

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

- FACULTAD DE QUIMICA -

SIMULACION DE PROCESOS DE SEPARACION
VAPOR-LIQUIDO DE SISTEMAS MULTICOMPONENTES

GLINDA IRAZOQUE PALAZUELOS

INGENIERIA QUIMICA

- 1977 -



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

CLAS. Tesis
ADQ. 1977
FECHA
PROC. Mt 228



JURADO ASIGNADO ORIGINALMENTE SEGUN EL TEMA :

Presidente	PROF. FRANCISCO BARNES DE CASTRO
Vocal	PROF. JORGE MARTINEZ MONTES
Secretario	PROF. CARITINO MORENO PADILLA
1er. Suplente	PROF. ENRIQUE BAZUA RUEDA
2o. Suplente	PROF. ALEJANDRO RAMIREZ CRYCUK

Sitio donde se desarrolló el tema :

FACULTAD DE QUIMICA, UNAM

Nombre completo y firma del sustentante :

GLINDA IRAZOQUE PALAZUELOS

Nombre completo y firma del asesor del tema :

DR. FRANCISCO BARNES DE CASTRO

SIMULACION DE PROCESOS DE SEPARACION
VAPOR-LIQUIDO DE SISTEMAS MULTICOMPONENTES

INDICE

	<u>página</u>
SINOPSIS	
I. INTRODUCCION	1
II. METODOS DE GRUPO	6
1. Separación de multicomponentes	7
III. METODOS ETAPA POR ETAPA	23
1. Separación de multicomponentes	
IV. METODOS DE APROXIMACIONES SUCESIVAS	35
1. Métodos de convergencia	36
1.1 Método de sustitución directa	37
1.2 Método de regula falsi	37
1.3 Método de Newton	39
1.4 Métodos de convergencia con múltiples variables	40

..

INDICE

	<u>página</u>
2. Procesos de separación de múltiples etapas	43
2.1 Solución del balance de masa por componente	47
2.2 Selección del método de convergencia	50
2.2.1 Método de Newton-Raphson de múltiples variables	51
2.2.2 Métodos BP	57
2.2.3 Métodos SR	59
3. Métodos de relajación	61
 BIBLIOGRAFIA	 65

SINOPSIS

Desde principios de siglo se han desarrollado continuamente diversos métodos para el diseño de cascadas de separación de multicomponentes, así como para predecir la separación que alcanzará una alimentación en una torre existente.

En el presente trabajo se hace un análisis de los diferentes métodos disponibles para el cálculo de cualquier proceso de separación. En particular, se enfocó el estudio a la destilación de multicomponentes en etapas múltiples, clasificando estos métodos en tres grandes grupos: métodos de grupo, métodos de etapa por etapa y métodos de aproximaciones sucesivas. Para cada uno de estos, se exponen las bases teóricas, así como las ventajas y desventajas que presentan.

Se pretende sentar los antecedentes y fundamentos teóricos para la presentación posterior de una segunda parte en la que se desarrolla un nuevo modelo matemático para el cálculo de procesos de separación vapor-líquido de mezclas multicomponentes en múltiples etapas.

CAPITULO I

INTRODUCCION

INTRODUCCION

Anteriormente, los métodos existentes para la solución de problemas de separación estaban limitados a situaciones que involucraban etapas simples o problemas de mezclas binarias en múltiples etapas, los cuales podían ser tratados por medio de técnicas gráficas. Los cálculos gráficos presentan la limitación de sólo ser eficientes para aquellos casos en los que al fijar la concentración de un componente queda determinada la composición de una corriente entera, por ejemplo, destilación binaria. Generalmente los cálculos mediante estas técnicas eran efectuados manualmente, lo que traía como consecuencia la obtención de soluciones particulares y aproximadas ya que se recurría, en la mayoría de los casos, a serias aproximaciones, además de usar gran número de horas hombre.

Existían, por lo tanto, algunos procesos de separación como son: absorción, destilación y extracción de multi-componentes, los cuales no podían ser calculados por estos métodos.

Como consecuencia del acelerado desarrollo que han tenido las computadoras digitales y analógicas, los cálculos

complicados y prolongados son resueltos con rapidez y cierta facilidad, por lo que, actualmente se han desarrollado métodos generales aplicables a cualquier proceso de separación.

