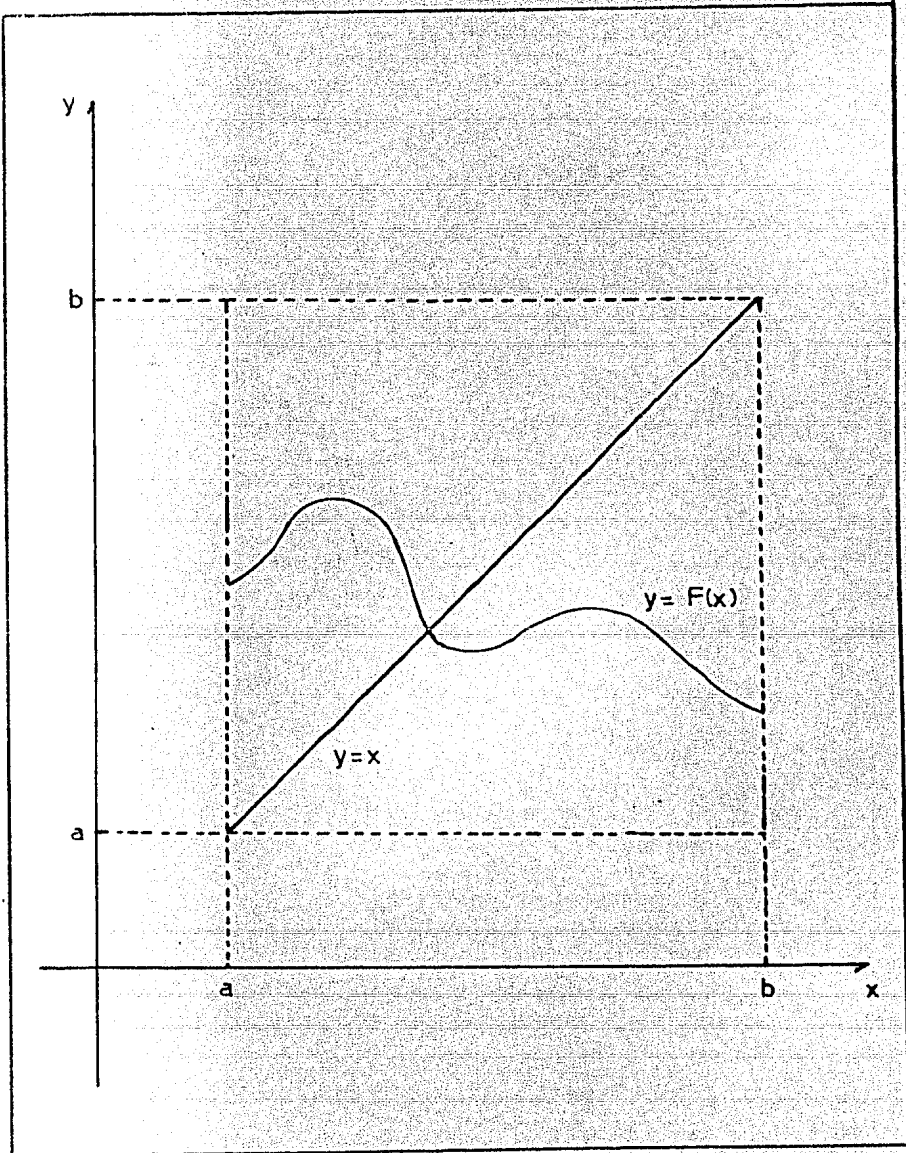


FIG. C.1 EXISTENCIA DE UNA SOLUCION PARA  $F(x)$

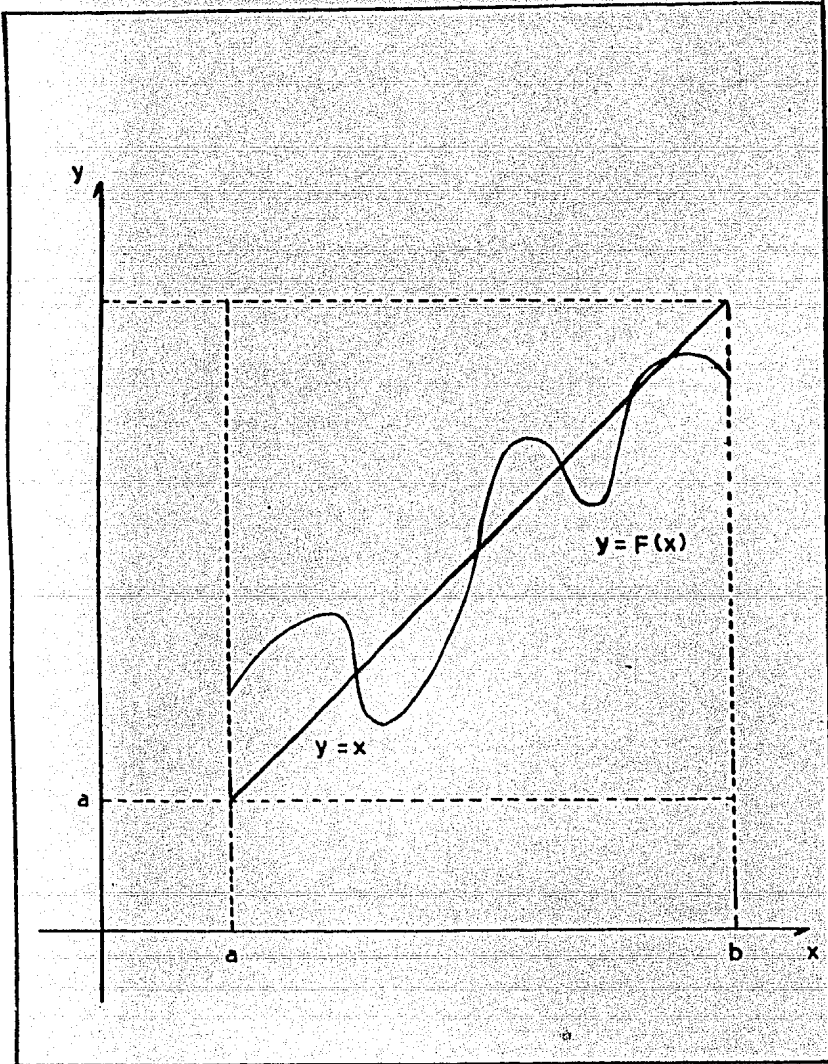


FIG. C.2 EXISTENCIA DE MAS DE UNA SOLUCION DE  $F(x)$

Si se quiere asegurar la existencia de una solución se debe desarrollar alguna hipótesis, garantizando que la función  $f$  no varíe demasiado rápida.

Supóngase que  $f$  es diferenciable y que su derivada  $f'$  satisface:

$$| f' (x) | \leq L \quad a \leq x \leq b \quad (C.3)$$

donde  $L$  es la constante de Lipschitz y  $L < 1$ . Además se verifica la desigualdad de Lipschitz para garantizar la unicidad de la solución; siendo ésta:

$$| f (x_1) - f (x_2) | \leq L | x_1 - x_2 | \quad (C.4)$$

donde  $x_1, x_2 \in I$ , concluyéndose que la relación (C.3), implica la condición (C.4), con un mismo valor de  $L$ , ésto se demuestra por medio del Teorema del valor medio.

La condición  $L < 1$ , implica que la ecuación  $x = f (x)$ , tiene cuando más una solución. Supóngase que hubiera dos soluciones  $s_1, s_2$ . Esto significa que las siguientes relaciones son ciertas.

$$s_1 = f (s_1) \quad s_2 = f (s_2)$$

restando:

$$s_1 - s_2 = f (s_1) - f (s_2)$$

tomando valor absoluto:

$$|s_1 - s_2| = |f(s_1) - f(s_2)|$$

aplicando (C.4):

$$|s_1 - s_2| = |f(s_1) - f(s_2)| \leq L |s_1 - s_2|$$

si  $s_1 \neq s_2$  se puede dividir entre  $s_1 - s_2$  y obtener:

$$1 \leq L$$

en contradicción con la hipótesis de que  $L < 1$ . Por tanto, si  $L \geq 1$  no existe una solución única.

