

300618

2
20



UNIVERSIDAD LA SALLE

ESCUELA DE QUIMICA
Incorporada a la U.N.A.M.

DESARROLLO DE UN METODO GLOBAL
PARA SIMULACION RIGUROSA DE TORRES
DE DESTILACION COMPLEJAS

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

T E S I S P R O F E S I O N A L
Que para obtener el Título de :
I N G E N I E R O Q U I M I C O
P r e s e n t a :
L U I S D E L B A R R I O M O L I N A

México, D.F.

1987



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 está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

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

I N D I C E

I	INTRODUCCION	1
	Objetivo	1
	Alcances y limitaciones	1
	Equipo Usado	3
II	EQUILIBRIO LIQUIDO LIQUIDO VAPOR Y LIQUIDO LIQUIDO	
	Balance de materia	4
	Relaciones de equilibrio y estequiométricas	5
	Análisis de grados de libertad	8
	Planteamiento matemático	12
	Método de resolución	14
	Aceleración de la convergencia en los cálculos de equilibrio	16
III	DESTILACION AZEOTROPICA Y EXTRACTIVA	
	Generalidades	18
	Comportamiento y selección de solventes	19
	Usos industriales	20
	Planteamiento de un separador multietapas	24
	Análisis de grados de libertad	26
	Balances de materia y energía y relaciones de equilibrio	29
	El Algoritmo de Almost-Band	33
IV	ALGORITMO PROPUESTO	
	Introducción	56
	El Algoritmo Propuesto	57
	Cambios de variable y aceleración de la convergencia	59
	Inicialización	62
	Metodología de cálculo	65
	Comparación del algoritmo propuesto con el algoritmo Almost-Band	65
V	USO DEL PROGRAMA	
	Acceso al banco de datos	67
	Acceso de la configuración de las torres	68
	Variables de entrada	69
	Variables de diseño	70
VI	CONCLUSIONES	
	Conclusiones	71
	Apéndice A Funciones error	73
	Apéndice B Convergencia con diferentes Parámetros	75
	Apéndice C Comparación de Algoritmos con otros métodos	79
	Apéndice D Problemas Estudiados	81
	Apéndice E Diagramas de Bloques	112
	Referencias Bibliográficas	

- CAPITULO I

INTRODUCCION

- Objetivo : El presente trabajo pretende modificar el algoritmo "ALMOST BAND", para hacerlo más eficiente, estable y rápido en la simulación de columnas multicomponentes con problemas de azeotropía y en columnas extractivas, las cuales manejan mezclas altamente no ideales, manejando rigurosamente el equilibrio de fases incluyendo el equilibrio de 3 fases.

Lateralmente, se compara este algoritmo con algoritmos de partición como es el caso del Thiele y Geddes, Wang-Henke, Burningham - Otto, 10, 17, 18 etc.

- Alcances y limitaciones: El algoritmo propuesto es flexible ya que puede ser usado para simular problemas de absorción, agotamiento, destilación convencional, destilación azeotrópica y extractiva.

El usuario tiene la facilidad de poder establecer cualquier configuración para las torres, es decir, puede especificar varias alimentaciones, varias extracciones líquidas, vapor y varias extracciones y/o adiciones de calor, así como las condiciones del reboilador y del condensador.

También, se pretende, que el usuario no tenga la necesidad de introducir datos no básicos, de ahí que el programa se encarga de definir condición térmica de la(s) alimentación(es), temperatura inicial estimada del Domo y del fondo, cargas térmicas si son usadas como variables, etc.

Para inicializar los cálculos se cuenta con 4 opciones diferentes, lo cual da versatilidad en los cálculos, pues dependiendo del sistema por simular se puede estudiar el efecto de las diferentes inicializaciones y/o asegurar la convergencia en algunos casos.

Para establecer el equilibrio y las entalpías se cuenta con un paquete bastante completo que permite al usuario flexibilidad en sus cálculos y hace del programa un programa versátil, pues puede ser usado para muy diversos sistemas. Las posibilidades para los cálculos son:

IDEAL,
NRTL,
UNIQUAC
PENG-ROBINSON
SOAVE
SOAVE-API
NATHIAS

entre otros métodos . También se pretende ser versátil en cuanto a la elección de las variables de diseño, de ahí que se puedan usar como variables independientes las cargas térmicas del condensador y del reboilador o bien el flujo de reflujo y de fondos.

En cuanto a las limitaciones, el programa no puede usarse para simular torres interconectadas y actualmente permite simular equipos de hasta 60 etapas teóricas, 60 alimentaciones, 60 extracciones líquidas y/o de vapor, mezclas hasta de 20 componentes y condensador total o parcial así como decantador perfecto. Sin embargo, el programa puede modificarse fácilmente para manejar más etapas teóricas y/o componentes si se compila de nuevo.

- Equipo Usado: El presente trabajo se desarrolló en un sistema de cómputo de Bufete Industrial, el cual es el siguiente:

- IBM - 4341 Modelo II
- El sistema operativo empleado fue el VM/CMS (Máquina Virtual-Sistema de Monitoreo Conversacional).
- El programa se desarrolló en VS-FORTRAN-77-REL-3 de IBM.(1983)
- La estructuración del programa es en bloques con el objeto de facilitar cambios en las subrutinas y/o añadir nuevas subrutinas.

CAPITULO II

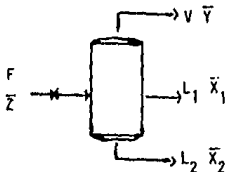
EQUILIBRIO LIQUIDO-LIQUIDO-VAPOR Y LIQUIDO-LIQUIDO.

A continuación se presenta el algoritmo para la simulación de equilibrio para mezclas multicomponentes con más de una fase líquida y pudiendo presentar inertes, y no evaporables.

- Balance de Materia:

Si se ejemplifica una etapa de equilibrio como un tanque que recibe F (mol/tiempo) de alimentación a la cual se le reduce súbitamente la presión, habrá una vaporización y existirán una o dos fases líquidas las cuales, para el desarrollo del modelo, se considera que están en equilibrio. Si existen inertes ^{2,3} todas deben considerarse como un solo componente con las propiedades de la mezcla de inertes pudiendo considerarse no condensable o no volátil y deberá accesarse como último componente de la mezcla por flashear.

Por otra parte, se considera que las constantes de equilibrio son funciones de P, T, \bar{X}_1, \bar{Y} y P, T, \bar{X}_2, \bar{Y} en donde $\bar{X}, \bar{X}_2, \bar{Y}$ representen las composiciones en equilibrio de todos los componentes en todas las fases.



Los balances de Materia que se pueden realizar en el caso de eq. L-L-V son:

Balance Total:

$$F = V + L_1 + L_2$$

Balance para el Componente i :

$$FZ_i = VY_i + L_1 X_{1i} + L_2 X_{2i}$$

Balance para inertes en caso de que los haya:

$$FZ_i = VY_i \quad \text{no condensables}$$

$$FZ_i = L_1 X_{1i} \quad \text{no volátiles}$$

Los balances de materia para el caso de eq. L-L, son:

Balance Total:

$$F = L_1 + L_2$$

Balance para el componente i:

$$FZ_i = L_1 X_{1i} + L_2 X_{2i}$$

- Relaciones de Equilibrio:

Conjuntamente con los balances de materia se requiere considerar las siguientes relaciones de equilibrio:

- Para el caso de Eq. L-L-V:

$$\text{Equilibrio de la fase 1: } Y_i = K_{1i} X_{1i}$$

$$\text{Equilibrio de la fase 2: } Y_i = K_{2i} X_{2i}$$

- Para el caso de Eq. L-L:

$$K_i = \frac{\frac{Y_i}{X_{2i}}}{\frac{Y_i}{X_{1i}}} = \frac{X_{1i}}{X_{2i}}$$

-Relaciones Estequiométricas.

$$\sum_{i=1}^N Y_i = \sum_{i=1}^N X_{1i} = \sum_{i=1}^N X_{2i} = 1$$

Es muy importante usar las últimas relaciones con la forma más adecuada para linealizar las curvas de error y, en consecuencia, acelerar la convergencia. Posteriormente se verá esto.

Para el caso general de la constante de equilibrio basada enteramente en la primera y segunda leyes de la termodinámica, presenta básicamente cuatro correcciones para el caso ideal:

- 1) Coeficiente de actividad del componente en mezcla líquida
- 2) Coeficiente de actividad del componente en mezcla vapor
- 3) Corrección para fugacidad del componente puro como líquido
- 4) Corrección por fugacidad del componente pero como vapor

Por lo que de manera general la constante de equilibrio puede expresarse como:¹⁹

$$K_1 = \frac{1}{P_t} \left(P^{\circ} \frac{\gamma}{\gamma_L} \frac{f}{\gamma_V} \right)_i$$

La dependencia de la corriente de equilibrio de las composiciones, se encuentra involucrada en los coeficientes de actividad, ya que éstos dependen del componente y de la mezcla en la que se encuentran, así como de la temperatura y de la presión.

Si hacemos nuevamente una base en la primera y segunda ley de la termodinámica para el cálculo de los coeficientes de actividad y de fugacidad, tanto en la fase vapor como en la fase líquida, se puede

presentar el modelo siguiente:²⁰

$$\ln \gamma_i = -\frac{1}{RT} \int_0^P (\bar{v} - v_i) dP$$

donde:

$$v_i = \frac{\partial V}{\partial n_i} \quad i = \text{Volumen parcial molar del componente } i \text{ en la mezcla}$$

$V_i = \text{Volumen molar del componente puro.}$

$$\ln \phi_i = \frac{1}{RT} \int_0^{P_0} (V_i - \frac{RT}{P}) dP$$

En el caso del coeficiente de fugacidad por el líquido no aparecerá el término $\frac{RT}{P}$.

Para algunos casos en especial se pueden hacer ciertas modificaciones en la expresión general tales como:

Liq. incompresible $V_i^L \text{ cte}$
 $P < P^* < 20 \text{ atm y } t > 0^\circ\text{C}$ $\phi_i^L = 1$

solución ideal (vapor) $P < 20 \text{ atm}$ $f_i^V = 1$

solución ideal (líquido) $P < 10 \text{ atm}$ $f_i^L = 1$ componentes cercanos de series homólogas.

vapor con comp. ideal $\phi_i^V = 1$

sistema ideal completamente $f_i = \phi_i = 1$ en ambas fases

-Análisis de Grados de Libertad:

La solución de las ecuaciones planteadas anteriormente involucra intrínsecamente, cálculos iterativos y numerosos, dependiendo de las variables que se especifiquen.

Una forma sencilla de determinar cuantas variables del modelo se pueden especificar y obtener, el sistema de ecuaciones óptimo es mediante un análisis de los grados de libertad que presenta el sistema.

Este análisis consiste en contar el número de variables independientes especificadas, balances independientes y por último, las relaciones adicionales y entonces el número de grados de libertad se obtiene por la substracción del número de balances independientes, variables independientes especificadas y relaciones adicionales del número de variables independientes.

En este caso, por las relaciones adicionales se cuentan las relaciones de equilibrio de cada una de las fases; estas correlaciones son ecuaciones complejas que generalmente tienen expresiones funcionales de este tipo:

$$K_i = f_i(T, P, \bar{X}, \bar{Y})$$

Grados de Libertad=Variables Independientes-Variables
Independientes Especificadas-Balances
Independientes-Relaciones Adicionales.

El sistema a resolver será un sistema no lineal de (VI-VIE) incógnitas por (BI+RA) ecuaciones.

Para el caso de un cálculo de Equilibrio Líquido-Líquido - Vapor:

a) Caso Normal:

Variables Independientes	4N	Z, X ₁ , X ₂ , Y
Variables Independientes Especificadas	N	Generalmente Z
Balances Independientes	N	Balances de Materia por componente.
Relaciones Adicionales	2N	Relaciones de equilibrio.
Grado de Libertad	0	

En este caso hay que resolver un sistema de 3N X 3N

b) Caso Simplificado:

Variables Independientes	4N+4	Z, X ₁ , X ₂ , Y, F, L ₁ , V, L ₂ .
Variables Independientes Especificadas	N+1	Z, F
Balances Independientes	N+1	Balances por componente y Balance total
Relaciones Adicionales	2N+3	Relaciones de equilibrio y ΣX ₁ , ΣX ₂ , ΣY
Grado de Libertad	-1	

El análisis anterior indica que se tiene una ecuación de más lo cual requiere que $\{X_1, \Sigma X_2, \Sigma Y\}$ tengan que ser colocadas en solamente dos ecuaciones, para el algoritmo propuesto se escogieron después de un análisis (ver apéndice A). las siguientes:

$$\ln(\sum X_1 \sum Y) = 0$$

$$\ln(\sum X_1 \sum X_2) = 0$$

Aparentemente queda por resolver un sistema de $(3N+3) \times (3N+3)$. sin embargo, utilizando las relaciones de equilibrio y el balance global, como se utilizó en el planteamiento matemático, queda por resolver un sistema de:

$$2 \times 2 \quad \text{es decir se calculan } \frac{L_1}{F} \text{ y } \frac{V}{F}$$

-Para el caso de Equilibrio Líquido-Líquido:

a) Caso Normal:

Variab ^l es Independientes	3N	Z, X ₁ , X ₂ ,
Variab ^l es Independientes Especificadas	N	Z
Balances Independientes	N	Balances por componente.
Relaciones Adicionales	N	Relaciones de Equilibrio.
Grados de Libertad	0	

Sistema por resolver de (2NX2N)

b) Caso Simplificado:

Variab ^l es Independientes	3N+3	Z, X ₁ , X ₂ , L ₁ , L ₂ , F
Variab ^l es Independientes Especificadas	N+1	Z, F
Balances Independientes	N+1	Balances por componente y Balance total.

Relaciones Adicionales $N+2$ Relaciones de equilibrio, $\sum X_1, \sum X_2$.

Lo cual indica, nuevamente, que se tiene una ecuación de más, de ahí que la $\sum X_1$ y $\sum X_2$ deban unirse en una sola ecuación que en el caso del algoritmo propuesto es:

$$\ln (\sum X_1, \sum X_2) = 0$$

de esta manera vuelven a quedar cero grados de libertad y hay que resolver un sistema de 1×1 siendo la variable independiente $\frac{L_1}{F}$ ya que aunque aparentemente queda por resolver un sistema de $(2N+2)(2N+2)$, haciendo nuevamente uso de las relaciones de equilibrio y del balance total se reduce a 1×1 . Para ambos casos el autor de esta tesis presentó un trabajo en la convención IHIQ y en el seminario de termodinámica 1986 UAH.^{3, 15, 16}

- Planteamiento Matemático

Es adecuado usar relaciones de flujos referidos a la alimentación, con el fin de limitar los parámetros de iteración a intervalos más restringidos.

El algoritmo propuesto propone el uso de $\frac{V}{F}$ y $\frac{L_1}{F}$ como parámetros de iteración para el caso de Eq L-L-V, ya que como se puede observar el intervalo físicamente posible para ambos es el comprendido entre cero y uno. Y para el caso de eq L-L se optó por $\frac{L_1}{F}$ como parámetro

* Eq. L- L- V:

Para hacer el planteamiento con el objeto de resolver el balance de materia, se divide el Balance e materia de el componente i entre F y entonces se observa que ya sólo es necesario expresar $\frac{L_2}{F}$ como función de $\frac{V}{F}$ y $\frac{L_1}{F}$; para lograrlo se hace uso de la siguiente expresión:²

$$\frac{L_1}{F} + \frac{L_2}{F} + \frac{V}{F} = 1$$

$$\frac{L_2}{F} = 1 - \frac{L_1}{F} - \frac{V}{F}$$

que substituyéndola por $\frac{L_2}{F}$ en el balance para el componente i da por resultado que:

$$Z_i = \frac{V}{F} Y_i + \frac{L_1}{F} X_{1i} + \left(1 - \frac{L_1}{F} - \frac{V}{F} \right) X_{2i}$$

$$Z_i = \frac{V}{F} (Y_i - X_{2i}) + \frac{L_1}{F} (X_{1i} - X_{2i}) + X_{2i}$$

Con esta última ecuación y las relaciones de equilibrio para cada una de las fases expresadas en función de las composiciones de

las fases líquidas se obtiene que:

$$x_{1i} = \frac{y_i}{K_{1i}}$$

$$x_{2i} = \frac{y_i}{K_{2i}}$$

con estas expresiones se puede obtener la expresión para obtener las composiciones en fase vapor y después para obtener las expresiones para las composiciones en ambas fases líquidas, se divide la expresión para Y_i entre K_{1i} y K_{2i} respectivamente con lo cual obtiene que:

$$Y_i = \frac{Z_i}{\frac{V}{F} + \frac{L_1}{F} \frac{1}{K_{1i}} + \left(1 - \frac{L_1}{F} - \frac{V}{F}\right) \frac{1}{K_{2i}}}$$

$$X_{1i} = \frac{Z_i}{\frac{V}{F} K_{1i} + \frac{L_1}{F} + \left(1 - \frac{L_1}{F} - \frac{V}{F}\right) \frac{K_{1i}}{K_{2i}}}$$

$$X_{2i} = \frac{Z_i}{\frac{V}{F} K_{2i} + \frac{L_1}{F} \frac{K_{2i}}{K_{1i}} + \left(1 - \frac{L_1}{F} - \frac{V}{F}\right)}$$

Y para el caso de no condensables:

$$Y_{\text{no cond.}} = \frac{Z_i}{\left(\frac{V}{F}\right)}$$

Para el caso de Eq. L-L:

$$Z_i = \frac{L_1}{F} x_{1i} + \frac{L_2}{F} x_{2i}$$

$$\text{si } 1 = \frac{L_1}{F} + \frac{L_2}{F}$$

y empleando que $x_{1i} = K_{1i} x_{2i}$ se obtiene que:

$$x_{2i} = \frac{Z_i}{\frac{L_1}{F} (K_{2i} - 1) + 1} \quad \text{y} \quad x_{1i} = \frac{x_{2i}}{K_{1i}}$$

- Método de Resolución:

Todo cálculo de equilibrio, debido a que se efectúan gran cantidad de ellos durante una simulación, debe ser seguro y rápido, de ahí que sea necesario encontrar funciones error que linealicen el sistema.⁷

Para nuestro modelo se utilizan como funciones error las siguientes:

$$f_1 \left(T, \frac{L_1}{F} \right) = \ln \left(\left(\sum_{i=1}^N x_{1i} \right) \left(\sum_{i=1}^N y_i \right) \right)$$

$$f_2 \left(T, \frac{L_1}{F} \right) = \ln \left(\left(\sum_{i=1}^N x_{2i} \right) \left(\sum_{i=1}^N x_{1i} \right) \right)$$

y el criterio de convergencia se define como:

$$\ln \left(\frac{\sum_{i=1}^N x_{1i} \sum_{i=1}^N y_i}{\sum_{i=1}^N x_{2i}} \right) = 0$$

Para resolver el sistema el cual realmente consiste en - -

(3*número de componentes)+5 variables, a saber, : $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{v}, \frac{L_1}{F}$.
 $\frac{L_2}{F}, \frac{v}{F}, T, p$: se lleva a cabo una partición y se fijan dos variables con lo cual el sistema se reduce a (3*Nc +2) variables de las cuales (3*Nc) se resuelven por sustitución directa normalizando las mismas en cada iteración.