En el presente trabajo se hace un análisis y descripción de estos métodos, los cuales se han dividido en tres grupos generales:

1. Métodos de grupo
2. Métodos de etapa por etapa
3. Métodos de aproximaciones sucesivas

Cada uno de estos métodos tiene un grado de aplicabilidad determinado que está en función del propósito y la situación particular que se tengan. Así por ejemplo, los métodos de grupo son muy útiles para cálculos aproximados rápidos o para sistemas con un gran número de etapas. Sin embargo, las ecuaciones de las que hacen uso estos métodos emplean suposiciones referentes a la idealidad del sistema que se trata y al hecho de que los flujos entre etapas a lo largo de toda la cascada de separación deberán ser constantes. Como consecuencia de las suposiciones anteriores, los métodos de grupo están limitados a una pequeña clase de problemas.

Por otro lado, los métodos de etapa por etapa efectúan un cálculo progresivo empezando generalmente en alguna de las etapas del extremo de la columna, donde las condiciones son conocidas o puedan predecirse con un porcentaje de error mínimo, continuando etapa por etapa hacia el otro extremo de la cascada de separación. Por lo anterior, puede decirse que estos métodos están limitados a problemas en los que la composición y flujo de uno de los productos puedan predecirse con considerable exactitud.

Como consecuencia, los métodos de etapa por etapa son de gran utilidad para el diseño de procesos de múltiples etapas en situaciones en las que los flujos son conocidos y las variables de separación han sido determinadas.

En general, para sistemas en los que todos los componentes de la alimentación aparecen en uno o en otro de los productos en cantidades bien definidas y en los cuales la diferencia de volatilidades entre los componentes claves es grande, el uso de estos métodos da la solución en pocos pasos.

Una ventaja que presentan estos métodos con respecto a los métodos de grupo reside en el hecho de que las suposiciones de volatilidades y flujos constantes no son necesarias, además de tener los métodos plato por plato, una aplicación más general. Sin embargo, debido a la naturaleza de su desarrollo en muchos casos prácticos, los cálculos resultan ser extremadamente tediosos con respecto a los métodos de grupo.

Los métodos de aproximaciones sucesivas han sido desarrollados en gran parte para problemas en los que el número de etapas en el proceso está fijo y el problema reside en calcular la separación que alcanzará una alimentación dada. Estos métodos integran todos los elementos del proceso en una sola secuencia de cálculo y hacen la simulación de la columna planteando, de manera general, un modelo matemático que con diferentes acepciones, resuelva diferentes condiciones de operación.

El procedimiento de cálculo de estos métodos puede ser planteado como sigue: se suponen las condiciones en cada etapa y se calculan mediante un grupo adecuado de ecuaciones el perfil de composiciones en el proceso. Debido a que las

condiciones supuestas generalmente no son las correctas, se hace necesario el uso de las técnicas de convergencia para obtener el perfil de composiciones correcto. La velocidad de convergencia a la respuesta deseada depende totalmente de la elección de estos métodos de convergencia.

Debido a la generalidad que presentan estos métodos, son adecuados para la solución de problemas involucrando sistemas y procesos complicados. Los métodos de aproximaciones sucesivas en general requieren el uso de computadoras rápidas por el gran número de cálculos que necesariamente se presentan.

CAPITULO II
METODOS DE GRUPO

MÉTODOS DE GRUPO

Entre los métodos existentes para el cálculo de separaciones de multicomponentes en etapas múltiples se encuentran los métodos de grupo. Estos métodos son considerablemente simples en su uso y están basados en su mayor parte solamente en la información disponible de dos componentes (componente clave ligero y componente clave pesado). Por este hecho, los métodos de grupo son igualmente rápidos para cualquier número de componentes y de platos.

En general, el procedimiento matemático de estos métodos consiste en relacionar las composiciones de alimentación y producto al número de etapas empleadas, sin tomar en cuenta las composiciones de las corrientes en puntos intermedios de la torre. La aplicación de los métodos de grupo está limitada a aquellos casos en los que las curvas de equilibrio y operación puedan representarse adecuadamente por expresiones algebraicas sencillas. Lo anterior se presenta cuando los flujos molares entre etapas son constantes y están linealmente relacionados con la composición de salida de la etapa, o cuando los flujos molares y los factores de separación de todos los componentes presentes son constantes.

El primer caso corresponde a líneas rectas de equilibrio y operación para separaciones de equilibrio de mezclas binarias o mezclas multicomponentes donde todos los componentes, menos uno, se encuentran sumamente diluidos y el segundo se aplica a destilaciones binarias y de multicomponentes. Debido a que el presente trabajo está enfocado al problema general de la separación de mezclas multicomponentes se presentarán los métodos de grupo para este segundo caso.