Si se cumple que:

- a).-  $f$  sea una función continua en el intervalo cerrado finito  $I$ .
- b).-  $f(x) \in I$  para todo  $x \in I$ .
- c).-  $f$  satisface la condición de Lipschitz, con una constante  $L < 1$ .

Se puede concluir que la sucesión  $\{x_n\}$  generada por (C.2), converge a la solución  $s$ .

Para probar lo anterior se estimará la diferencia  $x_n - s$ .

Por definición:

$$\begin{aligned} x_n - s &= f(x_{n-1}) - s \\ &= f(x_{n-1}) - f(s) \end{aligned} \quad (C.5)$$

aplicando (2.4):

$$|f(x_{n-1}) - f(s)| \leq L |x_{n-1} - s|$$

$$|x_n - s| \leq L |x_{n-1} - s|$$

aplicando la misma desigualdad repetidamente se encuentra que:

$$|x_n - s| \leq L |x_{n-2} - s|$$

⋮

$$|x_n - s| \leq L^n |x_0 - s|$$

como  $0 \leq L < 1$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} L^n = 0$$

y de ello se sigue que:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |x_n - s| = 0$$

que es:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |x_n - s| = 0$$

lo que significa:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = s \quad \text{con lo que la prueba concluye.}$$

Sea también la cota para el error  $x_n$

$$|x_n - s| \leq \frac{L^n}{1-L} |x_1 - x_0|$$

que da una estimación útil del error en la  $n$ -ésima aproximación en términos de la diferencia entre esta aproximación y la precedente e indica cuando se debe detener el cálculo.