Las otras dos variables se resuelven empleando el método de Newton-Raphson,⁶ con una modificación del método de Broyden⁶ para truncar el tamaño de paso como se verá más adelante.

Mediante el método de Newton-Raphson se resuelve, en este caso, un sistema de 2 x 2 en el cual las derivadas se calculan de manera

seminumérica, ya que las derivadas de la constante de equilibrio se calculan numéricamente. Con el objeto de que el Jacobiano sea centrado, se lleva a cabo la derivación con respecto a $\ln(T)$ o T^{-1} quedando el Jacobiano de la siguiente forma:

$$\frac{\partial f_1}{\partial \left(\frac{1}{T}\right)} = \frac{\sum x_1 \frac{\partial \sum Y}{\partial \left(\frac{1}{T}\right)} + \sum Y \frac{\partial \sum x_1}{\partial \left(\frac{1}{T}\right)}}{\sum x_1 \sum Y}$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial \left(\frac{L_1}{F}\right)} = \frac{\sum x_1 \frac{\partial \sum Y}{\partial \left(\frac{L_1}{F}\right)} + \sum Y \frac{\partial \sum x_1}{\partial \left(\frac{L_1}{F}\right)}}{\sum x_1 \sum Y}$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial \left(\frac{1}{T}\right)} = \frac{\sum x_1 \frac{\partial \sum X_2}{\partial \left(\frac{1}{T}\right)} + \sum x_2 \frac{\partial \sum x_1}{\partial \left(\frac{1}{T}\right)}}{\sum x_1 \sum x_2}$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial \left(\frac{L_1}{F}\right)} = \frac{\sum x_1 \frac{\partial \sum X_2}{\partial \left(\frac{L_1}{F}\right)} + \sum x_2 \frac{\partial \sum x_1}{\partial \left(\frac{L_1}{F}\right)}}{\sum x_1 \sum x_2}$$

De donde se obtiene:

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \left(\frac{1}{T}\right)} & \frac{\partial f_1}{\partial \left(\frac{L_1}{F}\right)} \\ \frac{\partial f_2}{\partial \left(\frac{1}{T}\right)} & \frac{\partial f_2}{\partial \left(\frac{L_1}{F}\right)} \end{bmatrix}$$

el vector de funciones:

$$F = [f_1, f_2]^T$$

y mediante el Newton-Raphson:

$$\Delta \bar{X} = \bar{J}^{-1} \Delta \bar{F} = \begin{bmatrix} \Delta(\frac{1}{T}) \\ \Delta(\frac{L_1}{F}) \end{bmatrix}$$

- Aceleración de la Convergencia en los Cálculos de Equilibrio

Para acelerar la convergencia y dar estabilidad a los cálculos se le incorpora el N-R una modificación de Broyden,⁶ con el objeto de hacer un truncamiento en el tamaño de paso que da el N-R original, siendo de gran importancia en el caso del parámetro $\frac{L_1}{F}$ y en la zona de frontera entre 2 fases y 3 fases, ya que en esta zona se requiere de un tamaño de paso sumamente acertado para evitar caer en una solución incorrecta. Esta modificación es la siguiente:

$$Q = (f_1 (\frac{1}{T}, \frac{L_1}{F}))^2 + (f_2 (\frac{1}{T}, \frac{L_1}{F}))^2$$

$$W = \frac{Q_k}{Q_{k-1}} \quad k \rightarrow \text{iteración}$$

$$N = \frac{(1 + 6W)^{\frac{1}{2}} - 1}{3W}$$

$$\Delta(\frac{L_1}{F}) = \Delta(\frac{L_1}{F}) \cdot N$$

$$\Delta(\frac{1}{T}) = \Delta(\frac{1}{T}) \cdot N$$

Por otra parte, esta modificación evita llevar a cabo cálculos innecesarios en la zona de 3 fases (L-L-V) si el sistema está francamente en zona de dos fases, ya que en estos casos el parámetro Q no disminuye.

La modificación de Broyden no incluye el manejo del Jacobiano ya que debido a que el sistema es muy pequeño, no se justifica el cálculo con el método de Broyden completo, de ahí, que el Jacobiano se genere en cada iteración.

Por lo que se refiere al cálculo del equilibrio la subrutina recibe composiciones de la alimentación, la presión y un estimado de temperaturas se procede entonces a llevar a cabo un cálculo ideal en el cual se evalúa un punto de burbuja y a la fase líquida 2 se le asignan las composiciones de la alimentación invertidas, con lo cual se lleva a cabo un cálculo del punto de burbuja con dos fases líquidas; si se encuentra solución, ésta se considera físicamente válida, sino se evalúa el punto de burbuja con una fase líquida y se regresan estos resultados al programa principal.

Como se puede observar, el algoritmo propuesto, únicamente considera los balances de materia, y si llegan a presentarse dos soluciones, es decir, solución para el caso de equilibrio Líq. Líq. Vapor, y para el caso de equilibrio Líq.-Vapor la primera se considera la correcta; esto se dedujo pues en todos los sistemas estudiados cuando se presentó el problema la solución correcta fue la de tres fases y se tienen más sistemas estudiados en donde se ratifica lo anterior.

Como forma alterna para obtener cálculos de equilibrio Líquido Líquido y Líquido Líquido Vapor se utilizan minimización de energía libre de Gibbs.^{14, 15}

CAPITULO III DESTILACION AZEOTROPICA Y EXTRACTIVA

- Generalidades

La destilación azeotrópica y la destilación extractiva son procesos antiguos que han llegado a ser ampliamente usados desde 1930. En 1908 Emile Guillaume fue el primero en hablar de destilación azeotrópica y el nombre de destilación extractiva fue introducido por Dunn.

La destilación azeotrópica y extractiva son ejemplos de columnas que separan soluciones altamente no ideales. La destilación extractiva se utiliza cuando las diferencias de volatilidad entre las especies involucradas en la separación es muy pequeña y entonces se requeriría un gran número de etapas en la operación convencional; por su parte, la destilación azeotrópica es una herramienta muy importante sobre todo en el caso de mezclas de punto de ebullición mínimo, en cuyo caso la destilación fraccionada no es posible de efectuarse.

En este tipo de mezclas es recomendable calcular el equilibrio con NRTL o UNIQUAC.

- Destilación Azeotrópica

Se entiende como el proceso de separación en donde el solvente es retirado de la columna como un azeótropo con uno o ambos componentes claves y usualmente en el destilado, también se puede aplicar a procesos en los cuales no se forma el azeótropo y el solvente es retirado casi en su totalidad en el destilado.

- Destilación Extractiva

Es el proceso de separación en donde el solvente es eliminado casi completamente en el fondo, sin formar un azeótropo y en el cual el solvente es añadido en la parte alta de la torre y con una alta concentración.

Por último, las aplicaciones de la destilación azeotrópica y extractiva han continuado incrementándose ya que muchas mezclas de puntos de ebullición muy cercanos sólo resultan económicamente posibles de separar mediante el uso de estas técnicas.

- Comportamiento y Selección de Solventes

Un solvente efectivo para un proceso de destilación extractiva, es aquél que es atraído por uno o más de los componentes de la mezcla,^{12, 13} esta atracción reduce la volatilidad del solvente así como la de los componentes por los cuales es atraído, es deseable que esta atracción sea de los componentes relativamente pesados hacia el solvente, pero no es una condición necesaria.

El efecto de atracción del solvente por ciertos componentes puede deberse a una combinación de los siguientes fenómenos:

- a).- Enlaces de Hidrógeno (Puentes)
- b).- Características del solvente y algunos componentes de la mezcla
- c).- La formación de complejos químicos débiles e inestables.
- d).- Que ocurra una reacción química entre el solvente y uno o más componentes de la mezcla.

Un solvente para el caso de destilación azeotrópica debe tener la capacidad de reducir la tendencia de atracción entre las moléculas. por ejemplo, un solvente no polar puede ser adicionado a una mezcla de componentes polares con el objeto de incrementar la volatilidad de los compuestos que tienen mayor polaridad en la mezcla. El efecto contrario ocurre si se introduce un solvente polar, ya que entonces la volatilidad de los compuestos más polares de la mezcla tenderá a disminuir.

Por otra parte, para la selección de solventes Bastos y Medina¹³ han propuesto emplear los coeficientes de actividad a dilución infinita como una gran herramienta para la selección de solventes en destilación extractiva, en su estudio utilizan UNIFAC para la obtención de estos coeficientes, pues con ellos se pueden obtener selectividad y así seleccionar el solvente adecuado.

En el caso de procesos de separación de hidrocarburos, el solvente, además de las características anteriores, debe cumplir con los siguientes requisitos:

- No corroer el equipo.
- No reaccionar con la corriente de alimentación.

-Usos Industriales.

Algunos ejemplos podrán ilustrar la importancia de los procesos de destilación azeotrópica y extractiva, a saber:

- Recuperación de Alcoholes y soluciones diluidas
- Separación de mezclas polares
- Separación de azeotropos

Un ejemplo típico de destilación extractiva, es la separación de isobutano de 1-butano, usando como solvente furfural¹ y propuesto por Zdonik y Wood field en 1950, el cual se muestra en la figura 1

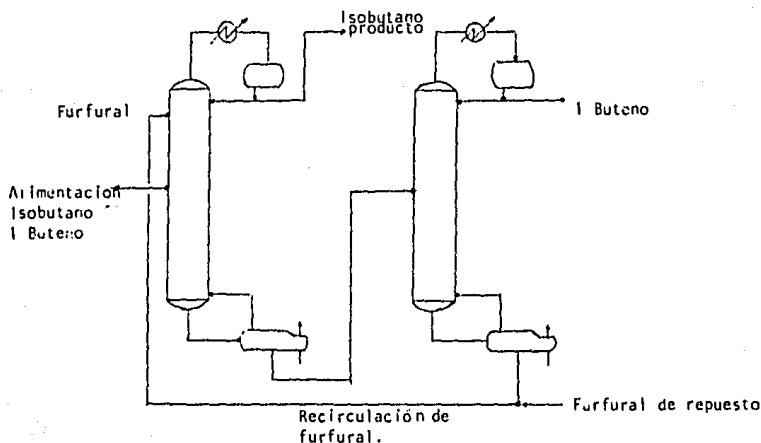


Fig. 1 Destilación Extractiva para la Separación de Isobutano y 1Buteno usando furfural como Solvente.

Al introducir el furfural la volatilidad relativa del isobutano con respecto al 1-butano en presencia del 80% mol de furfural, se incrementa a un valor de 2.0 a 52 C, de un valor de 1.16 a la misma temperatura sin la presencia del solvente.

En este caso el furfural ejerce una atracción sobre el 1-butano a través de un dipolo inducido y esto provoca que el isobutano incremente su coeficiente de actividad de un valor cercano a 1, hasta un valor de 12; por otra parte, el furfural, debido a su baja volatilidad casi no aparece en la fase vapor y entonces es posible, como se puede ver en la figura, separar el isobutano en la torre de destilación extractiva y después en la torre recuperadora de solvente separar el 1-butano.

Para ilustrar un proceso de separación azeotrópica se puede llevar a cabo la separación de alcohol-etílico del agua^{1,5}, mediante la adición de benceno como se muestra en la figura. 2

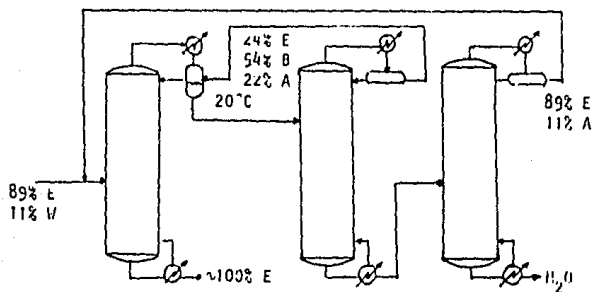


Fig.2 Separación Azeotrópica de Etanol y agua usando benceno como solvente.

En este caso, se pretende separar etanol al 89% del agua usando benceno, el 89% mol de etanol corresponde a la composición azeotrópica.

ca para una mezcla de etanol-agua a latm. de presión.

La presencia del benceno, compuesto relativamente no polar, provoca un aumento en la volatilidad del agua, ya que el benceno forma un azeótropo heterogéneo con un punto de ebullición menor al del alcohol etílico, lo que permita obtener etano casi puro por el fondo de la torre azeotrópica y en el domo de la torre se obtiene el azeótropo heterogéneo el cual se condensa para formar las dos fases líquidas de las cuales la fase orgánica (rica en benceno) se regresa como reflujo a la torre azeotrópica y la fase rica en agua pasa a una torre en donde se recupera el benceno con la composición azeotrópica y la corriente de fondos pasa a una torre en donde se remueve el agua y se regresa una mezcla con la composición azeotrópica (89% mol etanol y 11% de H_2O) a la torre azeotrópica.

-Planteamiento de un Separador Multietapas:

Considérese un separador general¹⁷, continuo, operando en régimen permanente y el cual consiste de un número de etapas arregladas en una cascada contra corriente. En las figuras 3 y 4 se muestran representaciones esquemáticas de una de las etapas y del separador general completo, con las etapas numeradas de arriba hacia abajo.

La alimentación que entra a la etapa j se representa por F_j con una composición molar Z_{ij} de cada componente i , a una Temperatura T_{Fj} , una presión P_{Fj} y una entalpía \hat{h}_{Fij} , \hat{H}_{Fij} . Si la presión de la alimentación es mayor que la presión de la etapa j , P_j , se asume que esta diferencia se reduce adiabáticamente en la válvula F .

También entrando a la etapa j , se encuentra el líquido de la etapa $j-1$ con un flujo molar L_{j-1} , composiciones $X_{i,j-1}$, entalpía $\hat{h}_{i,j-1}$, Temperatura T_{j-1} y Presión P_{j-1} , la cual puede ser igual ó menor a la de la etapa j .

De la misma forma de la etapa $j+1$ entra a la etapa j el vapor con un flujo molar V_{j+1} , composición $Y_{i,j+1}$, entalpía $\hat{h}_{i,j+1}$, Temperatura T_{j+1} , Presión P_{j+1} , en este caso cualquier exceso de presión es reducido adiabáticamente a través de la válvula V .

Saliendo de la etapa j se encuentran el líquido con flujo molar L_j y propiedades X_{ij} , T_j , P_j y \hat{h}_{ij} ; esta corriente puede dividirse en una extracción lateral U_j con las mismas propiedades X_{ij} , T_j , \hat{H}_{ji} y P_j , esta corriente también puede ser dividida en una extracción lateral W_j con las mismas propiedades.

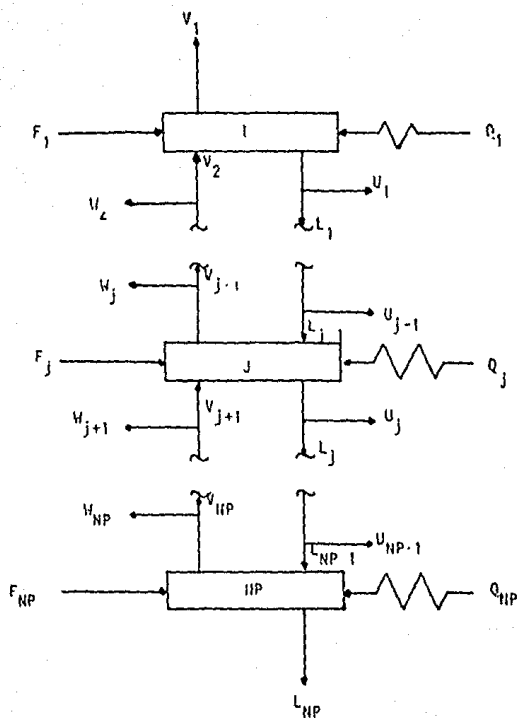


Fig 3 Esquema de un Separador Multietapas
contra corriente.

El calor puede transferirse Q_j de la etapa j (-) ó hacia la etapa j (+) con el objeto de poder simular enfriador, calentadores, condensadores ó rehedidores interetapa.

No se hace ningún tratamiento especial para el caso de dos fases líquidas pués, como se verá más adelante, solo se permite la presencia de dos fases líquidas en la etapa 1 y -- además el problema se resuelve por sustitución directa con un bloque de convergencia externo.

El modelo de separador general planteado con anterioridad si se resuelve de manera global involucra $N(2C+3)$ ecuaciones - simultáneas por resolver, pero si combinamos la $\sum X_{ij}$ y $\sum Y_{ij}$ en una ecuación, obtenemos $N(2C+1)$ ecuaciones con $N(2C+1)$ variables, a saber L_{ij} , V_{ij} y T_j sin embargo, el algoritmo de Almost Band⁵ para el caso de columnas convencionales propone $N(2C+1) + 2$ ecuaciones debido a que, dependiendo del tipo de cálculo, pueden quedar como variables L_j , L_{NP} ó Q_C y Q_R .