1. SEPARACION DE MULTICOMPONENTES

Para efectuar los cálculos de destilaciones de mezclas multicomponentes mediante estos métodos, necesariamente se tendrá que hacer uso de las siguientes suposiciones: los flujos molares en las secciones consideradas (rectificación y agotamiento) deben ser constantes de etapa a etapa y, por otro lado, las volatilidades relativas entre todos los componentes presentes deben ser constantes. Estas suposiciones son válidas dependiendo de las condiciones del sistema con el que se trabaje, por ejemplo, si el sistema es altamente no ideal, el error en el que se cae es grande; en cambio, para sistemas en los que la separación de los componentes es difícil y las mezclas son relativamente ideales, las suposiciones generalmente son buenas.

Debido a estas suposiciones, en general los métodos de grupo no son exactos; sin embargo, hasta la aparición de los métodos de aproximaciones sucesivas fueron ampliamente usados.

Los flujos entre etapas se fijan en función del reflujo interno en el domo de la columna y por las condiciones térmicas de la alimentación. Con respecto a las volatilidades relativas, la experiencia ha mostrado que un valor satisfactorio puede obtenerse usando un promedio entre las temperaturas del domo y la base de la columna tomando en cuenta las cantidades de productos en estos puntos o, por otro lado, con base a la temperatura en la que el producto de las constantes de equilibrio de los componentes clave ligero y clave pesado es igual a la unidad.

El tratamiento matemático de estos métodos lo seguiremos mediante las ecuaciones de Underwood ^{24/} debido a que para cualquier número de componentes el desarrollo de éstas es simple. Usaremos para denotar las etapas de equilibrio en la zona de rectificación el subíndice n y para la zona de agotamiento el subíndice m . Las etapas en la torre se contarán de abajo hacia arriba.

A partir de los balances de masa y las relaciones de equilibrio se obtiene la siguiente relación para la zona de rectificación.

$$V = \sum_{i=1}^R \frac{\alpha_i d(x_i)_d}{\alpha_i - \theta} \quad (\text{ii-1})$$

donde:

V = flujo de vapor en la sección de rectificación.

$d(x_i)_d$ = cantidad del componente i en el producto del domo.

R = número total de componentes.

α_i = volatilidad relativa del componente i , con respecto a una base arbitraria

θ = parámetro de Underwood en la sección de rectificación.

y el número total de etapas para esta zona queda expresado por:

$$\left(\frac{\theta_k}{\theta_j} \right)^{N_R} = \frac{\sum_{i=1}^R [\alpha_i X_i, f/(\alpha_i - \theta_j)]}{\sum_{i=1}^R [\alpha_i X_i, f/(\alpha_i - \theta_k)]} \quad (\text{ii-2})$$

donde:

N_R = al número de platos en la zona de rectificación

Para encontrar el número de etapas en esta zona, es necesario calcular R valores del parámetro de Underwood a partir de la ecuación (ii-1), los cuales estarán acotados de la siguiente forma:

$$\alpha_A > \theta_1 > \alpha_B > \theta_2 > \dots > \alpha_R > \theta_R > 0$$

en donde A, B, \dots, R están en orden decreciente de volatilidad. Se debe considerar que $x_{i,f}$ se refiere a la composición del líquido que sale de la etapa de la alimentación y no a la composición de la alimentación en sí, composiciones que por lo general son diferentes.

Análogamente, para la zona de agotamiento se tiene que:

$$-V' = \sum_{i=1}^R \frac{\alpha_i b (X_i)_b}{\alpha_i - \theta_i'} \quad (\text{ii-3})$$

donde:

$- V'$ = flujo de vapor en la sección de agotamiento

$b(x_i)_b$ = cantidad del componente i en el producto de fondos

ϕ' = parámetro de Underwood en la sección de agotamiento.

estando el número total de etapas para esta zona dada por:

$$\left(\frac{\phi'_k}{\phi'_j}\right)^{N_s} = \frac{\sum_{i=1}^R \left[\frac{X_i X_{i,f}}{K_i - \phi'_k} \right]}{\sum_{i=1}^R \left[\frac{X_i X_{i,f}}{K_i - \phi'_j} \right]} \quad (ii-4)$$

En donde los R valores de los ϕ'_i estarán distribuidos de la siguiente forma:

$$\phi'_1 > \alpha_A > \phi'_2 > \alpha_B > \dots > \phi'_R > \alpha_R$$

Para un problema de destilación de multicomponentes en el que se especifican el flujo, la composición y la entalpía de la alimentación, la presión de operación, la localización óptima del plato de alimentación, la relación de reflujo y dos variables de separación, a partir de las ecuaciones (ii-2) y (ii-34) se tendrán $2R-2$ ecuaciones independientes que al resolverlas darán el número de platos en la sección de agotamiento (N_S), el número de platos en la sección de rectificación (N_R), la composición del líquido que deja el plato de alimentación ($x_{i,f}$), así como los flujos y las composiciones de los productos restantes.