Supóngase ahora un sistema de dos ecuaciones no lineales con dos incógnitas; escribiéndolas con notación vectorial:

$$F = \begin{pmatrix} f(x,y) \\ g(x,y) \end{pmatrix}$$

y las coordenadas del punto  $(x,y)$ , por el vector columna:

$$X = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Entonces el sistema de ecuaciones no lineales se puede escribir como:

$$X = F(X) \tag{C.6}$$

Sea la norma euclidiada del vector  $x$ :

$$\|X\| = \sqrt{x^2 + y^2} \tag{C.7}$$

que no es negativa o cero si y sólo si  $x$  es el vector cero  $0=(0,0)$ .

Teniendo las siguientes propiedades:

$$\|c x\| = |c| \|x\| \tag{C.8}$$

y la desigualdad del Triángulo:

$$\|X_1 + X_2\| \leq \|X_1\| + \|X_2\| \quad (C.9)$$

Si  $X_1$  y  $X_2$  son dos vectores, entonces  $X_1 - X_2$  es la distancia de los puntos cuyas coordenadas son los componentes de  $X_1$  y  $X_2$ .

Se dice que una sucesión de vectores  $\{x_n\}$  converge a un vector  $V$  si:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|X_n - V\| = 0$$

y cumple el criterio de Cauchy, dado un  $\epsilon > 0$ , existe un entero  $N$  tal que para todo  $n > N$  y  $m > N$ :

$$\|X_m - X_n\| < \epsilon$$

Como en el caso de ecuaciones no lineales se utiliza el mismo método de iteración es decir:

Escoger un vector  $X_0$  arbitrario y generar la sucesión de vectores  $\{X_n\}$  recursivamente mediante:

$$X_n = F(X_{n-1}) \quad (C.10)$$

Como en la situación escalar, surgen los problemas de si la sucesión  $\{X_n\}$  está bien definida, si converge y si su límite es necesariamente una de las soluciones de la ecuación (C.6).

Todas esas preguntas se contestan por el siguiente resultado:

Sea  $R$  una región rectangular  $a \leq x \leq b$ ,  $c \leq y \leq d$ ; y sean  $f$  y  $g$  funciones tales que satisfacen las siguientes condiciones:

- i).-  $f$  y  $g$  son continuas y definidas en  $R$ .
- ii).- Para todo  $X \in R$ , el punto  $[f(X), g(X)]$ , se encuentra también en  $R$ .
- iii).- Existe una constante  $L < 1$  tal que se cumple la condición de Lipschitz.

$$\| f(X_1) - f(X_2) \| \leq L \| X_1 - X_2 \|$$

Si la función cumple esta condición se dice que la función es una contracción de  $R$ .

Entonces son ciertas las siguientes proposiciones:

- a).- La ecuación (C.6), tiene precisamente una solución  $S$  en  $R$ .
- b).- Cualquiera que sea la elección de un  $X_0$  en  $R$ , la sucesión  $\{X_n\}$  dada por (C.10), está definida y converge a  $S$ .
- c).- Para cualquier  $n = 1, 2, 3, \dots$  la siguiente desigualdad se verifica:

$$\| X_n - S \| \leq \frac{L^n}{1 - L} \| X_1 - X_0 \|$$

que cumple el criterio de Cauchy ya que  $0 \leq L < 1$



Prueba:

- Por la condición ii), es evidente que la sucesión  $\{X_n\}$  está definida y que sus elementos están en  $R$ .

- Por iii), se tiene:

$$\|X_{n+1} - X_n\| \leq L^n \|X_1 - X_0\| \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (C.11)$$

Sea  $n$  un entero positivo fijo y  $m > n$ . Aplicando el criterio de Cauchy, se hallará una cota para  $\|X_m - X_n\|$ . Escribiendo:

$$X_m - X_n = (X_{n+1} - X_n) + (X_{n+2} - X_{n+1}) + \dots + (X_m - X_{m-1})$$

Aplicando la desigualdad del triángulo:

$$\|X_m - X_n\| = \|X_{n+1} - X_n\| + \|X_{n+2} - X_{n+1}\| + \dots + \|X_m - X_{m-1}\|$$

usando (C.11), para estimar cada uno de los términos del segundo miembro:

$$\begin{aligned} \|X_m - X_n\| &\leq (L^n + L^{n+1} + \dots + L^{m-1}) \|X_1 - X_0\| \\ &\leq \frac{L^n}{1-L} \|X_1 - X_0\| \end{aligned} \quad (C.12)$$