Para desarrollar cualquier procedimiento de corrección simultánea es muy importante seleccionar y ordenar las variables desconocidas y las funciones que las contienen; para el caso del Algoritmo de Almost-Band^B se procede a agrupar las funciones de acuerdo a su localización ya que sobre todo es recomendado para problemas que involucran muchas etapas teóricas y relativamente pocos componentes.

-Grados de Libertad.-

Las ecuaciones establecidas anteriormente son no lineales y están fuertemente relacionadas y la solución de las mismas involucra cálculos iterativos, complejos y numerosos, dependiendo de las variables que se especifiquen.

Por esta razón, se analizan los grados de libertad que

presenta el sistema, teniéndose presente que, en adición a las ecuaciones del modelo se necesitan correlaciones para predecir tanto las constantes de equilibrio como las entalpías de líquido y vapor, las cuales serán consideradas relaciones adicionales; de esta forma se tiene que:

Variables Independientes $NP(3NC+10)+1$ $F_{ij}, I_{ij}, V_{ij},$
 $T_{Fj}, P_{Fj}, T_j,$
 $P_j, U_j, W_j, Q_j,$
 $F_j, L_j, V_j, NP.$

Variables Independientes esp.

$NP(NC+9)+1$ $f_{ij}, U_j, W_j,$
 $T_{Fj}, P_{Fj}, P_j, F_j,$
 $NP, L_j, Q_j.$

Balances Independientes $NP(NC+1)$ + Balances de materia y Energía.

Relaciones Adicionales $NP(NC+2)$ + Constantes de equilibrio y

Grados de Libertad $-NP$ $\frac{\sum I_{ij}}{L_j}, \frac{\sum V_{ij}}{V_j}$

Por lo que si usamos las relaciones estequiométricas y las relaciones de equilibrio

$$Y_{ij} = \frac{V_{ij}}{V_j}$$

$$X_{ij} = \frac{I_{ij}}{L_j}$$

$$K_{ij} = \frac{Y_{ij}}{X_{ij}}$$

y las asociamos en una sola ecuación

$$f_{ij} = \frac{K_{ij} l_{ij}}{L_j} - \frac{V_{ij}}{V_j}$$

quedan cero grados de libertad y un sistema de $NP(2NC+1)NP(2NC+1)$ sin embargo en el Algoritmo de Almost Band se consideran dos variables extras para el caso de columnas convencionales que pueden ser Q_C y Q_R ó L_j y L_N , de ahí que de un sistema de:⁵

$$[NP(2NC+1)+2] \quad [NP(2NC+1)+2]$$

El Algoritmo de Almost-Band original⁵ también deja como variables independientes las extracciones, de ahí que el sistema se incremente a:

$$[NP(2NC+1)+2+NP] \quad [NP(2NC+1)+2+NP]$$

Es de aquí que parte del objetivo de modificar el algoritmo para, dejándolo con su estructura original, no incrementar el número de variables independientes por extracciones laterales ó por considerar dos fases líquidas en la etapa uno. en cuyo caso el algoritmo original considera un sistema de:

$$[NP(2NC+1)+2+NC] \quad + \quad \text{ecuaciones}$$

- Balances de Materia y Energía y Relaciones de Equilibrio

Una etapa de equilibrio se puede representar de la siguiente forma:

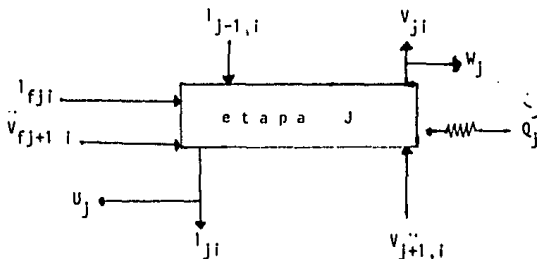


Fig 4 Esquema de una etapa teórica

En base al esquema anterior y basándonos en el algoritmo de ALMOST BAND original, se plantean las siguientes ecuaciones para describir un equipo de transferencia:

- 1.- Si se plantea el algoritmo para resolver absorbedores y agotadores:

Teniendo como variables independientes \bar{I} , \bar{V} , y \bar{T} :

- a).- Relaciones de equilibrio :

$$\frac{F_{ji}^V V_{ji}}{V_j} = \frac{F_{ji}^L K_{ji} I_{ji}}{L_j} \quad \begin{array}{l} j= 1, NP \\ i= 1, NC \end{array}$$

$$\sum_{i=1}^{NC} V_{ji} = L_j \quad j= 1, NP$$

$$\sum_{i=1}^{NC} V_{ji} = V_j \quad j= 1, NP$$

b).- Balances de Materia por componente:

$$V_{j+1,i} + l_{j-1,i} - V_{ji} - l_{ji} = 0 \quad \begin{array}{l} j = 1, NP \\ i = 1, NC \end{array}$$

c).- Balances de Energía

$$\sum_{i=1}^{NC} [V_{j+1,i} \hat{H}_{j+1,i} + l_{j-1,i} \hat{h}_{j-1,i} - V_{ji} \hat{H}_{ji} - l_{ji} \hat{h}_{ji}] = 0 \quad j=1,2NP$$

2.- Si se plantea de nuevo el algoritmo para resolver una columna de destilación convencional se tiene:

Si las variables independientes son \bar{T} , \bar{Q} , \bar{I} , \bar{v} .

a).- Relaciones de equilibrio:

Si el condensador es parcial:

$$\frac{F_{ji}^V Y_{ji}^V}{V_j} = \frac{F_{ji}^L K_{ji} l_{ji}}{L_j} \quad \begin{array}{l} j = 1, NP \\ i = 1, NC \end{array}$$

Si el condensador es total

$$\frac{F_{ji}^V Y_{ji}^V}{\sum Y_{ji}^V} = \frac{F_{ji}^L l_{ji}}{L_j} \quad \begin{array}{l} j = 1 \\ i = 1, NC \end{array}$$

b).- Balances de Materia por componente:

$$V_{j+1,i} + l_{j-1,i} - V_{ji} - l_{ji} = 0 \quad \begin{array}{l} 2 \leq j \leq NP-2 \\ NP < j \leq NP-1 \\ i = 1, NC \end{array}$$

Para la etapa número 1 (condensador):

$$V_{2i} - V_{1i} - l_{1i} = 0 \quad \rightarrow \text{condensador parcial} \quad i = 1, NC$$

$$V_{2i} - l_{1i} (D/L_1 + 1) = 0 \quad \rightarrow \text{condensador total} \quad i = 1, NC$$

Para la etapa de alimentación

$$V_{NF+1,i} + I_{NF,1,i} + I_{F,i} - V_{NF,i} - I_{NF,i} = 0 \quad i = 1, NC$$

$$V_{NF,i} + V_{F,i} + I_{NF-2,i} - V_{NF-1,i} - I_{NF-1,i} = 0 \quad i = 1, NC$$

Para la última etapa (rehervidor):

$$I_{NP,1,i} - V_{NP,i} - I_{NP,i} = 0 \quad i = 1, NC$$

c).- Balances de Energía:

Estos también sufren modificaciones en la primera etapa, en la etapa anterior a la alimentación, en la etapa de alimentación y en la última etapa.

Etapa 1 (Condensador Parcial):

$$\sum_{i=1}^{NC} [v_{2i} \hat{H}_{2i} - v_{ji} \hat{H}_{ji} - I_{ji} \hat{h}_{ji}] - Q_C = 0 \quad i = 1, NC$$

Condensador total

$$\sum_{i=1}^{NC} [v_{2i} \hat{H}_{2i} - \hat{h}_{ji} I_{ji} (D/L_1 + 1)] - Q_C = 0 \quad i = 1, NC$$

Etapa anterior a la alimentación:

$$\sum_{i=1}^{NC} [V_{NF,i} \hat{H}_{NF,i} + I_{NF-2,i} \hat{h}_{NF-2,i} + V_{F,i} \hat{H}_{F,i} - V_{NF-1,i} \hat{H}_{NF-1,i} - I_{NF-1,i} \hat{h}_{NF-1,i}] - \hat{h}_{NF,1,i} = 0 \quad i = 1, NC$$

-Etapa de alimentación

$$\sum_{i=1}^{NC} \left[v_{NF+1,i} \hat{H}_{NF+1,i} + l_{NF-1,i} \hat{h}_{NF-1,i} + l_{F,i} \hat{H}_{F,i} - v_{NF,i} \hat{H}_{NF-1,i} - l_{NF,i} \hat{h}_{NF,i} \right] = 0$$

$i = 1, NC$

-Ultima etapa

$$\sum_{i=1}^{NC} \left[l_{NP-1,i} \hat{h}_{NP-1,i} - v_{NP,i} \hat{H}_{NP,i} - l_{NP,i} \hat{h}_{NP,i} \right] + Q_R = 0$$

Para las etapas intermedias:

$$\sum_{i=1}^{NC} \left[V_{j+1,i} \hat{H}_{j+1,i} + l_{j-1,i} \hat{h}_{j-1,i} - v_{j,i} \hat{H}_{j,i} - l_{j,i} \hat{h}_{j,i} \right] = 0$$

$$2 \leq j \leq NF-1$$

$$NF < j \leq NP-1$$

--El Algoritmo de Almost Band:

El algoritmo de ALMOST BAND, es recomendado para la resolución de problemas que involucran columnas en las que se lleva a cabo la separación de mezclas altamente no ideales.

El algoritmo utiliza el método de Newton-Raphson o modificaciones al mismo, como la de Floyd-Ho uscholder^{5,6}, entre otras, para resolver el sistema de ecuaciones que tienen las siguientes variables como independientes:

$\bar{l}, \bar{v}, \bar{T}$ → para absorbedores y agotadores

$\bar{l}, \bar{v}, \bar{T}$ y $(Q_C, Q_R$ ó L_1 y $L_{NP})$ → para torres de destilación

Y se presenta con el algoritmo original, el siguiente sistema de ecuaciones:

a).- Para absorbedores y agotadores:

$$f_{ji} = \frac{F_{ji}^L l_{ji} + K_{ji}}{L_j} - \frac{F_{ji}^V v_{ji}}{V_j} \quad \begin{matrix} j=1, NP \\ i=1, NC \end{matrix}$$

$$m_{ji} = v_{j+1,i} + l_{j-1,i} - v_{j,i} - l_{j,i} \quad \begin{matrix} j=1, NP \\ i=1, NC \end{matrix}$$

$$G_j = \frac{\sum_{i=1}^{NC} v_{j,i} \hat{H}_{j,i} + l_{j,i} \hat{h}_{j,i}}{\sum_{i=1}^{NC} v_{j+1,i} \hat{H}_{j+1,i} + l_{j-1,i} \hat{h}_{j-1,i}} - 1 \quad j=1, NP$$

quedando un sistema de $NP(2Nc+1)$ ecuaciones .

b).- Para columnas de Destilación

$$f_{ji} = \frac{F_{ji}^L l_{ji} K_{ji}}{L_j} - \frac{F_{ji}^V v_{ji}}{V_j} \quad 1 \leq j \leq NP \quad \text{si el condensador es parcial}$$

$$f_{ji} = \frac{F_{ji}^L l_{ji} K_{ji}}{L_j} - \frac{F_{ji}^V y_{ji}}{\sum_{i=1}^{NC} y_{ji}} \quad \begin{matrix} j=1 \\ i=1, NC \end{matrix} \quad \text{si el condensador es total}$$

$$m_{ji} = v_{j+1,i} + l_{j-1,i} - v_{ji} - l_{ji} \quad \begin{matrix} 2 \leq j \leq NF-2 \\ NF < j \leq NP-1 \end{matrix} \quad i=1, NC$$

$$m_{ji} = v_{2i} - v_{ji} - l_{ji} \quad i=1, NC \quad \text{si el condensador es parcial}$$

$$m_{1i} = v_{2i} - l_{1i} (D/L_1 + 1) \quad i=1, NC \quad \text{si el condensador es total}$$

$$M_{NF,i} = v_{NF+1,i} + l_{NF-1,i} + l_{F,i} - v_{NF,i} - l_{NF,i} \quad i=1, NC$$

$$M_{NF-1,i} = v_{NF,i} + v_{F,i} + l_{NF-2,i} - v_{NF-1,i} - l_{NF-1,i} \quad i=1, NC$$

$$M_{NP,i} = l_{NP-1,i} - v_{NP,i} - l_{NP,i} \quad i=1, NC$$

$$G_1 = \frac{\sum_{i=1}^{NC} [v_{1i} \hat{h}_{1i} + l_{1i} \hat{h}_{1i}] + Q_C}{\sum_{i=1}^{NC} [v_{2i} \hat{h}_{2i}]} - 1 \quad \begin{matrix} i=1, NC \\ \text{si el condensador es parcial} \end{matrix}$$

$$G_j = \frac{\sum_{i=1}^{NC} [I_{j,i} \hat{h}_{j,i} (1+D/L_1)] + Q_C}{\sum_{i=1}^{NC} V_{2,i} \hat{h}_{2,i}} - 1 \quad \begin{array}{l} i=1, NC \\ \text{si el condensador} \\ \text{es total} \end{array}$$

$$G_{NF-1} = \frac{\sum_{i=1}^{NC} [V_{NF,i} \hat{h}_{NF-1,i} + I_{NF-1,i} \hat{h}_{NF-1,i}]}{\sum_{i=1}^{NC} [V_{NF,i} \hat{h}_{NF,i} + I_{NF-2,i} \hat{h}_{NF-2,i} + V_{F,i} \hat{h}_{F,i}]} - 1$$

$$G_{NF} = \frac{\sum_{i=1}^{NC} [V_{NF,i} \hat{h}_{NF,i} + I_{NF,i} \hat{h}_{NF,i}]}{\sum_{i=1}^{NC} [V_{NF+1,i} \hat{h}_{NF+1,i} + I_{NF-1,i} \hat{h}_{NF-1,i} + I_{F,i} \hat{h}_{F,i}]} - 1$$

$$G_j = \frac{\sum_{i=1}^{NC} [V_{j,i} \hat{h}_{j,i} + I_{j,i} \hat{h}_{j,i}]}{\sum_{i=1}^{NC} [V_{j+1,i} \hat{h}_{j+1,i} + I_{j-1,i} \hat{h}_{j-1,i}]} - 1 \quad \begin{array}{l} 2 \leq j < NF-1 \\ NF < j \leq NP-1 \end{array}$$

$$G_{NP} = \frac{\sum_{i=1}^{NC} [V_{NP,i} \hat{h}_{NP,i} + I_{NP,i} \hat{h}_{NP,i}]}{\sum_{i=1}^{NC} [I_{NP-1,i} \hat{h}_{NP-1,i}]} - 1$$

Además, en el caso de columnas de Destilación, como hay dos variables independientes más Q_c y Q_r o L_1 o L_{NP} , se añaden dos nuevas ecuaciones, las cuales son:

$$\begin{array}{l}
 S_J = \frac{\sum_{i=1}^{NC} I_{J,i}}{L_J} - 1 \\
 S_{NP} = \frac{\sum_{i=1}^{NC} I_{NP,i}}{L_{NP}} - 1
 \end{array}
 \left. \vphantom{\begin{array}{l} S_J \\ S_{NP} \end{array}} \right\} \rightarrow \text{Para condensador parcial}$$

$$\begin{array}{l}
 S_J = \sum_{i=1}^{NC} Y_{j,i} - 1 \\
 S_{NP} = \frac{\sum_{i=1}^{NC} I_{NP,i}}{L_{NP}} - 1
 \end{array}
 \left. \vphantom{\begin{array}{l} S_J \\ S_{NP} \end{array}} \right\} \rightarrow \text{Para condensador total}$$

quedando en este caso un sistema de $NP(2NC+1) + 2$ ecuaciones.