Si el sistema por separar tiene muchos componentes, una solución exacta de las ecuaciones anteriores (ec. ii-1 a la ec. ii-4) es extremadamente tediosa de obtener. Sin embargo, éstas pueden ser resueltas satisfactoriamente en forma aproximada.

A este respecto Alder y Hanson ^{1/} desarrollan una técnica para resolver las ecuaciones de Underwood por medio de determinantes.

Estos autores arreglan las ecuaciones (ii-1) y (ii-3)

de la siguiente forma:

$$(A_1 - A_2 \Psi_{21}^n) X_A + (B_1 - B_2 \Psi_{21}^n) X_B + (C_1 - C_2 \Psi_{21}^n) X_C = 0 \quad (\text{ii-5})$$

$$(A_2 - A_3 \Psi_{32}^n) X_A + (B_2 - B_3 \Psi_{32}^n) X_B + (C_2 - C_3 \Psi_{32}^n) X_C = 0 \quad (\text{ii-6})$$

$$(A'_1 - A'_1 \Psi'_{21}{}^m) X_A + (B'_1 - B'_1 \Psi'_{21}{}^m) X_B + (C'_1 - C'_1 \Psi'_{21}{}^m) X_C = 0 \quad (\text{ii-7})$$

donde:

$$A_1 = \frac{\alpha_A}{\alpha_A - \theta_1} ; \quad A = \frac{\alpha_A}{\alpha_A - \theta_2} ; \quad \text{etc.}$$

$$B_1 = \frac{\alpha_B}{\alpha_B - \theta_1} ; \quad B_2 = \frac{\alpha_B}{\alpha_B - \theta_2} ; \quad \text{etc.}$$

$$C_1 = \frac{\alpha_C}{\alpha_C - \theta_1} ; \quad C_2 = \frac{\alpha_C}{\alpha_C - \theta_2} ; \quad \text{etc.}$$

$$\Psi_{21} = \frac{\theta_2}{\theta_1} ; \quad \Psi_{32} = \frac{\theta_3}{\theta_2} ; \quad \text{etc.}$$

n = número de platos en la sección de rectificación, incluyendo el plato de la alimentación.

m = número de platos en la sección de agotamiento incluyendo el rehervidor.

Estas ecuaciones se pueden ordenar en forma de determinante, quedando:

$$\begin{vmatrix} A_1 - A_2 \psi_{21}^n & B_1 - B_2 \psi_{21}^n & C_1 - C_2 \psi_{21}^n \\ A_2 - A_3 \psi_{32}^n & B_2 - B_3 \psi_{32}^n & C_2 - C_3 \psi_{32}^n \\ A_2' - A_1' \psi_{21}'^m & B_2' - B_1' \psi_{21}'^m & C_2' - C_1' \psi_{21}'^m \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{ii-8})$$

En un sistema de multicomponentes se pueden escribir muchas combinaciones de las ecuaciones ii-9, ii-10 y ii-11 usando los diferentes 2R valores de los ϕ_s y ϕ_s' a partir de los que obtendremos un conjunto de determinantes de orden R y dos incógnitas, n y m. Del conjunto de determinantes que se obtiene, solamente dos de ellos son independientes, mismos que se usarán para encontrar los valores de n y m.

Una de las desventajas de este método es el hecho de que el orden de los determinantes que deben ser resueltos es igual al número de componentes que se manejan en la separación, por lo que la dificultad de la solución aumenta considerablemente al aumentar el número de componentes.