La ecuación (C.12), no depende de  $m$  y tiende a cero cuando  $n \rightarrow \infty$ , por ser  $0 \leq L < 1$ , se establece que la sucesión  $\{X_n\}$  satisface el criterio de Cauchy. Tiene un límite  $S$  y como  $R$  es compacto,  $S \in R$ .

$$\text{Sea} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} F(X_n) = F(S)$$

por tanto:

$$S = \lim_{n \rightarrow \infty} X_n = \lim_{n \rightarrow \infty} X_{n+1} = \lim_{n \rightarrow \infty} F(X_n) = F(S)$$

probando que  $S$  es una solución de (C.6)

*Ejemplo:*

Para verificar que un sistema de ecuaciones no lineales puede tener más de una solución, se resolverá el siguiente sistema por medio de Newton-Raphson:

$$x^2 + y^2 - x = 0 \quad (\text{define un círculo con centro } (1/2, 0)).$$

$$x^2 - y^2 - y = 0 \quad (\text{define una hipérbola con centro } (0, -1/2)).$$

Con estimado inicial de  $x_0 = -2$ ,  $y_0 = -3$ , la convergencia se ilustra en la tabla C.A:

TABLA C.A

$n$	$x_n$	$y_n$
0	-2	-3
1	-0.63265	-0.959184
2	-0.11143	-0.348879
3	-0.01416	0.219229
4	0.051109	0.053446
5	-0.005877	-0.000563
6	-0.000040	0.000028
7	1.450E-9	4.762E-9
8	6.766E-18	1.097E-17
9	0.0000000	0.0000000

Teniendo solución en  $x_9 = 0$  y  $y_9 = 0$

Sea el iniciado inicial  $x_0 = 3$ ,  $y_0 = 4$ ; la convergencia se ilustra en la tabla C.B.

TABLA C.B.

<u>n</u>	<u><math>x_n</math></u>	<u><math>y_n</math></u>
0	3	4
1	1.580645	1.516129
2	1.099342	0.827737
3	0.888250	0.582532
4	0.812280	0.480250
.		
.		
.		
31	0.7718445065	0.4196433776

teniendo solución en  $x_{31}$  y en  $y_{31}$ .

*" Cuidaos del hombre de un sólo libro ".*

*CITA DE ISSAC D'ISRAELI*

BIBLIOGRAFÍA

## - INTRODUCCION:

- (1) SOREL, " *La Rectification de L'Alcool*", Paris (1863).

## - CAPITULO 1

- (1) GIBBS, J.W., " *The Scientific Papers of J.M. Gibbs*"  
pag. 55-340, Dover, Nueva York, 1961.
- (2) WANG, Jui C. y Wang Yui L. " *A Review on the modeling  
& Simulation of Multistage Separation processes* ", *Simulation Sciences Inc.*, 1400 N. Harbor Blvd. Fullerton,  
CA 92635, USA. (1981).
- (3) FENSKE, M.R., *Ind. Eng. Chem.*, Vol. 24, 482 (1932).
- (4) UNDERWOOD, A.J., *Trans. Inst. Chem. Engr. (London)*, Vol.  
10, 112 (1932).
- (5) UNDERWOOD, A. J., " *Fractional Distillation of Multicomponent Mixture* ", *Chem. Eng. Prog.*, Vol. 44, No. 2, 603  
(1948).
- (6) COLBURN, A.P., *Trans. AIChE*, Vol. 37, 805 (1941).
- (7) GILLILAND, E.R., *Ind. Eng. Chem.*, Vol. 32, 1101-1220 (1940).
- (8) SUGIE, H. and B.C. Lu, " *On The Determination of Minimum -  
Reflux ratio for multicomponent distillation of column with  
any number of sidecut streams* ", *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 25,  
1837 (1970).
- (9) FEATHERSTONE, W., " *Azeotropic Systems, a Rapid Method of  
Still Design* ", *Brit. Chem. Eng. & Proc. Tech.* Vol. 16 (12),  
121 (1971).