Por otra parte, el algoritmo de Almost Band original, propone para cada extracción lateral líquida o vapor, se introduzca una nueva ecuación y una nueva incógnita con lo cual el sistema aumentará a:

$$NP(2N+1) + 2 + N \text{ Extracciones}$$

Para establecer que la matriz Jacobiano tenga una forma de bloque tridiagonal casi en banda, el algoritmo original propone el siguiente arreglo de ecuaciones y variables:

a).- Para absorbedores y agotadores:

$$\begin{array}{l}
 F = [(\epsilon_{j,1}, \epsilon_{j,2}, \dots, \epsilon_{j,NC}, m_{j,1}, m_{j,2}, \dots, m_{j,NC}, G_j)_{j=1, NP}]^T \\
 \bar{X} = [(l_{j,1}, l_{j,2}, \dots, l_{j,NC}, v_{j,1}, v_{j,2}, \dots, v_{j,NC}, T_j)_{j=1, NP}]^T
 \end{array}$$

b).- Para columnas de destilación convencionales

$$\bar{F} = S_1 (f_{j1}, f_{j2}, \dots, f_{jNC}, m_{j1}, m_{j2}, \dots, m_{jNC}, G_j)_{j=1, NP} S_{NP}^T$$

$$\bar{X} = Q_C (l_{j1}, l_{j2}, \dots, l_{jNC}, v_{j1}, v_{j2}, \dots, v_{jNC}, G_j)_{j=1, NP} Q_R^T$$

c).- Para columnas con extracciones laterales líquidas o

vapor:

$$\bar{F} = (S_1 (f_{j1}, f_{j2}, \dots, f_{jNC}, m_{j1}, m_{j2}, \dots, m_{jNC}, G_j, E_j)_{j=1, NP} S_{NP}^T$$

$$\bar{X} = (Q_C (l_{j1}, l_{j2}, \dots, l_{jNC}, v_{j1}, v_{j2}, \dots, v_{jNC}, G_j, \phi_j)_{j=1, NP} Q_R^T$$

En base al arreglo anterior el Jacobiano tendrá la siguiente

estructura:

- Para absorbedores y Agotadores:

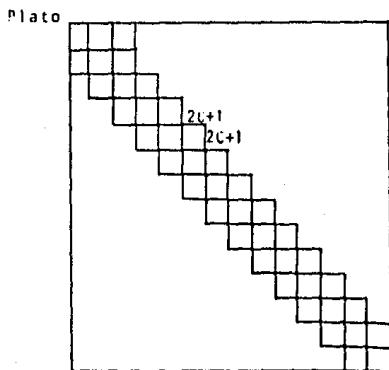


Fig 5 Absorbedor

- Para Columnas Convencionales

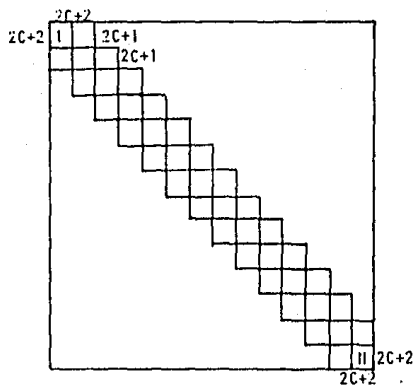


Fig. 6 Columna Convencional

- Para columnas con extracciones laterales:

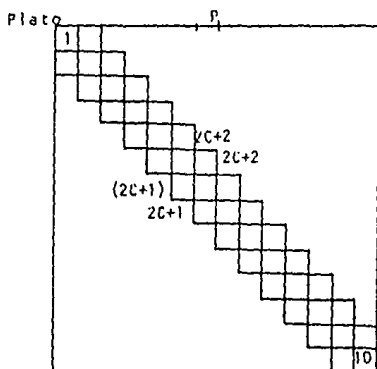


Fig. 7 Columna con una extracción en el plato r .

y en base al método de N-R, se puede establecer que:

$$\bar{J} \bar{\Delta X} = -\bar{F}$$

En donde para absorbedores y agotadores se tiene:

$\bar{J} =$

$$\begin{array}{ccc} \frac{\partial f_{j1}}{\partial l_{j1}} & \frac{\partial f_{j1}}{\partial l_{j1}} & \dots \dots \dots \frac{\partial f_{j1}}{\partial l_{jNC}} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial m_{jNC}}{\partial l_{j1}} & \frac{\partial m_{jNC}}{\partial l_{j2}} & \dots \dots \dots \frac{\partial m_{jNC}}{\partial l_{jNC}} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial G_1}{\partial l_{j1}} & \frac{\partial G_1}{\partial l_{j2}} & \dots \dots \dots \frac{\partial G_1}{\partial l_{jNC}} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial G_{NP}}{\partial l_{j1}} & \frac{\partial G_{NP}}{\partial l_{j2}} & \dots \dots \dots \frac{\partial G_{NP}}{\partial l_{jNC}} \end{array}$$

$$\bar{\Delta X} = (\Delta l_{j1} \quad \Delta l_{j2} \quad \dots \quad \Delta l_{jNC} \quad \Delta V_{j1} \quad \Delta V_{j2} \quad \dots \quad \Delta V_{jNC} \quad \Delta T_j)_{j=1}^{NP} T$$

Y para columnas de destilación:

$$\bar{J} = \begin{array}{ccc}
 \frac{\partial S_j}{\partial Q_L} & \frac{\partial S_j}{\partial I_{j1}} \dots \dots \dots & \frac{\partial S_j}{\partial Q_R} \\
 \\
 \frac{\partial f_{j1}}{\partial Q_C} & \frac{\partial f_{j1}}{\partial I_{j1}} \dots \dots \dots & \frac{\partial f_{j1}}{\partial Q_R} \\
 \vdots & \vdots & \vdots \\
 \frac{\partial m_{jNC}}{\partial Q_C} & \frac{\partial m_{jNC}}{\partial I_{j1}} \dots \dots \dots & \frac{\partial m_{jNC}}{\partial Q_R} \\
 \vdots & \vdots & \vdots \\
 \frac{\partial S_{NP}}{\partial Q_C} & \frac{\partial S_{NP}}{\partial I_{j1}} \dots \dots \dots & \frac{\partial S_{NP}}{\partial Q_R}
 \end{array}$$

Las derivadas contenidas en el Jacobiano empleando el algoritmo original de ALMOST BAND, son:

a) Para un absorbedor o un agotador:

1. Para la función de equilibrio

$$\frac{\partial f_{ji}}{\partial I_{nm}} :$$

$$\text{si } \begin{array}{l} n=j \\ m=i \end{array} \quad \frac{\partial f_{ji}}{\partial I_{ji}} = \frac{L_j (K_{ji} + I_{ji}) \left\{ \frac{\partial K_{ji}}{\partial I_{ji}} \right\} K_{ji} I_{ji}}{(L_j)^2}$$

$$\text{si } \begin{array}{l} n=j \\ m \neq i \end{array} \quad \frac{\partial f_{ji}}{\partial I_{jm}} = \frac{I_{jm}}{(L_j)^2} \quad (L_j) \quad \frac{\partial K_{ji}}{\partial I_{jm}} \cdot K_{ji}$$

$$\text{si } \begin{array}{l} n \neq j \\ m=i \end{array} \quad \frac{\partial f_{ji}}{\partial I_{ni}} = 0$$

$$\text{si } \begin{matrix} n \neq j \\ m \neq i \end{matrix} \quad \frac{\partial f_{ji}}{\partial l_{mn}} = 0$$

$$* \frac{\partial f_{ji}}{\partial v_{nm}} :$$

$$\text{si } \begin{matrix} n=j \\ m=i \end{matrix} \quad \frac{\partial f_{ji}}{\partial v_{ji}} = \frac{l_{ji}}{L_j} \left(-\frac{\partial K_{ji}}{\partial v_{ji}} \right) - \left(-\frac{v_j - v_{ji}}{v_j^2} \right)$$

$$\text{si } \begin{matrix} n=j \\ m \neq i \end{matrix} \quad \frac{\partial f_{ji}}{\partial v_{jm}} = -\frac{l_{ji}}{L_j} \left(-\frac{\partial K_{ji}}{\partial v_{jm}} \right) + \frac{v_{jm}}{v_j^2}$$

$$\text{si } \begin{matrix} n \neq j \\ m=i \end{matrix} \quad \frac{\partial f_{ji}}{\partial v_{n,i}} = 0$$

$$\text{si } \begin{matrix} n \neq j \\ m \neq i \end{matrix} \quad \frac{\partial f_{ji}}{\partial v_{n,m}} = 0$$

$$* \frac{\partial f_{ji}}{\partial T_n} :$$

$$\text{si } n=j \quad \frac{\partial f_{ji}}{\partial T_j} = \frac{l_{ji}}{L_j} \left(-\frac{\partial K_{ji}}{\partial T_j} \right)$$

$$\text{si } n \neq j \quad \frac{\partial f_{ji}}{\partial T_n} = 0$$

2.- Para la función de balance de materia:

$$* \frac{\partial m_{ji}}{\partial l_{nm}} :$$

$$\text{si } \begin{matrix} n=j \\ m=i \end{matrix} \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial l_{ji}} = -1$$

$$\begin{matrix} \text{si} & n=j+1 \\ & m=i \end{matrix} \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial l_{ni}} = 0$$

$$\begin{matrix} \text{si} & n=j-1 \\ & m=i \end{matrix} \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial l_{ni}} = 1$$

$$\begin{matrix} \text{si} & n=j \\ & m \neq i \end{matrix} \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial l_{jm}} = 0$$

$$\begin{matrix} \text{si} & n \neq j \\ & m \neq i \end{matrix} \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial l_{nm}} = 0$$

$$\frac{\partial m_{ji}}{\partial V_{nm}} :$$

$$\begin{matrix} \text{si} & n=j \\ & m=i \end{matrix} \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial V_{ji}} = -1$$

$$\begin{matrix} \text{si} & n=j+1 \\ & m=i \end{matrix} \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial V_{ni}} = 1$$

$$\begin{matrix} \text{si} & n=j-1 \\ & m=i \end{matrix} \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial V_{ni}} = 0$$

$$\begin{matrix} \text{si} & n=j \\ & m \neq i \end{matrix} \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial V_{jm}} = 0$$

$$\begin{matrix} \text{si} & n \neq j \\ & m \neq i \end{matrix} \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial V_{nm}} = 0$$

3.- Para la función de balance de energía:

$$\text{Si denominamos } B = \sum_{i=1}^{NC} (V_{ji} \hat{h}_{ji} + l_{ji} \hat{h}_{ji})$$

$$A = \sum_{i=1}^{NC} (V_{j+1,i} \hat{h}_{j+1,i} + l_{j-1,i} \hat{h}_{j-1,i})$$

se obtiene:

$$\frac{\partial G_j}{\partial l_{nm}} :$$

$$\text{si } \begin{matrix} n=j \\ m=i \end{matrix} \quad \frac{\partial G_j}{\partial l_{ji}} = \frac{\hat{h}_{ji} + l_{ji} \left(\frac{\partial \hat{h}_{ji}}{\partial l_{ji}} \right)}{A}$$

$$\text{si } \begin{matrix} n=j \\ m \neq i \end{matrix} \quad \frac{\partial G_j}{\partial l_{jm}} = (\hat{h}_{jim} + l_{ji} \frac{\partial h_{ji}}{\partial l_{jm}}) / A$$

$$\text{si } \begin{matrix} n=j+1 \\ m=i \end{matrix} \quad \frac{\partial G_j}{\partial l_{ni}} = 0$$

$$\text{si } \begin{matrix} n=j-1 \\ m=i \end{matrix} \quad \frac{\partial G_j}{\partial l_{ni}} = \frac{-B (\hat{h}_{j-1,i} + l_{n,i} \frac{\partial \hat{h}_{n,i}}{\partial l_{ni}})}{A^2}$$

$$\text{si } \begin{matrix} n=j+1 \\ m \neq i \end{matrix} \quad \frac{\partial G_j}{\partial l_{ni}} = 0$$

$$\text{si } \begin{matrix} n=j-1 \\ m \neq i \end{matrix} \quad \frac{\partial G_j}{\partial l_{nm}} = \frac{-B(\hat{h}_{nm} + l_{ni} \frac{\partial \hat{h}_{ni}}{\partial l_{nm}})}{A^2}$$

$$\text{si } \begin{matrix} n < j-1 \text{ y } n > j+1 \\ m = i \text{ y } m \neq i \end{matrix} \quad \frac{\partial G_j}{\partial l_{nm}} = 0$$

$$* \frac{\partial G_j}{\partial V_{nm}} :$$

$$\text{si } \begin{matrix} n=j \\ m=i \end{matrix} \quad \frac{\partial G_j}{\partial V_{ji}} = \frac{\hat{H}_{ji} + V_{ji} \frac{\partial \hat{H}_{ji}}{\partial V_{ji}}}{A}$$

$$\text{si } \begin{matrix} n=j \\ m \neq i \end{matrix} \quad \frac{\partial G_j}{\partial V_{jm}} = \frac{\hat{H}_{jm} + V_{jm} \frac{\partial \hat{H}_{jm}}{\partial V_{jm}}}{A}$$

$$\text{si } \begin{matrix} n=j+1 \\ m=i \end{matrix} \quad \frac{\partial G_j}{\partial V_{ni}} = \frac{-B(\hat{H}_{ni} + V_{ni} \frac{\partial \hat{H}_{ni}}{\partial V_{ni}})}{A^2}$$

$$\text{si } \begin{matrix} n=j-1 \\ m=i \end{matrix} \quad \frac{\partial G_j}{\partial V_{ni}} = 0$$

$$\text{si } \begin{matrix} n=j+1 \\ m \neq i \end{matrix} \quad \frac{\partial G_j}{\partial V_{nm}} = \frac{-B(\hat{H}_{nm} + V_{nm} \frac{\partial \hat{H}_{nm}}{\partial V_{nm}})}{A^2}$$

$$\text{si } \begin{matrix} n=j-1 \\ m \neq i \end{matrix} \quad \frac{\partial G_j}{\partial V_{nm}} = 0$$

$$\text{si } n < j-1 \text{ y } n > j+1 \\ m=i \text{ ó } m \neq i$$

$$\frac{\partial G_j}{\partial V_{nm}} = 0$$

$$* \frac{\partial G_j}{\partial T_n} :$$

$$\text{si } n=j \quad \frac{\partial G_j}{\partial T_j} = \frac{\sum_{i=1}^{NC} (V_{ji} \frac{\partial \hat{H}_{ji}}{\partial T_j} + l_{ji} \frac{\partial \hat{h}_{ji}}{\partial T_j})}{A}$$

$$\text{si } n=j+1 \quad \frac{\partial G_j}{\partial T_n} = \frac{-B \left(\sum_{i=1}^{NC} V_{ni} \frac{\partial \hat{h}_{ni}}{\partial T_n} \right)}{A^2}$$

$$\text{si } n=j-1 \quad \frac{\partial G_j}{\partial T_n} = \frac{-B \left(\sum_{i=1}^{NC} l_{ni} \frac{\partial \hat{h}_{ni}}{\partial T_n} \right)}{A^2}$$

$$\text{si } n < j-1 \\ n > j+1 \\ m=i \\ m \neq i \quad \frac{\partial G_j}{\partial T_n} = 0$$

Los cambios que hay en el Jacobiano para el caso de una columna de destilación convencional son:

- Balance de Materia:

a).- En la etapa 1 (condensador Parcial):

$$\begin{array}{l} \text{si } n=1 \\ m=1 \end{array} \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial l_{ji}} = -1.0 \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial v_{ji}} = -1.0$$

$$\text{si } m \neq i \text{ y } n > 1 \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial l_{nm}} = 0 \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial v_{nm}} = 0$$

$$\text{si } \begin{array}{l} n=2 \\ m=i \end{array} \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial l_{2i}} = 0 \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial v_{2i}} = 1.0$$

b).- En la etapa 1 (Condensador Total):

$$\text{si } \begin{array}{l} n=j \\ m=i \end{array} \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial l_{ji}} = - \left(1 + \frac{D}{L_1} \right) \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial v_{ji}} = 0$$

$$\text{si } \begin{array}{l} n=1 \\ m \neq i \end{array} \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial l_{1,m}} = 0 \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial v_{1,m}} = 0$$

$$\text{si } \begin{array}{l} n=2 \\ m=i \end{array} \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial l_{2i}} = 0 \quad \frac{\partial m_{ji}}{\partial v_{2i}} = 1.0$$

c).- Si la etapa es la última (Rehervidor):

$$\text{si } n=NP \quad \frac{\partial m_{NP,i}}{\partial l_{NP,i}} = -1 \qquad \frac{\partial m_{NP,i}}{\partial V_{NP,i}} = -1$$

$$\text{si } n=NP \quad \frac{\partial m_{NP,i}}{\partial l_{NP,m}} = 0 \qquad \frac{\partial m_{NP,i}}{\partial V_{NP,m}} = 0$$

$$\text{si } n=NP-1 \quad \frac{\partial m_{NP-1,i}}{\partial l_{n,i}} = 1.0 \qquad \frac{\partial m_{NP-1,i}}{\partial V_{n,i}} = 0$$

$$\text{si } m \neq i \quad \frac{\partial m_{n,i}}{\partial l_{n,i,m}} = 0 \qquad \frac{\partial m_{n,i}}{\partial V_{n,i,m}} = 0$$

-Relación de equilibrio:

-Si el condensador es total

$$\text{si } n=1 \quad \frac{\partial f_{j,i}}{\partial l_{j,i}} = \frac{L_1 (K_{j,i} + l_{j,i} \frac{\partial K_{j,i}}{\partial l_{j,i}}) - K_{j,i} l_{j,i}}{L_j^2}$$

$$\frac{\partial f_{j,i}}{\partial V_{j,i}} = \frac{l_{j,i}}{L_1} \frac{\partial K_{j,i}}{\partial V_{j,i}} - \frac{(V_1 - y_{j,i})}{V_1^2}$$

$$\text{si } n=j \quad \frac{\partial f_{j,i}}{\partial l_{j,m}} = \frac{L_1 (l_{j,m} \frac{\partial K_{j,i}}{\partial l_{j,m}}) - K_{j,i} l_{j,m}}{L_j^2}$$

$$\frac{\partial f_{ji}}{\partial v_{jm}} = \frac{l_{ji}}{L_1} \frac{\partial K_{ji}}{\partial v_{jm}} + \frac{Y_{ji}}{V_1}$$

- Balances de Energía: Si $A = \sum_{i=1}^{NC} V_{2i} \hat{H}_{2i}$

$$B = \sum_{i=1}^{NC} (V_{ji} \hat{H}_{ji} + l_{ji} \hat{h}_{ji}) + Q_c$$

* Si el condensador es Parcial:

$$\begin{matrix} n=j \\ m \neq i \text{ ó } m=i \end{matrix} \quad \frac{\partial G_1}{\partial l_{jm}} = \frac{(h_{jm} + l_{jm} \frac{\partial h_{jm}}{\partial l_{jm}})}{A}$$

$$\frac{\partial G_1}{\partial v_{jm}} = \frac{(V_{jm} \frac{\partial \hat{H}_{jm}}{\partial v_{jm}} + \hat{H}_{jm})}{A}$$

$$\begin{matrix} n=2 \\ m=i \text{ ó } m \neq i \end{matrix} \quad \frac{\partial G_1}{\partial l_{2m}} = 0$$

$$\frac{\partial G_1}{\partial v_{2m}} = \frac{-B (\hat{H}_{2m} + \frac{\partial \hat{H}_{2m}}{\partial v_{2m}} v_{2m})}{A^2}$$

$$\begin{matrix} n > j+1 \\ m=i \text{ ó } m \neq i \end{matrix} \quad \frac{\partial G_1}{\partial l_{nm}} = 0$$

$$\frac{\partial G_1}{\partial V_{nm}} = 0$$

$n=j$
 $m=i \text{ ó } m \neq i$

$$\frac{\partial G_1}{\partial T_j} = \frac{\sum_{i=1}^{NC} (V_{ji} \frac{\partial \hat{H}_{ji}}{\partial T_j} + I_{ji} \frac{\partial \hat{h}_{ji}}{\partial T_j})}{A}$$

$n=2$
 $m=i \text{ ó } m \neq i$

$$\frac{\partial G_1}{\partial T_n} = \frac{-B \left(\sum_{i=1}^{NC} V_{2i} \frac{\partial \hat{H}_{2i}}{\partial T_n} \right)}{A^2}$$