- (10) FEATHERSTONE, W., " Non-ideal Systems - A Rapid Method of Estimating Still Requirements ", *Process Technology International*, Vol. 12 (4/5), 185 (1973).
- (11) MADSEN, N., " Find the Right Reflux Ratio ", *Che. Eng.* Vol. 73, Nov.1, 1971.
- (12) VAN WINKLE, M. y G. Todd, " Optimum Fractions Design by Simple Graphical Methods ", *Chem. Eng.*, 136, Sep.20 1971.
- (13) VAN WINKLE, M. y W.G. Todd, " Minimizing Distillation Costs Via Graphical Techniques ", *Chem. Eng.* 105, March 6, 1972.
- (14) BARNES, F.J., y Hanson, y King, " Calculation of Minimum Reflux for Distillation Columns with Multiple Feed", *Ind. Eng. Chem. Process Des. & Dev.*, Vol. 11 (1), 136 (1972).
- (15) HANSON, D.N. y J. Newman, " Calculation of Distillation Columns at the Optimum Feed Plate Location ", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, Vol (16) (2), 223 (1977).
- (16) LEWIS, W.K., and G.L. Matheson, " Studies in Distillation Design of Rectifying Column for Natural and Refinery Gasoline ", *Ind. Eng. Chem.*, Vol. 24 (5),496 (1932).
- (17) THIELE, E.W. and R.L. Geddes, " Computation of Distillation apparatus for Hydrocarbon Mixtures ", *Ind. Eng. Chem.* Vol. 25 (3), 289 (1933).
- (18) HOLLAND, C.D., " Multicomponent Distillation ", Prentice Hall Inc., Englewood Cliff, 1963.
- (19) AMUNDSON, N.R., and A.J. Pontinen, " Multicomponent Distillation Calculation on a Large Digital Computer ", *Ind. Eng. Chem.*, Vol. 50, 739 (1958).

- (20) SUJATA, A.D., " Absorber-Stripper Calculation Made Easier " *Hydrs. Proc. & Pet. Refiner*, Vol. 40(12), 137 (1961).
- (21) FRIDAY, J.R., " An analysis of the Equilibrium Stage Separation Problems - Clasification and Convergence ", Ph. D. Thesis, Purdue University (1963).
- (22) WANG, J.C. y G.E. Henke, " Tridiagonal Matrix for Distillation ", *Hydrocarbon Processing*, Vol. 45(8), 155(1966).
- (23) MÜLLER, D.E., " A Method for solving Algebraic Equations Using an Automatic Computer ", *Math. Table Aids Comp.* - Vol. 10, 208 (1956).
- (24) LAPIDUS, L., " Digital Computation For Chemical Engineering ", McGraw Hill Book Co., New York, 1962.
- (25) TIERNEY, J.W. and J.L. Yanosik, " Simulation Flow and - Temperature Corrections in Equilibrium Stage Problem ", *AIChE J.*, Vol 15(6), 897 (1969).
- (26) TOMICH, T.F., " A New Simulation Method for Equilibrium Stage Process ", *AIChE J.*, Vol 16(2), 229 (1970).
- (27) BILLINGSLEY, D.S., " On the Numerical Solution of Problems in Multicomponent Distillation at Steady State II ", *AIChE J.*, Vol 16 (3), 441 (1970).
- (28) BILLINGSLEY, D.S., y G.W. Boynton, " Interactive Methods for Solving Problems in Multicomponent Distillation at - the Steady State ", *AIChE J.*, Vol 17(1), 65 (1971).
- (29) FRIDAY, J.R. and B.D. Smith " An Analysis of the Equilibrium Stage Separation Problem-Formulation in Convergence ", *AIChE J.*, Vol 10(5), 698 (1964).
- (30) WANG, Y.L. y A.P. Oleson, " Distillation Calculations for Complex Towers ", Private communication with Wang Jui. 1964.

- (31) NAPHTALI, L.M., "The Distillation Column as a Large System", Paper presented at AIChE 56 Th National Meeting, San Francisco, May 16 1965.
- (32) GOLDSTEIN, R.P. and R.B. Stanfield, "Flexible Method for the Solution of Distillation Design Problems Using the Newton-Raphson Technique", Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol 9 (1), 78 (1970).
- (33) OHMURA, S. y S. Kasahara, "New Distillation Calculation Method Utilizing Salient Features of Both Short-Cut and Tray-by-Tray Method. Semi-tray-by-Tray Method", J. Chem. Eng. Japan, Vol 11 (13), 185 (1978).
- (34) GENTRY, J.W., "An Improved Method for Numerical Solution of Distillation Processes", Can J. Chem. Eng., - Vol 48, 451 (1970).
- (35) ROCHE, E.C., Jr., "General Design Algorithm for Multistage Countercurrent Equilibrium Processes", BCE & Process Tech. Vol 16 (9), 821 (1971).
- (36) GALLUN, S.E. and C.D. Holland, "Solve More Distillation Problems Part 5, for Highly Non-ideal Mixtures", Hydrocarbon Processing, Vol 55 (1), 137 (1976).
- (37) Kubicek, M. and V. Hlavacek, y F. Prochaska "Global Modular Newton-Raphson Technique for Simulation of an Interconnected Plant applied to complex Rectification Columns", Chem. Eng. Sci., Vol 31, 277 (1976).
- (38) HESS, F.E y C.D. Holland, McDaniel, Tetlow, "Solve More Distillation Problems - Part 7, Absorber-type Pipestills" Hydrocarbon Processing, Vol 56 (5), 241 (1977).
- (39) HARCLEBODE, H. y J.W. Gentry, "A General Matrix Method for the Steady State Solution of Complex Distillation - Annularies" Can. J. Chem., Eng., Vol 50, 253 (1972).



- (40) BROWNE, D.W., ISHII & F.D. Otto, " Solving Multicolumn Equilibrium Stage Operation by Total Linearization ", *Can J. Chem. Eng.*, Vol 55, 307 (1977).
- (41) HOFELING, B.S. y J.D. Seader, " A Modified Naphtali-Sandholm Method for General Systems of Interlinked Multistage Separators ", *AIChE J.*, Vol 24 (6), 1131 (1978).
- (42) NAPHTALI, L.M. y D.P. Sandholm, " Multicomponent Separation Calculations by Linearization ", *AIChE J.*, Vol 17 (1), 148 (1971).
- (43) KAIBEL, G. y H. Mayer, y B. Seid, " Reaktion in Distillationen Kolonnen ", *Chem. Eng. Tech.*, Vol 50 (8), 586 (1978).
- (44) CARRA, S.M., Morbidelli, Santacesaria, Buzzi, " Synthesis of Propylene Oxide from Propylene Chlorohidrin II Modeling of Distillation with Chemical Reaction Unit ", *Chem. Eng. Sci.*, Vol 34, 1133 (1977).
- (45) ISHII, Y. y F.D. Otto, " A General Algorithm Multistage Multicomponent Separation Calculations ", *Can. J. Chem. Eng.*, Vol 51, 601 (1973).
- (46) SHAH, M.K. y P.R. Bishnoi, " Multistage Multicomponent Separation Calculations Using Thermodynamic Properties Evaluated by the SRK/PR Equation of State ", *Can. J. Chem. Eng.*, Vol 56, 478 (1978).
- (47) FREDENSLUND, A., J. Gmehling, Michelsen, Ramussen, Prausnitz " Computerized Design of Multicomponent Distillation Columns Using the UNIFAC Group Contribution Method for Calculation of Activity Coefficients ", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, Vol 16 (4), 450 (1977).

- (48) BUZZI Ferraris G. " Interlinked, Multistaged Separators With nonstandard specifications solved by the Newton-Raphson Method ", *AIChE J.*, Vol 27 (1), 163 (1981).
- (49) FITZMORRIS, R.E. y R.S. Mah, " Improving Distillation Column Design using Thermodynamic Availability Analysis ", *AIChE J.*, Vol 26 (2), 265 (1980).
- (50) LI, M.C. y R. J. Frost , " A flexible Solution Method - for generalized Equilibrium Stage Columns ", *The Canadian J. of Chemical Engineering*, Vol 59, junio, 388 (1981).
- (51) BUZZI, Ferraris Guido y Massimo Morbidelli, " Distillation Models for Two Partially Immiscible Liquids", *AIChE J.*, Vol 27 (6), 881 (1981).
- (52) ROSE, A. y R.F. Sweeny V.N. Schrodtt, " Continuous Distillation Calculations by Relaxation Method ", *Ind. Eng. - Chem.*, Vol 50 (5), 737 (1958).
- (53) BALL, W.E., " Computer Programs for Distillation ", paper presented at the *AIChE 44 th National Meeting*, New Orleans feb.1961.
- (54) VERNEUIL, V.S. y A.P. Oleson, " Steady-state Distillation via Transient-state Calculation ", paper presented at - 161st. *ACS National Meeting*, Los Angeles, March, 1971.

- (55) ECONOMOPOULOS, A.P., " A fast computer Method for Distillation Calculations ", *Chem. Eng.*, 91, April 24, 1978.
- (56) ISHIKAWA, T. y M. Hirata " Extractive Distillation Calculations by Modified Relaxation Method ", *J. Chem. Eng. Japan Vol 5 (2)*, 125-131 (1972).
- (57) JELINEK, J. V., HLAVACEK, M. Kubicek, " Calculation of Multistage Countercurrent Separation Processes"  
PARTE I *Chem. Eng. Sci.*, Vol 28, 155 (1973).  
PARTE II *idem*, Vol 28, 1825 (1973).  
PARTE III *idem*, Vol 28, 1833 (1973).
- (58) HLAVACEK, Jelinek, " Mathematical Modeling of the Rectification Process ", *International Chem. Eng.*, Vol (15 (3) 488 (1975).  
HLAVACEK, V. y Jelinek, " Calculation of Multistage Multicomponent Liquid-Liquid Extraction by Relaxation Method " *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, Vol 15(4), 481 (1976).
- (59) HUBER, W.F. Jr., " Figure Stages Process by Matrix ", *Hydrocarbon Processing*, 121 August, 1977.
- (60) KETCHUM, R.G., " A Combined Relaxation-Newton Method as a New Global Approach to the Computation of Thermal Separation Processes ", *Chem. Eng. Sci.*, Vol 34, 387 (1979).