$n>2$
 $m=i \text{ ó } m \neq i$

$$\frac{\partial G_1}{\partial T_n} = 0$$

$n=1$
 $m=i \text{ ó } m \neq i$

$$\frac{\partial G_1}{\partial Q_C} = \frac{1}{A}$$

Si el condensador es total:

$$A = \sum_{i=1}^{NC} V_{2i} \hat{H}_{2i}$$

$$B = \sum_{i=1}^{NC} (I_{ji} \hat{h}_{ji} (\frac{D}{L_j} + 1)) + Q_c$$

$n=j$
 $m=i$ ó $m \neq i$

$$\frac{\partial G_1}{\partial I_{jm}} = \frac{(-\frac{D}{L_j} + 1) \hat{h}_{jm}}{A}$$

$$\frac{\partial G_1}{\partial V_{jm}} = 0$$

si $n=2$
 $m=i$ ó $m \neq i$

$$\frac{\partial G_1}{\partial I_{nm}} = 0$$

$$\frac{\partial G_1}{\partial V_{nm}} = \frac{-B (\hat{H}_{nm} + V_{nm} \frac{\partial \hat{H}_{nm}}{\partial V_{nm}})}{A^2}$$

si $n > 2$
 $m \neq i$ ó $m = i$

$$\frac{\partial G_1}{\partial l_{nm}} = 0$$

$$\frac{\partial G_1}{\partial v_{nm}} = 0$$

si $n = j$

$$\frac{\partial G_1}{\partial T_1} = \frac{\sum_{i=1}^{NC} l_{ji} \left(\frac{D}{L_j} + 1 \right) \frac{\partial \hat{h}_{ji}}{\partial T_j}}{A}$$

si $n = 2$

$$\frac{\partial G_1}{\partial T_n} = \frac{-B \sum_{i=1}^{NC} V_{2i} \frac{\partial \hat{H}_{2i}}{\partial T_n}}{A^2}$$

si $n > 2$

$$\frac{\partial G_1}{\partial T_n} = 0$$

si $n = 1$

$$\frac{\partial G_1}{\partial Q_c} = \frac{1}{A}$$

En la etapa NP (Rehervidor):

$$B = \sum_{i=1}^{NC} (V_{NPi} \hat{H}_{NPi} + I_{NPi} \hat{h}_{NPi})$$

$$A = \sum_{i=1}^{NC} (I_{NP-1,i} \hat{h}_{NP-1,i}) + Q_R$$

si $n=NP$
 $m=i$ y $m \neq i$

$$\frac{\partial G_{NP}}{\partial I_{nm}} = \frac{\sum_{i=1}^{NC} (\hat{h}_{nm} + I_{nm} \frac{\partial \hat{h}_{nm}}{\partial I_{nm}})}{A}$$

$$\frac{\partial G_{NP}}{\partial V_{nm}} = \frac{\sum_{i=1}^{NC} (\hat{H}_{nm} + V_{nm} \frac{\partial \hat{H}_{nm}}{\partial V_{nm}})}{A}$$

si $n=NP-1$
 $m=i$ ó $m \neq i$

$$\frac{\partial G_{NP}}{\partial I_{nm}} = \frac{-B \sum_{i=1}^{NC} (\hat{h}_{nm} + I_{nm} \frac{\partial \hat{h}_{nm}}{\partial I_{nm}})}{A^2}$$

$$\frac{\partial G_{NP}}{\partial V_{nm}} = 0$$

si $n=NP$
 $m=1$ ó $m \neq 1$

$$\frac{\partial G_{NP}}{\partial T_n} = \frac{\sum_{i=1}^N (v_{nm} \frac{\partial \hat{H}_{nm}}{\partial T_n} + l_{nm} \frac{\partial \hat{h}_{nm}}{\partial T_n})}{A}$$

si $n=NP-1$

$$\frac{\partial G_{NP}}{\partial T_n} = \frac{-B \left(\sum_{i=1}^{NC} l_{nm} \frac{\partial \hat{h}_{nm}}{\partial T_n} \right)}{A^2}$$

si $n < NP-1$

$$\frac{\partial G_{NP}}{\partial T_n} = 0$$

si $n=NP$

$$\frac{\partial G_{NP}}{\partial Q_R} = \frac{-B}{A^2}$$

- Balances de materia en la Etapa de Alimentación y la Anterior:

si $n=NF$
 $m=i$

$$\frac{\partial m_{ni}}{\partial l_{nm}} = -1$$

$$\frac{\partial m_{ni}}{\partial l_{nm}} = -1$$

si $n=NF-1$
 $m=i$

$$\frac{\partial m_{ni}}{\partial l_{nm}} = -1$$

$$\frac{\partial m_{ni}}{\partial v_{nm}} = -1$$

si $n=NF-2$
 $m=i$

$$\frac{\partial m_{ni}}{\partial l_{nm}} = 1.0$$

$$\frac{\partial m_{ni}}{\partial v_{nm}} = 0$$

si $n=NF+1$
 $m=i$

$$\frac{\partial m_{ni}}{\partial l_{nm}} = 0$$

$$\frac{\partial m_{ni}}{\partial v_{nm}} = 1$$

-Para las nuevas funciones:

$$n=1$$

$$m=i \text{ ó } m \neq i$$

a).- Condensador Parcial

$$\frac{\partial S_1}{\partial I_{nm}} = \frac{1}{L_1}$$

$$\frac{\partial S_1}{\partial Y_{nm}} = 0$$

b).- Condensador Total

$$\frac{\partial S_1}{\partial I_{nm}} = 0$$

$$\frac{\partial S_1}{\partial Y_{nm}} = 1$$

$$n=NP$$

$$m=i \text{ ó } m \neq i$$

$$\frac{\partial S_{NP}}{\partial I_{n,m}} = \frac{1}{L_{NP}}$$

$$\frac{\partial S_{NP}}{\partial V_{nm}} = 0$$

n=Etapa de extracción

$$m=i \text{ ó } m \neq i$$

$$\frac{\partial F_{\sigma nm}}{\partial I_{nm}} = \frac{\sigma}{U_n}$$

$$\frac{\partial F_{\sigma nm}}{\partial V_{nm}} = 0$$

$$\frac{\partial F_{1\sigma nm}}{\partial I_{nm}} = 0$$

$$\frac{\partial F_{2\sigma nm}}{\partial V_{nm}} = \frac{\sigma}{W_n}$$

CAPITULO IV

ALGORITMO PROPUESTO

-Introducción:

El principal objetivo del Algoritmo Propuesto es lograr que el jacobiano no incremente su número de elementos al añadir varias alimentaciones y extracciones laterales, además, se pretende que el sistema esté lo suficientemente linealizado⁷ con el objeto de que el número de iteraciones necesarias para llegar a la solución sea mínimo.

Por otra parte se pretende que el cálculo del decantador cuando hay presencia de dos fases líquidas^{5,12,14}, no introduzca nuevas variables y por ende nuevas ecuaciones; sino, con siderar un decantador perfecto no ideal con lo que se reduce una variable independiente en el sistema pues el flujo de reflujo está fijado por la Termodinámica en el cálculo del equilibrio con dos fases líquidas.

No se plantea el caso de un decantador parcial en cuyo caso el reflujo sería nuevamente una variable independiente.

-El Algoritmo Propuesto:

El Algoritmo Propuesto propone las siguientes modificaciones a las ecuaciones de balance de Materia y Energía con el objeto de hacerlo versátil para simular cualquier equipo de transferencia de masa con cualquier configuración y además hay opción de introducir caída de presión por plato.

a) Balances de Materia por Componente:

$$\left(1 + \frac{U_j}{L_j}\right) l_{j,i} + \left(1 + \frac{W_j}{V_j}\right) v_{j,i} - v_{j+1,i} - l_{j-1,i} - l_{Fj,i} - v_{Fj+1,i} = 0$$

$$j=1, NP$$

$$i=1, NC$$

b) Balances de Energía:

$$\sum_{i=1}^{NC} v_{j+1,i} \hat{H}_{j+1,i} + l_{j-1,i} \hat{h}_{j-1,i} + l_{Fj,i} \hat{h}_{Fj,i} + v_{Fj+1,i} \hat{H}_{Fj+1,i} - \left(1 + \frac{U_j}{L_j}\right)$$

$$l_{j,i} \hat{h}_{j,i} - \left(1 + \frac{W_j}{V_j}\right) \hat{H}_{j,i} + Q_j = 0$$

$$j=1, NP$$

$$i=1, NC$$

La modificación que se hace en las funciones para columnas de destilación son:

-Condensador Parcial:

$$S_1 = L_N \left(\sum_{i=1}^{NC} \frac{I_{1i}}{L_1} \right)$$

$$S_{NP} = L_H \left(\sum_{i=1}^{NC} \frac{I_{NPi}}{L_{NP}} \right)$$

Condensador Total:

$$S_1 = L_N \left(\sum_{i=1}^{NC} Y_{1i} \right)$$

$$S_{NP} = L_N \left(\sum_{i=1}^{NC} \frac{I_{NP,i}}{L_{NP}} \right)$$

-Cambios de Variable y Aceleración de la Convergencia

Con el objeto de buscar la linealización⁷ del sistema y por ende acelerar la convergencia se estudian varios cambios de variables para el caso de la Temperatura que es una de las variables independientes. Estos cambios son:

1.- T

2.- $\ln(T)$

3.- $T^{\left(\frac{1}{k}\right)}$

Esto se puede hacer sin ningún problema ya que las derivadas con respecto a la Temperatura de todas las ecuaciones involucradas se realizan de manera numérica.

Las derivadas numéricas con respecto a cada uno de los cambios de variable son: (como se observa se usa tamaño de paso implícito k)

a) Si el parámetro es $\frac{1}{T}$

$$f'(T) = \frac{f(T/k) - f(T)}{(k-1)T}$$

$$T = \frac{1}{\frac{1}{T} + \Delta T}$$

b) Si el parámetro es $l_n(T)$:

$$f'(T) = \frac{f(T^K) - f(T)}{(K-1) l_n(T)}$$

$$T = e^{(L_n(T) + \Delta T)}$$

c) Si el parámetro es $T^{\left(\frac{1}{a}\right)}$

$$f'(T) = \frac{f(K^a T) - f(T)}{(K-1) T^{\frac{1}{a}}}$$

$$T = \left(T^{\left(\frac{1}{a}\right)} + \Delta T \right)^a$$

Se muestra un ejemplo corrido con cada uno de los parámetros de iteración en donde se puede ver la diferencia en el número de iteraciones para obtener la solución. En todos los casos se considera que $K = 1.000001$.

Por otra parte, para acelerar la convergencia independientemente del parámetro de iteración que se utilice para el caso de la Temperatura, se hace un truncamiento para evitar que el ΔT sea mayor a $18^\circ R$ y este truncamiento es:

$$\text{Si } T: \quad \text{Si } \Delta T > \left(\frac{18+T}{T_j} \right) \dots \dots \Delta T = \left(\frac{18+T}{T_j} \right) * \frac{\text{ABS}(\Delta T)}{\Delta T}$$

$$\text{Si } l_n(T): \quad \text{Si } \Delta T > l_n \left(\frac{T_j + 18}{T_j} \right) \dots \dots \Delta T = l_n \left(\frac{18+T}{T_j} \right) * \frac{\text{ABS}(\Delta T)}{\Delta T}$$

Para el caso de los flujos de líquidos y vapor por componente y por plato se hace el siguiente truncamiento:

$$\text{Si } \Delta l \text{ ó } \Delta V \text{ son mayores a } R \sum_{i=1}^{NC} F_{ji} : \quad \begin{matrix} j=1, NP \\ i=1, NC \end{matrix}$$

donde R = relación de reflujo
 F_{ji} = alimentación de componente en el plato j

$$\Delta l_{ji}^* = \frac{\text{ABS}(\Delta l_{ji})}{\Delta l_{ji}} * \frac{R \sum F_{ji}}{\Delta l_{ji}}$$

$$\Delta V_{ji}^* = \frac{\text{ABS}(\Delta V_{ji})}{\Delta V_{ji}} * \frac{R \sum F_{ji}}{\Delta V_{ji}}$$

y si todavía l_{ji} y/o $V_{ji} < 0$ entonces:

$$l_{ji} = 0.001$$

$$V_{ji} = 0.001$$

Con lo anterior se evita trabajar con flujos negativos lo cual le da mayor estabilidad al algoritmo y se cumple con el requerimiento del algoritmo original de Almost Band, trabajar con flujos positivos.

Decantador Perfecto (separaciones Heterogéneas):

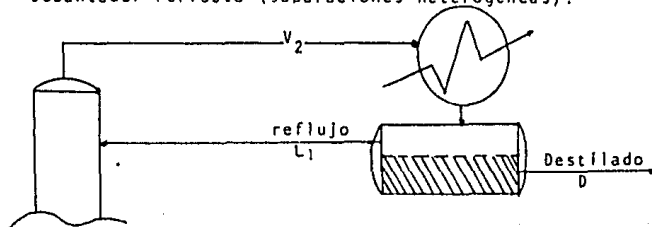


Fig. 8 Separación heterogénea

Para el caso del Decantador después de que se hace una -- iteración de la torre con el vapor del plato 2, se hace un cálculo de punto de burbuja y se regresa como reflujo la fase de Interés (1 ó 2) la cual es fijada por el usuario y de esta forma se evita introducir NC nuevas variables independientes sin embargo, se reduce una variable independiente al sistema.

Siempre antes de regresar el reflujo se hace un chequeo - de sí la fase que se regresa es rica en el componente que fija el usuario. El cálculo se hace por sustitución directa.

-Iniciación:

Los métodos de corrección simultánea presentan una desventaja muy significativa la cual radica en el hecho de que son - muy sensibles a los estimados iniciales de las variables de - iteración, lo cual hace de vital importancia llevar a cabo una buena iniciación, sin embargo, por otra parte, en ocasiones es difícil hacer un buen estudio para inicializar correctamente, de ahí, que en el presente trabajo se den formas seguras de iniciación que le eviten al usuario tener que llevar a cabo estudios de los sistemas antes de tratar de obtener una solución.

Las inicializaciones son las siguientes:

a) Método 1:

1.) Se obtiene una alimentación global adicionando todas las corrientes de alimentación. Se determinan sus temperaturas de

burbuja y de rocío a la presión del domo y del fondo primeramente utilizando K ideales y después mediante modelos rigurosos. El perfil de temperaturas se obtiene interpolando linealmente entre estos valores.

2.) Se escoge como componente clave aquél que tiene una volatilidad media en la mezcla global y entónces se obtienen volatilidades promedio a la temperatura promedio de la torre.

3.-) Se resuelve la torre de domo a fondo empleando el método propuesto por Lewis-Matheson¹ el cual fue modificado para los casos en donde están fijas las etapas y las etapas de alimentación y de extracción. Solamente se hace una iteración con este método

b) Método II:

1.) Se obtiene una alimentación global adicionando todas las corrientes de alimentación. Se determinan sus temperaturas de burbuja y de rocío a la presión del domo y del fondo empleando K 's ideales y después se recalculan estos puntos con K 's rigurosos.

2.) Se genera un perfil lineal de Temperatura.

3.) Se calcula constantes ideales por plato y componente.

4.) Se calculan perfiles lineales de flujos totales de líquido y de vapor hasta que haya extracciones y/o alimentaciones.

5.) Se obtienen flujos de vapor por componente y por plato empleando el algoritmo de Thomas¹⁷ para resolver la matriz tridimensional del sistema de ecuaciones.

$$A_{ij} V_{j,j-1} + B_{ij} V_{ij} + C_{ij} V_{i,j+1} = D_{ij}$$

6.) Se obtienen los flujos de líquidos por componente y por plato mediante las relaciones de equilibrio.

$$K_{ji} = \frac{V_{ji}}{L_{ji}} \quad j=1, NP \quad \text{ó} \quad 2, NP$$

7.) Si el separador es heterogéneo se calcula el punto de burbuja con V_1 . Se hace un cálculo de las cargas térmicas de condensador y de rehvridor si éstas son variables.

c) Método III:

El usuario introduce perfil de flujos líquido ó vapor y temperatura.

Esta opción es muy útil para el caso de absorbedores y agotadores con calor.

-Metodología de cálculo:

- 1°) Se calcula la condición térmica de cada una de las alimentaciones a la torre.
- 2°) Se utiliza cualquier método de Inicialización.
- 3°) Se calculan las funciones MESH.¹⁷
- 4°) Se obtiene la norma euclídea y se verifica si es menor a la tolerancia en cuyo caso finaliza el cálculo.
- 5°) Se resuelve el sistema de ecuaciones MESH empleando el método de Broyden.
- 6°) Se corrigen flujos negativos y se normalizan las fracciones mol por componente y por plato.
- 7°) Se verifica si los valores absolutos del cambio de Temperatura así como del cambio de cargas si son menores a tolerancias preestablecidas. Si no sucede esto, se corrigen.
- 8°) Se calcula el flujo y la composición del reflujo verificando que se regresa la fase de interés para el usuario y se verifica si $L_{jk-1} \approx L_{jk}$ y se checa la carga del condensador.

-Comparación del Algoritmo Propuesto con el Algoritmo de Almost Band:

La principal modificación radica en las torres con configuración compleja y en los separadores heterogéneos ya que el Algoritmo Propuesto reduce sustancialmente el número de variables independientes y por ende el Jacobiano del sistema; ya que el Algoritmo Almost Band original introduce una nueva ecuación y una nueva incógnita por cada alimentación y/o extracción lateral.

Además para separadores heterogéneos también introduce una nueva ecuación y NC nuevas variables independientes.

El Algoritmo original presenta para un sistema heterogéneo con N alimentaciones y N extracciones:

$$NP(2NC + 1) + 2 + NP + HC \text{ ecuaciones}$$

El Algoritmo Propuesto siempre requerirá $NP(2HC+2)$ ecuaciones y en el caso de separadores heterogéneos se usa el bloque externo de convergencia descrito anteriormente.

Con esto se obtiene un sustancial ahorro de tiempo de cómputo y además una cierta estabilidad en el sistema.