- (61) MORRIS, C.G. y W.Y. Suresh, " Dynamic Simulation of Multicomponent Distillation ", *The Can. J. of Chem. Eng.* - Vol 59, junio 382 (1981).

- CAPITULO 2

- (1) AUDRY, Sánchez Javier. *Métodos Numéricos aplicados a la Ingeniería Química. Educación Continua y Cursos Especiales Coordinación de Extensión Académica. Facultad de Química UNAM, 1984.*
- (2) BROYDEN, C.G., " A Class Of Methods for Solving Nonlinear Simultaneous Equations ", *Mathematics of Computation*, Vol 19 pag 577 (1965).
- (3) MONTALVO Antonio y Susana Kaufmann, " The application of a modified damped newton method for the simulation of vapor-liquid stages-wise processes ". *I.I.M.A.S., UNAM, México, 1982.*
- (4) BOAS, Arnold. " How Search Methods Locate Optimum in Univariable Problems ", *Part. 3 Chem. Eng., Febrero 4, 1963.*
- (5) BENNETT, J.M., " Triangular Factors of Modified Matrices " *Numerische Mathematik, Vol.1, 1965, p 217.*
- (6) Hess E., Gallun S.E., Bentsen y Holland. " Solve more de-

- (5') *tillation problems, Part 8. wich Method to use "*, *Hydrocarbon Processing, Vol. 56 No. 6, june 1977, pp 181-188.*
- (6) *CONTE, S.D. y Carl de Boor. " Análisis Numérico elemental ", Editorial Mc.Graw Hill, New York, 2a. ed., 1972.*
- (7) *" Solve More Distillation Problems, Part 7, Absorber-type distillations ", Hydrocarbon Processing, Vol. 56, No. 5, May 1977 - pp 241-248.*

- CAPITULO 3

- (1) *WANG, J.C. y G.E.Henke, " Tridiagonal Matrix for Distillation " Hydrocarbon Processing, Vol 45(8), 155 (1966).*
- (2) *MÜLLER, D.E., " A Method for Solving Algebraic Equations using an Automatic Computer ", Math Table Aids.Comp., Vol.10, 208(1956).*
- (3) *HENLEY, Ernest and J.D.Seader Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering ED. John Wiley & Sons. (1981).*

- CAPITULO 4

- (1) *BURNINGHAM, D.W. y Fred Otto., " Which Computer Design for Absorbers ? ", Hydrocarbon Processing, Vol 46, No. 10, 163 (1967).*

- (2) HENLEY, Ernest and J.D. Seader  
*Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering* ED. John Wiley & Sons. (1981).

- CAPITULO 5

- (1) ISHII, Yoshikazu y Fred Otto., " A General Algorithm for Multistage Multicomponent Separation Calculations ". *The Canadian Chemical Engineering* Vol 51, October ,601 (1973).
- (2) CHAO, K.C. and J.D. Seader, *AIChE Journal*, Vol.7,598 (1961).
- (3) BISHNOI, PR. and M.K.Shah, " Multistage Multicomponent Separation Calculations using Thermodynamic Properties Evaluated by the SRK/PR Equation of State ", *Can. Chem. Eng.*, Vol 56 August, 178 (1978).
- (4) MONTALVO, Antonio, " The application of a modified Damped Newton for the simulation of vapor-liquid stages-wise processes ", *IIMAS. UNAM.* (1982).
- (5) BROYDEN, C.G., " A class of Methods for Solving Nolineal Simultaneous Equations ", *Mahtematicas of Computation*, Vol 19, 577 (1965).
- (6) SOLVE MORE DESTILLATION PROBLEMS, PART 7, Absorber-type pipettilla. *Hydrocarbon Processing*, Vol 56, No.5, 241 (1977).

- (7) SOAVE, Giorgio, " Equilibrium constants from modified Redlich-Kwong equation of State ", *Chem. Eng. Science*, Vol. 27 pp 1197-1203 (1972).
- (8) BROWNE, D.W., Ishii Y and Otto F., " Solving Multicolumn Equilibrium Stage Operation by Total Linearization ", *Can. J., Chem. Eng.*, Vol 55, 307 (1977).
- (9) Comunicación privada con Yoshikazu Ishii y manuscrito de Te sis desarrollada en Canada, (1984).
- (10) TOMICH, John F., " A New Simulation Method for Equilibrium Stage Process, *AIChE Journal*, Vol 16, No. 2, 229 (1970).