CAPITULO V

USO DEL PROGRAMA

-Acceso al Banco de Datos:

El usuario, dependiendo de las correlaciones de equilibrio y de entalpías que haya escogido, cuenta con 4 diferentes archivos los cuales son:

1.) Archivo que contiene datos de T_c , P_c y W de componentes puros para hacer uso de ecuaciones de estado.
2.) Archivo que cuenta con datos de componentes puros y de parámetros binarios para el modelo de NRTL
3.) Archivo que cuenta con datos de componentes puros y parámetros binarios para el modelo de UNIQUAC.
4.) Si se corre idealmente se requieren las constantes de Antoine y constantes de los polinomios de entalpía líquido y vapor.

De esta forma mediante una subrutina de lectura se leen los datos para la correlación que haya escogido.

→ Acceso de las configuraciones de las torres

Se debe hacer un archivo del cual con formato fijo se leen los siguientes datos:

- 1 FECHA CORRELACION DE EQUILIBRIO Y ENTALPIAS.
- 2 NUMERO DE PLATOS, NUMERO DE COMPONENTES, TIPO DE CALCULO
TIPO DE CONDENSADOR, NUMERO DE ALIMENTACIONES, NUMERO DE
EXTRACCIONES DE LIQUIDO Y/O VAPOR, NUMERO DE ADICIONES
Y/O EXTRACCIONES DE CALOR, TEMPERATURA ESTIMADA DEL DOMO
(°R) Y TEMPERATURA ESTIMADA DEL FONDO (°R)
- 3 FLUJO DEL REFLUJO, FLUJO DEL FONDO, PRESION DE OPERACION
CARGA DEL CONDENSADOR, CARGA DEL REHEVIDOR , RELACION DE -
REFLUJO (L/D), FLUJO DE DESTILADO.
- 4 LECTURA DE LAS ALIMENTACIONES (van tantos renglones como
alimentaciones con el siguiente formato:

PLATO DE ALIMENTACION, FLUJO DE LA ALIMENTACION,
TEMPERATURA

 y un renglón con las composiciones Z_i de la alimenta-
ción
- 5 Lectura de extracciones liquido y/o vapor: Van tantos --
renglones como extracciones con el siguiente formato:

PLATO DE EXTRACCION, FLUJO EXTR. LIQ. FLUJO EXTR.
VAPOR
- 6 Lectura de adiciones de calor: Van tantos renglones -

como adiciones con el siguiente formato:

Plato, Carga Extraída (·) ó Carga Adicionada (+)

-Variables de Entrada:

FECHA: DD/MM/AA

NC: NUMERO DE COMPONENTES

NP: NUMERO DE PLATOS

ICOND: TIPO DE CONDENSADOR: (1)-TOTAL

(2) PARCIAL

ITPO: TIPO DE CALCULO: (1)- Se especifica Flujo de Reflujo y de Fondos (1 lbmol/hr)

(2) Se especifica Carga Térmica del rehervidor y del condensador ($\frac{BTU}{hr}$)

NALIM: NUMERO DE ALIMENTACIONES A LAS TORRES

NEXTR: NUMERO DE EXTRACCIONES LIQ. Y/O VAPOR

NDAC: NUMERO DE EXTRACCIONES O ADICIONES DE CALOR

TD: TEMPERATURA ESTIMADA DEL DOMO (°R)

TF: TEMPERATURA ESTIMADA DEL FONDO (°R)

LT1: FLUJO DE REFLUJO $\frac{lbmol}{hr}$

LTNP: FLUJO DE FONDOS $\frac{lbmol}{hr}$

P: PRESION DE OPERACION (lb/in² abs)

QC: CARGA DEL CONDENSADOR $\frac{BTU}{hr}$

QR: CARGA DEL REHERVIDOR $\frac{BTU}{hr}$

R: RELACION DE FLUJO

DEST: FLUJO DE DESTILADO lbmol/hr

ALIM(50): FLUJO DE ALIMENTACION (Lbmol/hr)

TAMH(60) TEMPERATURA DE LA ALIMENTACION (°R)

ZZ(60,20): COMPOSICION MOLAR EN EL PLATO I DEL COMPONENTE J

EPL(60): EXTRACCION DEL LIQUIDO lbmol/hr

EPV(60): EXTRACCION DE VAPOR lbmol/hr

EOAC: ADICION DE CALOR

-Variables de Diseño -

Se puede modificar fácilmente el archivo para mover el número de platos el plato de alimentación, el reflujo y/o el destilado.

Además, la corrida se puede hacer teniendo como variables Q_c y Q_r fijando flujo de reflujo y flujo de fondos ó bien fijar Q_c y Q_r y emplear como variables flujo de reflujo y flujo de fondos. Además, se puede utilizar condensador total o parcial. El cambio de variables de diseño se hace fácilmente modificando las variables de control de cálculo (ITIPO).

CONCLUSIONES

Del trabajo desarrollado se pueden obtener las siguientes conclusiones:

a) El Algoritmo Propuesto simula satisfactoriamente las torres de destilación heterogéneas estudiadas observándose que el algoritmo fue suficientemente estable sobre todo con la inicialización número 11.

b) La incorporación de la Caída de presión por etapa hace posible que la simulación sea más realista. Por otra parte, permite que se den caídas de presión diferente al condensador y al rehervidor.

c) El cálculo de equilibrio L-L-V fue lo suficientemente estable por lo que permitió obtener soluciones incluso con inicializaciones no buenas. Asimismo debido a la linealización del sistema se consume muy poco tiempo de cómputo.

d) El hecho de no evaluar el Jacobiano en cada iteración y que además solo se evalúen los elementos diferentes de cero hace que el algoritmo sea competitivo en cuanto a CPU con otros.

e) Los cambios de variables permiten lograr una linealización del sistema lo cual se refleja en muy pocas iteraciones (10 a 15) para obtener la solución.

f) El Algoritmo Propuesto, por su planteamiento, se puede aplicar para destilación convencional, destilación azeotrópica, destilación extractiva, separadores heterogéneos, absorción y agotamiento con ó sin rehervidor, y rectificación con ó sin condensador.

g) La facilidad para manipular las variables de diseño hace que, sin ser su objetivo, este algoritmo pueda usarse con fines didácticos.

h) Por la forma de su creación. estructurada modular, hacen que este programa se le puedan incorporar fácilmente módulos de control estilo "case study" y graficación.

A P E N D I C E A
F U N C I O N E S E R R O R

FUNCIONES ERROR ESTUDIADAS:

EQUILIBRIO LIQUIDO-LIQUIDO:

- 1) $\ln (\Sigma X_1 * \Sigma X_2)$
- 2) $\ln (\Sigma X_1 / \Sigma X_2)$
- 3) $\Sigma X_1 - \Sigma X_2$

EQUILIBRIO LIQUIDO-LIQUIDO-VAPOR:

- 1) $\Sigma X_1 - \Sigma X_2$
 $\Sigma X_2 - \Sigma Y$
- 2) $\ln (\Sigma X_1 / \Sigma Y)$
 $\ln (\Sigma X_2 / \Sigma Y)$
- 3) $\ln (\Sigma X_1 * \Sigma Y)$
 $\ln (\Sigma X_1 * \Sigma X_2)$
- 4) $\ln (\Sigma X_1 * \Sigma Y)$
 $\ln (\Sigma X_2 * \Sigma Y)$

LAS MAS ESTABLES:

- 1) $\ln (\Sigma X_1 / \Sigma Y)$
 $\ln (\Sigma X_2 / \Sigma Y)$
- 2) $\ln (\Sigma X_1 * \Sigma Y)$
 $\ln (\Sigma X_2 * \Sigma X_1)$

SIN EMBARGO DE LAS DOS LA MAS ESTABLE FUE:

$\ln (\Sigma X_1 * \Sigma Y)$ y $\ln (\Sigma X_2 * \Sigma X_1)$

A P E N D I C E B

CONVERGENCIA CON DIFERENTES PARAMETROS DE
ITERACION

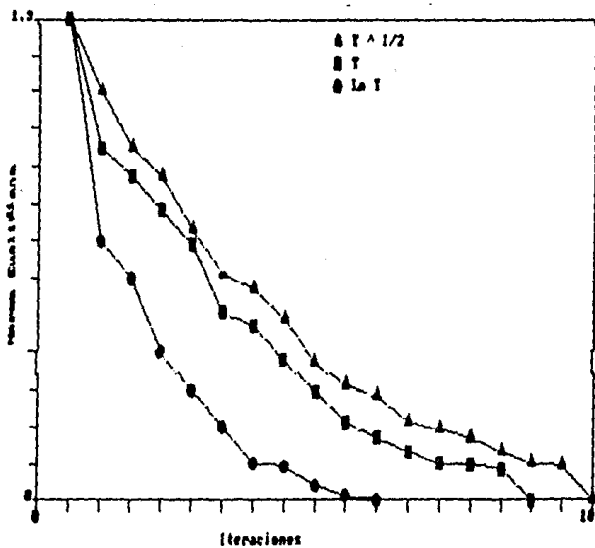


Fig. 9 Convergencia de la Columna Metanol Agua 10 platos y columna convencional.

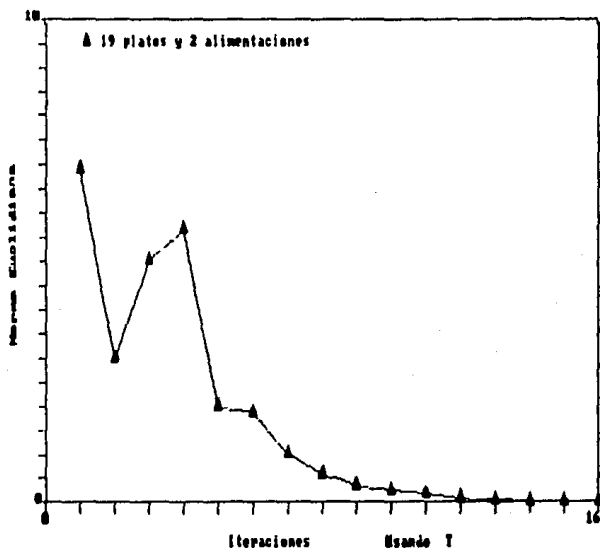


Fig. 10 Convergencia de la Columna tolueno Fenol, 19 platos y dos alimentaciones.

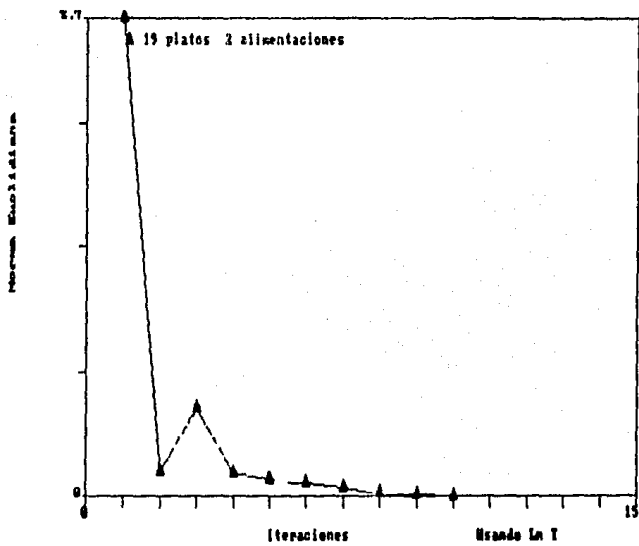


Fig 11 Convergencia de la Torre Tolueno Fenol Ciclo hexano. 19 platos y 2 alimentaciones.

A P E N D I C E C

COMPARACION DEL ALGORITMO PROPUESTO CON OTROS
METODOS

- Comparación con el Método de Wang Henke (método de partición):

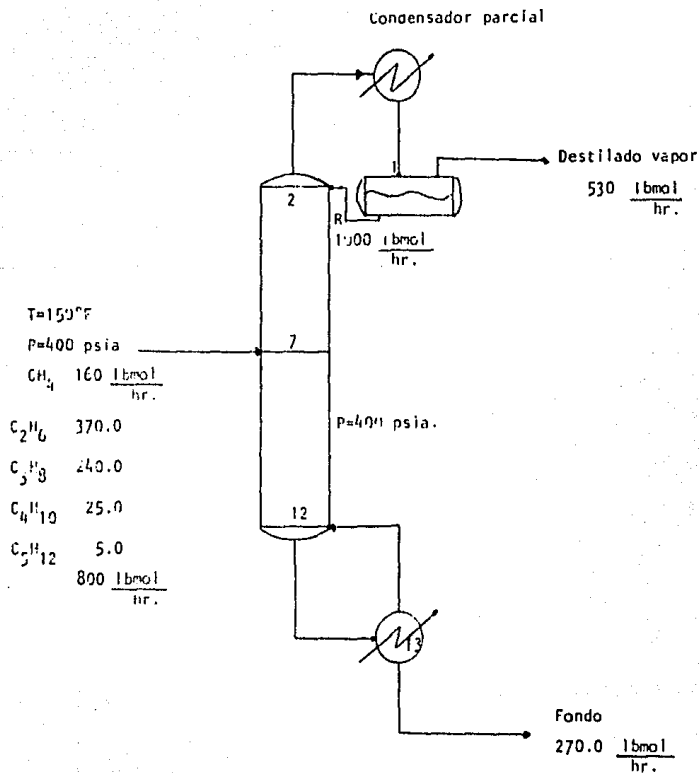
Ejemplo 1	Método	Iteraciones
	Wang-Henke	48
	Almost-Band	23
	Propuesto	14
 Ejemplo 2		
	Wang-Henke	40
	Almost-Band	25
	Propuesto	16
 Ejemplo 4		
	Wang-Henke	n
	Almost-Band	24
	Propuesto	15
 Ejemplo 5		
	Wang-henke	n
	Almost-band	28
	Propuesto	22

* no convergió con ese sistema.

A P E N D I C E D

P R O B L E M A S E S T U D I A D O S

NOTA: CON EL ALGORITMO PROPUESTO SE HAN CORRIDO UN GRAN NUMERO DE TORRES ENTRE EJEMPLOS DE LIBROS, REVISTAS Y PROYECTOS REALES; DE LOS CUALES SE ESCOGIERON LOS PRESENTES 5 EJEMPLOS POR CONSIDERARSE REPRESENTATIVOS DE LOS PROBLEMAS QUE SE PUEDAN ENCONTRAR CUANDO SE TRATA DE HACER CONVERGER UNA TORRE.



DATOS EJEMPLO 1

EMPRESA INDUSTRIAL SIMULACION DE COLUMNAS ENERO 1967
 TERCER PROFESIONAL DE DESTILACION CON EL- L. DEL S.
 ALGORITMO PROPOSTO

DESTILACION DE :

METANO

ETANO

PROPANO

N-BUTANO

N-PENTANO

PRESTION DE OPERACION= 0.40000+03

COMPOSICION DE ALIMENTACION :

METANO 0.20000+00

ETANO 0.46250+00

PROPANO 0.30000+00

N-BUTANO 0.31250-01

N-PENTANO 0.62500-02

PLATO DE ALIMENTACION= 5

V/F ALIMENTACION= 0.10000+01

TEMPERATURA DE LA ALIMENTACION = 0.56500+03 °

ALIMENTACION A LA TORRE= 0.40000+03 L/MOL/HR

DESTILADO= 0.53000+03 L/MOL/HR

REFLUJO(CLI/D)= 0.10000+01

PLATO	TEMPERATURA(°C)	LI(L3MOL/HR)	VT(L3MOL/HR)
1	0.47640+03	0.10000+04	0.53000+03
2	0.43710+03	0.34290+03	0.15300+04
3	0.51550+03	0.88490+03	0.14730+04
4	0.53460+03	0.21010+03	0.14150+04
5	0.54550+03	0.31750+03	0.54010+04
6	0.5530+03	0.32530+03	0.55020+03
7	0.56350+03	0.21490+03	0.55430+03
8	0.57530+03	0.42260+03	0.54590+03
9	0.5850+03	0.51440+03	0.55280+03
10	0.59720+03	0.33710+03	0.54460+03
11	0.60070+03	0.30630+03	0.56910+03
12	0.61500+03	0.25330+03	0.54130+03
13	0.61540+03	0.37000+03	0.58330+03

Q REHEVIDOR= 0.3200+07 BTU/HR Q CONDENSADOR= 0.49790+07 BTU/HR

RESULTADOS DEL PLATO 1:

L(L3MOL/HR)	V(L3MOL/HR)
0.63420+02	0.16000+03
0.96720+03	0.16320+03
0.66317+02	0.16150+01
0.16410+01	0.19390-04
0.14337+01	0.19370-04

RESULTADOS DEL PLATO 2:

L(L3MOL/HR)	V(L3MOL/HR)
0.25430+02	0.22340+03
0.76360+03	0.12300+04
0.16050+03	0.73137+02
0.22930+01	0.16390+01
0.11040+01	0.14040+01

RESULTADOS DEL PLATO 3:

L(L3MOL/HR)	V(L3MOL/HR)
0.19410+02	0.13550+03
0.57230+03	0.11170+04
0.29450+03	0.16730+03
0.75660+01	0.22360+01
0.11100+01	0.10690+01

RESULTADOS DEL PLATO 4:

L(L3MOL/HR)	V(L3MOL/HR)
0.16670+02	0.17940+03
0.39960+03	0.93550+03
0.37090+03	0.29140+03
0.29530+02	0.75630+01
0.57330+01	0.10750+01

RESULTADOS DEL PLATO 5:

L(L3MOL/HR)	V(L3MOL/HR)
0.39100+01	0.16700+02
0.39320+03	0.39180+03
0.40150+03	0.13730+03
0.26350+02	0.35470+01
0.29030+01	0.75460+00

RESULTADOS DEL PLATO 6:

L(L3MOL/HR)	V(L3MOL/HR)
0.14230+01	0.39767+01
0.34720+03	0.37450+03
0.44170+03	0.16650+03
0.29920+02	0.13500+01
0.60130+01	0.10000+03

RESULTADOS DEL PLATO 7:

L(LEMOG/L/HR)	V(LEMOG/L/HR)
0.15000+00	0.1530+01
0.29140+03	0.34040+03
0.45040+03	0.30860+03
0.28970+02	0.45200+01
0.40930+01	0.37540+00

RESULTADOS DEL PLATO 8:

L(LEMOG/L/HR)	V(LEMOG/L/HR)
0.31530+00	0.17720+00
0.23120+03	0.27460+03
0.55340+03	0.25720+03
0.31530+02	0.37700+01
0.60590+01	0.10000+03

RESULTADOS DEL PLATO 9:

L(LEMOG/L/HR)	V(LEMOG/L/HR)
0.10000+03	0.34410+00
0.16630+03	0.22440+03
0.61150+03	0.32020+03
0.31670+02	0.56270+01
0.47360+01	0.10240+01

RESULTADOS DEL PLATO 10:

L(LEMOG/L/HR)	V(LEMOG/L/HR)
0.21010+03	0.10000+03
0.11510+03	0.12350+03
0.57510+03	0.27340+03
0.27770+02	0.65330+01
0.10230+02	0.10000+03

RESULTADOS DEL PLATO 11:

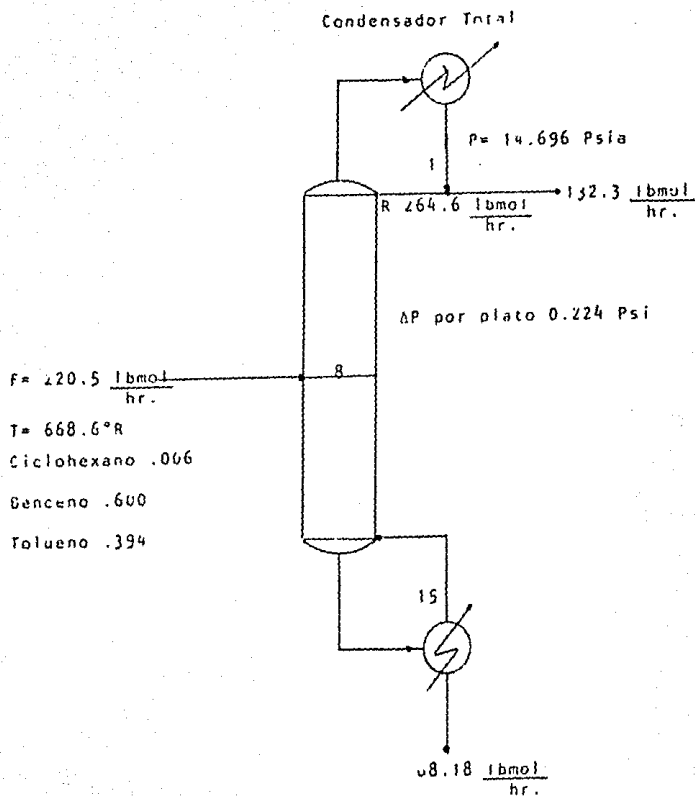
L(LEMOG/L/HR)	V(LEMOG/L/HR)
0.10000+03	0.23350+00
0.67640+02	0.10230+03
0.70730+03	0.44300+03
0.30230+02	0.12370+02
0.10000+03	0.52450+01

RESULTADOS DEL PLATO 12:

L(LEMOG/L/HR)	V(LEMOG/L/HR)
0.10110+01	0.10000+03
0.44050+02	0.60930+02
0.75210+03	0.47470+03
0.47710+02	0.59260+01
0.92600+01	0.10000+03

RESULTADOS DEL PLATO 13:

L(L=MSL/HZ)	V(L=MSL/HZ)
0.99990-04	0.10170+01
0.68040+01	0.37240+02
0.23320+03	0.51890+03
0.25600+02	0.22910+02
0.50340+01	0.32260+01



DATOS EJEMPLO 2

PROYECTO INDUSTRIAL
TITULO PROPOSICIONAL

SIMULACION DE COLUMNAS
DE DESTILACION CON EL
ALGORITMO PROPOSTO

ENERO 1987
L. DEL D.

DESTILACION DE :

CICLOHEXANO

BENCENO

TOLUENO

PRESION EN CONDENSADOR= 0.14700+02 LB/IN2A

CAIDA DE PRESION POR PLATO= 0.24400+00 LB/IN2A

DESTILADO= 0.13230+01 LBMQL/HR

REFLUJO(LLI/O)= 0.20000+01

COMPOSICION DE ALIMENTACION AL PLATO : .8

CICLOHEXANO 0.60000+02

BENCENO 0.60000+00

TOLUENO 0.39400+00

V/F ALIMENTACION= 0.00000+00

TEMPERATURA DE LA ALIMENTACION = 0.66860+03 R

ALIMENTACION A LA TORPE= 0.22050+03 LBMQL/HR

=====

SIMULACION DE COLUMNAS
DE DESTILACION CON EL
ALGORITMO PROQUEST

PLATO	TEMPERATURA(C)	LT(LBMOL/HR)	VT(LBMOL/HR)
1	0.63330+03	0.26450+03	0.00000+00
2	0.64440+03	0.27050+03	0.39680+03
3	0.65550+03	0.27640+03	0.40270+03
4	0.66660+03	0.28240+03	0.40860+03
5	0.67770+03	0.28840+03	0.41450+03
6	0.68880+03	0.29440+03	0.42040+03
7	0.69990+03	0.30040+03	0.42630+03
8	0.71100+03	0.30640+03	0.43220+03
9	0.72200+03	0.31240+03	0.43810+03
10	0.73300+03	0.31840+03	0.44400+03
11	0.74400+03	0.32440+03	0.44990+03
12	0.75500+03	0.33040+03	0.45580+03
13	0.76600+03	0.33640+03	0.46170+03
14	0.77700+03	0.34240+03	0.46760+03
15	0.78800+03	0.34840+03	0.47350+03

Q REHEVIEROGR= 0.53310+07 BTU/HR Q CONDENSADOR= 0.53730+07 BTU/HR

RESULTADOS DEL PLATO 1:		RESULTADOS DEL PLATO 2:		RESULTADOS DEL PLATO 3:	
L(LB4QL/HR)	V(LB4QL/HR)	L(LB4QL/HR)	V(LB4QL/HR)	L(LB4QL/HR)	V(LB4QL/HR)
0.25250+01	0.99230-02	0.42210+01	0.32180+01	0.19170+01	0.35330+01
0.25320+03	0.97600+00	0.25390+03	0.38730+03	0.24900+03	0.33800+03
0.37200+01	0.14060-01	0.73240+01	0.55800+01	0.17450+02	0.11180+02

RESULTADOS DEL PLATO 4:		RESULTADOS DEL PLATO 5:		RESULTADOS DEL PLATO 6:	
L(LB4QL/HR)	V(LB4QL/HR)	L(LB4QL/HR)	V(LB4QL/HR)	L(LB4QL/HR)	V(LB4QL/HR)
0.14990+01	0.32370+01	0.15130+01	0.30120+01	0.13530+01	0.28310+01
0.23450+03	0.37310+03	0.21530+03	0.36360+03	0.19280+03	0.34440+03
0.30270+02	0.19720+02	0.44750+02	0.31130+02	0.56300+02	0.49510+02

RESULTADOS DEL PLATO 7:		RESULTADOS DEL PLATO 8:		RESULTADOS DEL PLATO 9:	
L(LB4QL/HR)	V(LB4QL/HR)	L(LB4QL/HR)	V(LB4QL/HR)	L(LB4QL/HR)	V(LB4QL/HR)
0.12020+01	0.26650+01	0.13300+01	0.25140+01	0.14930+01	0.19800+01
0.16970+03	0.32190+03	0.27590+03	0.29890+03	0.23910+03	0.27270+03
0.36730+02	0.53160+02	0.17560+03	0.33510+02	0.23000+03	0.11060+03

RESULTADOS DEL PLATO 10:

L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)
0.10330+01	0.14330+01
0.19130+03	0.23590+03
0.27530+03	0.14590+03

RESULTADOS DEL PLATO 11:

L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)
0.65070+00	0.10240+01
0.13740+03	0.14310+03
0.32550+03	0.17030+03

RESULTADOS DEL PLATO 12:

L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)
0.33660+00	0.65350+00
0.92590+02	0.13630+03
0.37230+03	0.24060+03

RESULTADOS DEL PLATO 13:

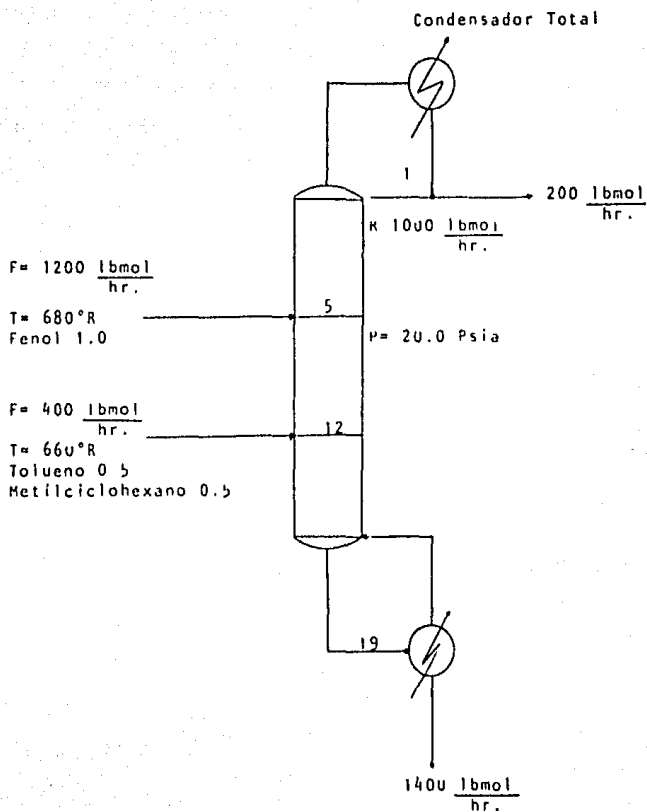
L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)
0.21120+00	0.37650+00
0.56580+02	0.89420+02
0.40930+03	0.28730+03

RESULTADOS DEL PLATO 14:

L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)
0.10920+00	0.20110+00
0.32110+02	0.53410+02
0.43590+03	0.32430+03

RESULTADOS DEL PLATO 15:

L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)
0.10130-01	0.79040-01
0.31690+01	0.28940+02
0.35000+02	0.35000+03



DATOS EJEMPLO 3

DESTILACION DE :

TOLUENO

FENOL

METILCICLOHEXANO

PRESION DE OPERACION= 0.20000+02

DESTILADO= 0.20000+03 LBMOL/HR

REFLUJO(L1/D)= 0.50000+01

COMPOSICION DE ALIMENTACION AL PLATO : 5

TOLUENO 0.10000-01

FENOL 0.99000+00

METILCICLOHEXANO 0.00000+00

V/F ALIMENTACION= 0.00000+00

TEMPERATURA DE LA ALIMENTACION = 0.68000+03 R

ALIMENTACION A LA TORRE= 0.12000+04 LBMOL/HR

COMPOSICION DE ALIMENTACION AL PLATO : 12

TOLUENO 0.50000+00

FENOL 0.00000+00

METILCICLOHEXANO 0.50000+00

V/F ALIMENTACION= 0.00000+00

TEMPERATURA DE LA ALIMENTACION = 0.66000+03 R

ALIMENTACION A LA TORRE= 0.40000+03 LBMOL/HR

CONDENSATION OF COLUMN 11
 ESTIMATION OF L_T & L_V
 REQUIRMENTS

PLATO	TEMPERATURA (R)	LT (LBMOL/HR)	VT (LBMOL/HR)
1	0.69990+03	0.10000+04	0.00000+00
2	0.69990+03	0.93190+03	0.12000+04
3	0.70270+03	0.85940+03	0.11320+04
4	0.71700+03	0.77410+03	0.10590+04
5	0.76150+03	0.22390+04	0.97410+03
6	0.76200+03	0.22300+04	0.12390+04
7	0.76240+03	0.22230+04	0.12300+04
8	0.76250+03	0.22170+04	0.12230+04
9	0.76220+03	0.22130+04	0.12170+04
10	0.76100+03	0.22090+04	0.12130+04
11	0.75740+03	0.22070+04	0.12090+04
12	0.74620+03	0.25950+04	0.12070+04
13	0.74700+03	0.25740+04	0.11950+04
14	0.74800+03	0.25510+04	0.11740+04
15	0.74920+03	0.25260+04	0.11510+04
16	0.75140+03	0.25000+04	0.11260+04
17	0.75680+03	0.24830+04	0.11000+04
18	0.77230+03	0.25270+04	0.10830+04
19	0.80250+03	0.14000+04	0.11270+04

Q REHEQUIDOR= 0.32320+08 BTU/HR Q CONDENSADOR= 0.23950+08 BTU/HR

RESULTADOS DEL PLATO 1:		RESULTADOS DEL PLATO 2:		RESULTADOS DEL PLATO 3:	
L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)	L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)	L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)
0.31490+03	0.31490+00	0.34600+03	0.37770+03	0.35150+03	0.40900+03
0.56140+00	0.56140-03	0.27700+01	0.67370+00	0.27070+02	0.28820+01
0.68450+03	0.68450+00	0.58110+03	0.82140+03	0.48090+03	0.72000+03

RESULTADOS DEL PLATO 4:		RESULTADOS DEL PLATO 5:		RESULTADOS DEL PLATO 6:	
L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)	L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)	L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)
0.27710+03	0.41460+03	0.39260+03	0.34010+03	0.39800+03	0.44360+03
0.17160+03	0.27190+02	0.14100+04	0.17170+03	0.14100+04	0.22170+03
0.32530+03	0.51770+03	0.43720+03	0.46220+03	0.42220+03	0.5710+03

RESULTADOS DEL PLATO 7:		RESULTADOS DEL PLATO 8:		RESULTADOS DEL PLATO 9:	
L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)	L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)	L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)
0.40270+03	0.44900+03	0.40760+03	0.45370+03	0.41470+03	0.45860+03
0.14090+04	0.22210+03	0.14060+04	0.22160+03	0.13970+04	0.21820+03
0.41110+03	0.55910+03	0.40380+03	0.54400+03	0.40030+03	0.54070+03

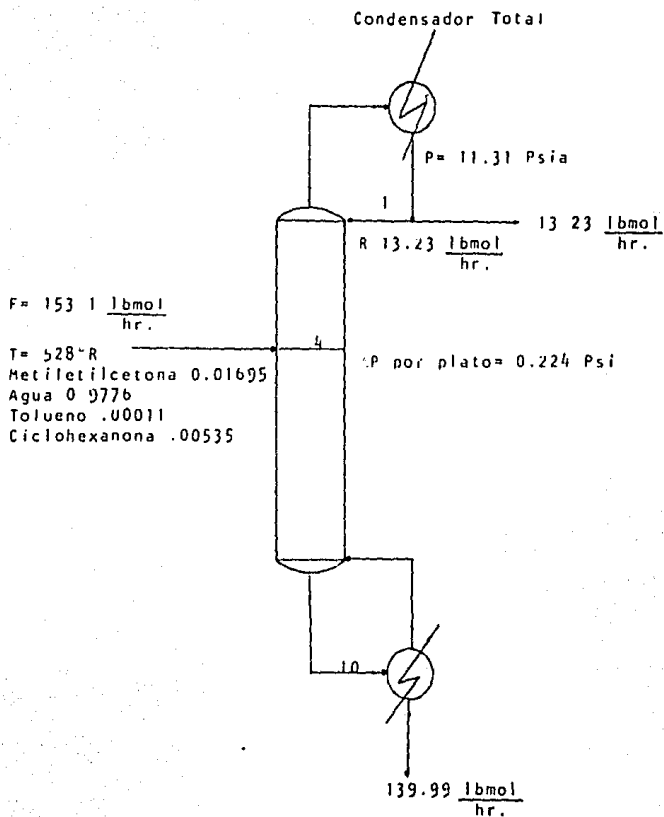
RESULTADOS DEL PLATO 10:		RESULTADOS DEL PLATO 11:		RESULTADOS DEL PLATO 12:	
L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)	L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)	L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)
0.42850+03	0.46560+03	0.46230+03	0.47950+03	0.67600+03	0.51390+03
0.13750+04	0.20950+03	0.13160+04	0.18720+03	0.13130+04	0.12860+03
0.40520+03	0.53770+03	0.42740+03	0.54210+03	0.60040+03	0.56430+03

RESULTADOS DEL PLATO 13:		RESULTADOS DEL PLATO 14:		RESULTADOS DEL PLATO 15:	
L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)	L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)	L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)
0.68690+03	0.52700+03	0.69830+03	0.53790+03	0.70850+03	0.54930+03
0.13200+04	0.13060+03	0.13230+04	0.13210+03	0.13290+04	0.13470+03
0.56690+03	0.53730+03	0.52980+03	0.50340+03	0.48820+03	0.46670+03

RESULTADOS DEL PLATO 16:		RESULTADOS DEL PLATO 17:		RESULTADOS DEL PLATO 18:	
L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)	L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)	L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)
0.70990+03	0.55950+03	0.67470+03	0.56090+03	0.53830+03	0.52570+03
0.13520+04	0.14410+03	0.14410+04	0.16390+03	0.17310+04	0.25270+03
0.43820+03	0.42510+03	0.36820+03	0.37510+03	0.25920+03	0.30510+03

RESULTADOS DEL PLATO 19:

<u>L(LBMOL/HR)</u>	<u>V(LBMOL/HR)</u>
0.14900+03	0.39930+03
0.11880+04	0.54310+03
0.63100+02	0.19510+03



DATOS EJEMPLO 4

PROYECT INDUSTRIAL	SIMULACION DE COLUMNAS	FECHERO 1787
TESTE PROFESIONAL	DE DESTILACION CON EL	L. DEL 3.
	ALGORITMO PROPUESTO	

 DESTILACION DE :