#### CAPITULO # 6

- (1) NAPHTALI, Leonard y Sandholm Donald, "Multicomponent Separation Calculations by Linearization", *AIChE Journal*, Vol. 17, No. 1, 148 (1971).
- (2) FREDENSLUND, A. Gmehling, J. Rasmussen  
Vapor - Liquid Equilibria Using UNIFAC  
Elsevier Scientific Publishing Co., New York (1977).
- (3) FREDENSLUND, Gmehling, Michelsen, Rasmussen, Prausnitz  
" Computerized Design of Multicomponente Distillation Column Using the UNIFAC Group Contribution Method for Calculation of Activity Coefficients", *I & EC PROCESS DES.DEV.*, Vol. 18 No. 4, 450 (1977).

- (4) HOFELING, B.S. y J.D. Seader " A Modified Naphtali-Sandholm Method for General Systems of Interlinked Multistage Separators", *AIChE J.*, Vol. 24 (6), 1131 (1978).
- (5) HENLEY Ernest and J.D. Seader  
*Equilibrium - Stage Separation Operations in Chemical Engineering* Ed, John Wiley & Sons. (1981).
- (6) HAYDEN, J.G. y O'Connell, J.P. *Industrial Engineering - Chemical Process Des. Dev.* Vol. 14, 200 (1975).

#### CAPITULO # 7

- (1) JOHANSON, P.J. and J.D. Seader  
*Stagewise Computations - Computer Programs for Chemical Engineering Education*, Ed. J. Christensen Aztec Publishing Co. Austin Texas (1972).
- (2) TOMICH, John F., " A New Simulation Method for Equilibrium Stage Process", *AIChE, J.*, Vol. 16 No. 22, 229 (1970).
- (3) FREDENSLUND A., Gmehling, Rasmussen  
*Vapor - Liquid Equilibria Using UNIFAC*  
Elsevier Scientific Publishing Co. New York (1977)



- (4) ISHII Yoshikazu, Otto Fred, "A General Algorithm for Multistage Multicomponent Separation Calculations", *The Canadian Chemical Eng.*, Vol. 51, October, 601 (1973).
- (5) WANG, J.C. y G.E Henke, "Tridiagonal Matrix for Distillation Hydrocarbon Processing, Vol. 45 (8), 155 (1966).
- (6) BURNINGHAM, D.W. y Otto Fred, "Which Computer Design for Absorbers?", *Hydrocarbon Processing*, Vol. 46, No. 10, 163 (1967)
- (7) SOAVE Giorgio, "Equilibrium Constants from a modified Redlich-Kwong equation of State", *Chemical Engineering Science*, Vol. 27, 1197-1203 (1972).
- (8) HENLEY Ernest & J.D. Seader.  
*Equilibrium - Stage Separations Operations in Chemical Engineering* Ed. John Wiley & Sons (1981).
- (9) Chao, K.C. and J. D. Seader, *AIChE Journal*, Vol 7, 598 (1961)
- (10) PERRY John, Chilton  
*CHEMICAL ENGINEER'S HANDBOOK*  
Tomo II, Wiley, 5a. Ed., Cap. 13
- (11) Fredenslund, Magnussen. *Azeotropic Distillation using Unifac*  
I. *Chem E Symposium series # 56* (1980).

## APENDICE "A"

- (1) HENLEY, Ernest and J.D. Seader  
*Equilibrium - Stage Separation Operations in Chemical Engineering*. Ed. John Wiley and Sons (1981).
- (2) MULLER, D.E.  
*A Method for Solving Algebraic Equations using an automatic Computer Math. Table Aids Comp.*, Vol 10, 208 (1956)
- (3) BOSTON, J.F. y Sullivan S.L. Jr.  
*An improved algorithm for solving the mass balance equations in multistage separation processes.*  
*The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol 150, October 1972.

## APENDICE "C"

- (1) HOUSEHOLDER, A.S.  
*Principles of numerical analysis*  
 Mc Graw Hill (1953)  
 Nueva York, Londres.
- (2) HILDERBRAND, F.B.  
*Introduction to numerical analysis*  
 Mc Graw Hill (1959)  
 Nueva York, Toronto, Londres

- (3) KAPLAN, W  
*Advanced Calculus*  
Addison-Wesley (1953)  
Cambridge
- (4) LIUSTERNIK, L.A. y E.I. Sobolev  
*Elemente der Funktional analysis*  
Akademierverlag (1960).  
Berlin
- (5) MULLER, D. E.  
*A method for solving algebraic equations using an automatic  
computer Math. Table Aids Comp., 10, 208-215*
- (6) OSTROWSKI, A.  
*Solution of equations and systems of equations*  
Academic Press (1960).  
Nueva York
- (7) HENRICI, Peter  
*Elements of Numerical Analysis*  
John Wiley and Sons, Inc. (1977).  
Nueva York