 M-E OCTONA

 AGUA

 TOLUENO

 CICLOHEXANO

 PRESION EN CADA PLACA = 0.11310+02 LBM/LM²

 PISA DE PRESION POR PLACA = 0.22400+00 LBM/LM²

 DESTILADO = 0.11017+02 LBM/LM²

 REFLUXO(LM²) = 0.13495+02

 COMPOSICION DE ALIMENTACION AL PLATE : 4

 M-E OCTONA 0.26950+01

 AGUA 0.17760+00

 TOLUENO 0.11100+01

 CICLOHEXANO 0.53505+02

 V/F ALIMENTACION = 0.00000+00

 TEMPERATURA DE LA ALIMENTACION = 0.92300+03 °

 ALIMENTACION A LA TORRE = 0.15310+03 LBM/LM²

SIMULATION OF COLUMNS
BY DISTILLATION COL. BL-
ALGORITMO PROPOSTO

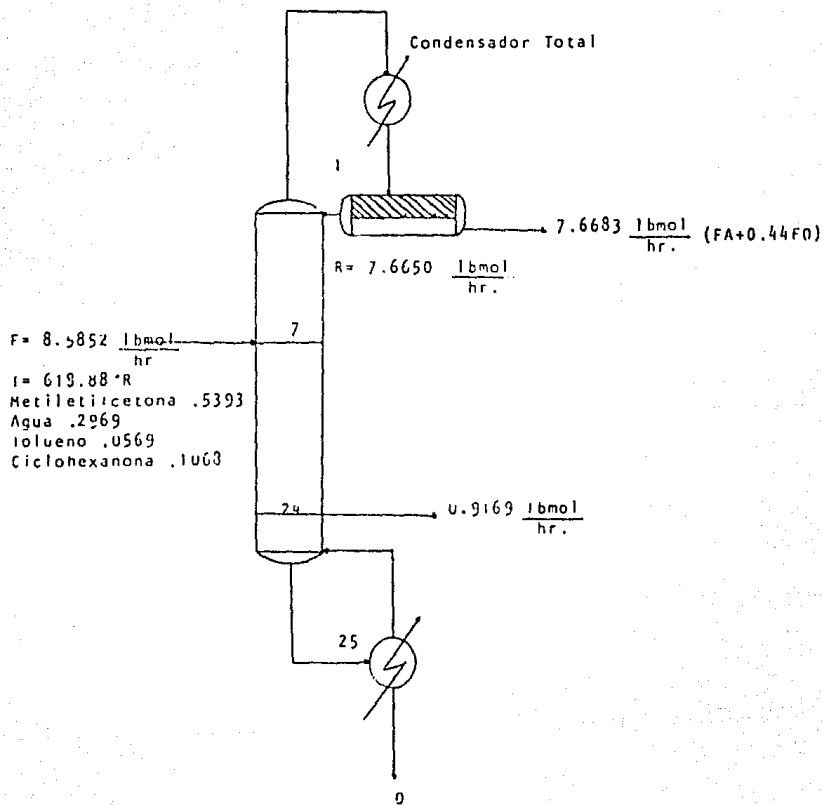
PLATA	TEMPERATURA(°C)	LI(L/MOL/H)	VI(L/MOL/H)
1	3.63770+03	0.13230+02	0.00000+00
2	3.64540+03	0.14540+02	0.24460+02
3	3.65310+03	0.15830+02	0.27770+02
4	3.66080+03	0.17130+02	0.27810+02
5	3.66850+03	0.18410+02	0.47420+02
6	3.67620+03	0.19730+02	0.43150+02
7	3.68390+03	0.21040+02	0.43160+02
8	3.69160+03	0.22360+02	0.48310+02
9	3.69930+03	0.23670+02	0.48560+02
10	3.70700+03	0.24990+02	0.48110+02

1.014870024 0.1170+00 0.1024 0.01650000000 0.43870+00 1.0000

RESULTADOS DEL PLATO 18		RESULTADOS DEL PLATO 41		RESULTADOS DEL PLATO 71	
LCL (MOL/HR)	DESTILADO (X)	LCL (MOL/HR)	VCL (MOL/HR)	LCL (MOL/HR)	VCL (MOL/HR)
0.2647+01	0.1324+01	0.1324+01	0.2647+01	0.1324+01	0.2647+01
0.3433+01	0.7332+00	0.1324+01	0.3433+01	0.1324+01	0.4745+01
0.1588+01	0.1275+02	0.4644+00	0.1588+01	0.1324+01	0.1000+03
0.7421+00	0.5213+01	0.1194+01	0.7421+00	0.1324+01	0.5327+00
RESULTADOS DEL PLATO 21		RESULTADOS DEL PLATO 51		RESULTADOS DEL PLATO 81	
LCL (MOL/HR)	VCL (MOL/HR)	LCL (MOL/HR)	VCL (MOL/HR)	LCL (MOL/HR)	VCL (MOL/HR)
0.7863+01	0.5133+01	0.1324+01	0.7863+01	0.1324+01	0.1073+01
0.1145+00	0.1368+02	0.1324+01	0.4581+00	0.1324+01	0.4420+01
0.1771+01	0.3375+01	0.4644+00	0.1771+01	0.1324+01	0.5346+01
0.1165+00	0.1364+01	0.3025+00	0.1165+00	0.2237+01	0.1165+00
RESULTADOS DEL PLATO 31		RESULTADOS DEL PLATO 61		RESULTADOS DEL PLATO 91	
LCL (MOL/HR)	VCL (MOL/HR)	LCL (MOL/HR)	VCL (MOL/HR)	LCL (MOL/HR)	VCL (MOL/HR)
0.4322+01	0.7421+01	0.3025+00	0.4322+01	0.1324+01	0.1324+01
0.1443+02	0.2409+02	0.1577+01	0.4734+00	0.1324+01	0.4347+01
0.4935+01	0.1830+01	0.1000+03	0.1000+03	0.1000+03	0.2431+01
0.1165+01	0.1364+01	0.4644+00	0.1165+01	0.1324+01	0.1364+01

345-0174203 25L 20410 103

U(L ² 40L/H ²)	V(L ² 40L/H ²)
0.10000-05	0.10000-02
0.10000-03	0.10000-02
0.10000-05	0.10000-04
0.10000-01	0.10000-01



DAIOS DEL EJEMPLO 5

DESTILACION DE :

M-E CETONA AGUA TOLUENO

CICLOHEXANINA

PRESION DE OPERACION * 11.29 PSIA

CAIDA DE PRESION * 0.264 PSIA

DESTILADO * 7.6650 LMDL/MR

RELACION DE REFLUJO * 7.6650

CONDENSADOR: TOTAL

NUMERO DE ETAPAS * 5

CONSTANTES DE EQUILIBRIO: NRTL

NUMERO DE ALIMENTACIONES * 1

NUMERO DE EXTR. LIQ/VAP * 1

NUMERO DE EXTR. DE CALOR * 5

PARAMETROS DE DIFUSION : LM I

COMPOSICION DE LA ALIMENTACION A LA ETAPA 1

M+S C-1014	0.53930
AGUA	0.29490
TOLUENO	0.05443
CICLOHEXANO	0.11137
TOTAL	1.00000

V/F ALIMENTACION = 0.000
 TEMPERATURA DE LA ALIMENTACION = 613.88 C
 ALIMENTACION A LA TORRE = 8.932 L/MOL/HR

EXTRACCIONES EN FASE LIQ. Y/O VAPOR EN LA ETAPA 24

EXTR. FASE LIQ* 0.0000 LPHOL/HR
EXTR. FASE VAPOR* 0.9169 LPHOL/HR



ETAPA	TEMPERATURA(C)	L(LBMOL/HR)	V(LBMOL/HR)
1	0.55957+01	0.76957+01	0.11320+02
2	0.52415+01	0.73373+01	0.11440+02
3	0.49320+01	0.70260+01	0.11630+02
4	0.46182+01	0.67575+01	0.11840+02
5	0.43433+01	0.65110+01	0.12060+02
6	0.41040+01	0.62855+01	0.12290+02
7	0.38954+01	0.60830+01	0.12440+02
8	0.37266+01	0.58960+01	0.12610+02
9	0.35920+01	0.57260+01	0.12790+02
10	0.34972+01	0.55780+01	0.12980+02
11	0.34330+01	0.54470+01	0.13180+02
12	0.33950+01	0.53300+01	0.13390+02
13	0.33720+01	0.52240+01	0.13600+02
14	0.33650+01	0.51280+01	0.13820+02
15	0.33690+01	0.50410+01	0.14050+02
16	0.33800+01	0.49630+01	0.14290+02
17	0.33950+01	0.48930+01	0.14540+02
18	0.34150+01	0.48300+01	0.14800+02
19	0.34400+01	0.47730+01	0.15070+02
20	0.34700+01	0.47220+01	0.15350+02
21	0.35050+01	0.46760+01	0.15640+02
22	0.35450+01	0.46350+01	0.15940+02
23	0.35900+01	0.45980+01	0.16250+02
24	0.36400+01	0.45650+01	0.16570+02
25	0.36950+01	0.45350+01	0.16900+02

Q REHEVEDOR* 253027.4 BTU/HR

Q CONDENSADOR* 259421.4 BTU/HR

RESULTADOS

COMPONENTE	ETAPA 1		ETAPA 2		ETAPA 3		ETAPA 4	
	X	Y	X	Y	X	Y	X	Y
M-HECETONA	0.465520	0.552721	0.131840	0.423923	0.773840	0.456930	0.755320	0.650530
AGUA	0.324530	0.426202	0.211270	0.132410	0.093551	0.371680	0.480662	0.213310
TOLUENO	0.150103	0.106430	0.374743	0.263755	0.116350	0.071334	0.192510	0.095656
CICLOHEXANO	0.000000	0.000000	0.001105	0.000007	0.000966	0.000059	0.007109	0.000699

COMPONENTE	ETAPA 5		ETAPA 6		ETAPA 7		ETAPA 8	
	X	Y	X	Y	X	Y	X	Y
M-HECETONA	0.613240	0.679460	0.472380	0.631340	0.260370	0.541980	0.049842	0.278580
AGUA	0.327385	0.167600	0.025732	0.182982	0.022752	0.197370	0.051213	0.024271
TOLUENO	0.255340	0.129310	0.289990	0.164170	0.202370	0.170200	0.116270	0.217190
CICLOHEXANO	0.043823	0.003627	0.212390	0.022836	0.515330	0.099954	0.322670	0.479940

COMPONENTE	ETAPA 9		ETAPA 10		ETAPA 11		ETAPA 12	
	X	Y	X	Y	X	Y	X	Y
M-HECETONA	0.210529	0.063930	0.001737	0.111231	0.000252	0.031952	0.000045	0.000301
AGUA	0.002050	0.001301	0.000002	0.000003	0.000000	0.000002	0.000000	0.000000
TOLUENO	0.049295	0.124210	0.019522	0.052374	0.007432	0.026600	0.002839	0.007312
CICLOHEXANO	0.940130	0.810550	0.974940	0.936140	0.992290	0.977530	0.997110	0.991790

COMPONENTE	ETAPA 13		ETAPA 14		ETAPA 15		ETAPA 16	
	X	Y	X	Y	X	Y	X	Y
M-HECETONA	0.000007	0.000044	0.000001	0.000000	0.000000	0.000001	0.000000	0.000000
AGUA	0.000000	0.000010	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
TOLUENO	0.001274	0.003025	0.000416	0.001154	0.000162	0.000444	0.000061	0.000170
CICLOHEXANO	0.998910	0.996920	0.999580	0.998830	0.999830	0.999550	0.999340	0.999330

RESULTADOS

COMPONENTE	ETAPA 17		ETAPA 18		ETAPA 19		ETAPA 20	
	X	Y	X	Y	X	Y	X	Y
N-HI CETONA	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
AGUA	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
TOLUENO	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
CICLOHEXANONA	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000

COMPONENTE	ETAPA 21		ETAPA 22		ETAPA 23		ETAPA 24	
	X	Y	X	Y	X	Y	X	Y
N-HI CETONA	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
AGUA	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
TOLUENO	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
CICLOHEXANONA	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000

COMPONENTE	ETAPA 25	
N-HI CETONA	0.000000	0.000000
AGUA	0.000000	0.000000
TOLUENO	0.000000	0.000000
CICLOHEXANONA	0.000000	0.000000

PRESION = 11.312 PSIA

ALFA(V/F) = 0.10000-06

BETA(L1 / F) = 0.10100+00

TEMPERATURA = 513.35 R

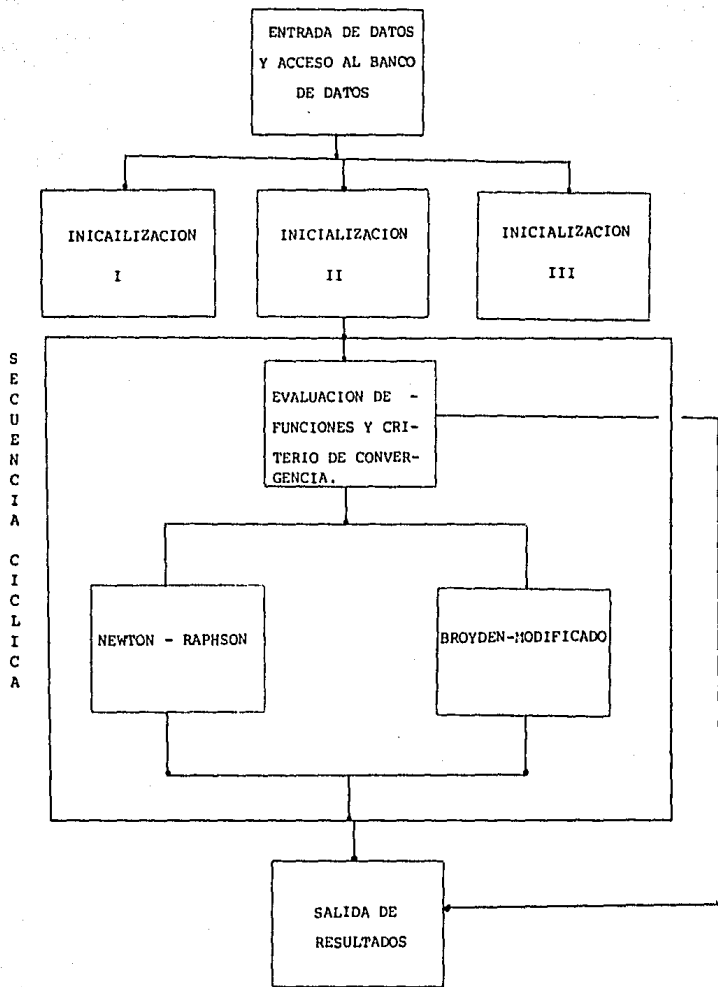
COMPONENTE	K1	K2	K1	K2	Y
H= CEFONA	0.62090+01	0.85340+00	0.39330-01	0.04540+00	0.55470+00
AGUA	0.37420+00	0.16650+01	0.11010+00	0.20450+00	0.34060+00
TOLUENO	0.17240+03	0.67210+00	0.54440+03	0.15010+00	0.10480+00
CICLOHEXANO	0.10470+01	0.72250+01	0.78940+10	0.11130+08	0.20410+10

ML1 = 0.26840+045TU/LBMOLL1
 ML2 = 0.44930+043TU/LBMOLL2
 MV = 0.17280+05 BTU/LBMOLLV
 MM = 0.42960+018TU/LBMOLL F

A P E N D I C E E

DIAGRAMA DE BLOQUES

DIAGRAMAS DE BLOQUES:



Referencias

- 1 King C.J. Separation Process. 2nd Ed. McGraw Hill 1980.
2. Henley E.J. Rosen E.M. Cálculo de Balances de Materia y Energía. Reverté. 1978.
- 3 Liedo G. Desarrollo de cinco algoritmos en ingeniería química. Cap 4 y 5. Tesis de licenciatura Universidad La Salle. México 1981.
- 4 Carnahan B. Luther H.A. Wilkes J.D. Applied Numerical Methods. Wiley 1969.
- 5 Holland Ch. D. Fundamentals of Multicomponents Distillation. McGraw Hill 1981.
- 6 Gerald C.F. Applied Numerical Analysis. 2nd Ed. Addison Wesley 1980.
- 7 Liedo G., Depuración Básica y Linealización en Métodos Numéricos en Ingeniería Química. Sesión Técnica 9B 4. XXIV Convención Nacional del IMIQ Monterrey Octubre 1984.
8. Ferraris Buzzi, Guido. 'A powerful improvement of the global Newton Raphson Method for Multistaged Multicomponent separators'. Computers and Chemical Engineering. Vol 7 1983.
9. Kaufman y Montalvo. 'The application of a modified Damped Newton Raphson Method for the simulation of vapor liquid stagewise Process'. Computer and Chemical Engineering. Vol 7 1983.
- 10 Wang J C and Henke G.E. Hydrocarbon Processing No 1 1966
11. Holland D C. and Lubank P, T. "Solve More Distillation Problems". Hydrocarbon Processing. Nov. 1974.
- 12 Holland. C.D. Gallum S.E. and Lockett M.J. "Modeling Azeotropic and Extractive Distillations" Chemical Engineering March. 1981.
- 13 Bastos J.C. Soares M.E. and Medina A.G. Selectio of Solvents for Extractive Distillation. A Data Bank for Activity coefficients at Infinite Dilution'. Industrial Eng. Chem. Vol 24. 1985.
- 14 Barcenas Escobar Julio. Simulación de Separadores Multi etapas con tres fases. Tesis de licenciatura E.N.E.P. Zaragoza. 1986.
- 15 Cantoral Javier, Leiva Miguel. "Comportamiento Termodinámico de Mezclas Multicomponentes". Seminario de la Termodinámica y los Procesos Industriales IMIQ. UAM Iztapalapa, 1986.

16. Barrio M. Luis Del. Desarrollo de un algoritmo para cálculo de equilibrio líquido líquido y líquido líquido vapor. Convención IMIQ Guanajuato 1986.
17. Henney and Seader. Equilibrium Stages Separation Operations in Chemical Engineering. Wiley and sons.
18. Renon Henri, Asselineau Lionel, Cohen G, Rimbault Claude. Calcul Sur Ordinateur Des Equilibres Liquide Vapeur et Liquide Liquide. Technip Editions, Paris 1971.
19. Valas M. Stanley. Phase Equilibrium in Chemical Engineering. Butterworth publishers. USA 1985.
20. Null H.R. Phase Equilibrium in Process Design, John Wiley and sons, 1970.
21. Barrio M. Luis Del, Liedo G, Gerardo. Infraestructura Termodinámica en Bufete Industrial. Ponencia presentada en el Seminario de la Termodinámica y los Procesos Industriales. IMIQ. UAM Iztapalapa 1986.