Con la finalidad de superar esta dificultad Klein y Hanson ^{15/} reducen el determinante de la ecuación (ii-8) a:

$$\begin{vmatrix} A_1 \Psi_1 - A_2 \Psi_2 & B_1 \Psi_1 - B_2 \Psi_2 & C_1 \Psi_1 - C_2 \Psi_2 \\ A_2 \Psi_2 - A_3 \Psi_3 & B_2 \Psi_2 - B_3 \Psi_3 & C_2 \Psi_2 - C_3 \Psi_3 \\ A_3 \Psi_3 - A_2' \Psi_2' & B_3 \Psi_3 - B_2' \Psi_2' & C_3 \Psi_3 - C_2' \Psi_2' \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{ii-9})$$

donde :

$$\Psi_1 = \sigma_1^n, \quad \Psi_2 = \sigma_2^n, \quad \text{etc.}$$

$$\Psi_3' = (\frac{1}{\sigma_3'})^m, \quad \Psi_2' = (\frac{1}{\sigma_2'})^m, \quad \text{etc.}$$

Estos autores en su artículo proponen un conjunto de reglas para la solución de las determinantes obtenidos y para el cálculo de la columna, con las que se reducen en gran medida las dificultades del cálculo. Por otro lado, la rapidez del cómputo está en función de la experiencia que se tenga en el uso de esta nueva técnica.

Desde el punto de vista del diseño de aparatos de destilación, uno de los más importantes factores por determinar es el valor de la relación de reflujo mínimo, que está definido como la relación de reflujo más pequeña con la que una separación requerida puede ser llevada a cabo con un número de etapas infinitas. Si esta cantidad (reflujo mínimo) es conocida, la solución del reflujo de operación adecuado se efectúa fácilmente

y, por consiguiente, el número de platos y el diámetro de la columna pueden ser calculados.

A este respecto Shiras, et. al. ^{21/} presentan tres métodos para el cálculo del reflujo mínimo en columnas de destilación, fraccionando mezclas de multicomponentes.

Los autores hacen una clasificación de todas las separaciones multicomponentes en dos categorías: en la primera clase entran todas las separaciones en las que todos los componentes de la alimentación están presentes, tanto en el producto del domo como en el de fondos. En la segunda clase se encuentran las separaciones en las que algunos componentes están completamente en el producto del domo o completamente en el producto de fondos. Esta clasificación es válida cuando se trabaja con etapas infinitas.

Uno de los métodos que presentan los autores es una extensión y elaboración del método de Underwood para separaciones de la segunda clase. La ecuación que se obtiene para calcular el valor del reflujo mínimo es la siguiente:

$$V_{\text{Min.}} L_{\text{Min}} + d = \sum_i \frac{\alpha_i r d(X_i) d}{\alpha_i r - \theta_j} \quad (\text{ii-10})$$

donde :

d = es el producto del domo

x_i = fracción mol en la fase líquida del componente i

Normalmente el uso de este procedimiento da un valor de reflujo mínimo muy cercano al valor real.

Usando el concepto de etapas infinitas, King ^{14/} propone una solución aproximada de las ecuaciones de Underwood haciendo la suposición de que todos los componentes no claves saldrán totalmente en uno o en otro de los productos, de esta forma los valores necesarios de ϕ y ϕ' pueden ser obtenidos y el problema para calcular N_R y N_S se reduce a encontrar un valor, lo más exacto posible, de la composición del líquido dejando la etapa de alimentación ($x_{i,f}$).

Para efectuar el cómputo de $x_{i,f}$, se postulan secciones hipotéticas de rectificación y agotamiento de etapas infinitas con los mismos flujos molares entre etapas de vapor y líquido y con los mismos flujos y composiciones de destilado y de fondos. De esta manera se encontrarán algunos puntos

debajo de los cuales la fracción mol de los componentes permanecerá constante (Fig. ii-1), pudiéndose expresar las composiciones de los componentes no claves para las zonas de rectificación y agotamiento respectivamente, de la siguiente forma:

$$X_{LNK,\infty} = \frac{X_{LNK,d} (d/L)}{(\alpha_i / \phi_{NK} -) - 1} \quad (ii-11)$$

$$X_{HNK,\infty} = \frac{X_{HNK,b} (b/L')}{1 - (K_{HNK} \alpha V/L')} \quad (ii-12)$$

Con estas dos ecuaciones propuestas podemos calcular las fracciones mol de los componentes no claves pesados (ii-12) y las fracciones mol de los componentes no claves ligeros (ii-11) en el líquido, dejando la etapa de alimentación.

Lo que resta por hacer es estimar las composiciones de los componentes claves en el líquido para la etapa de alimentación. Con este propósito se ha observado que una buena aproximación es usar la relación entre las fracciones mol de los componentes claves, encontrada en la intersección de las líneas operación bajo las suposiciones de flujos totales e ignorando la presencia de los componentes no claves. Esta relación queda dada por:

$$\frac{(X_{LK})_f}{(X_{HK})_f} = \frac{(dX_{LK}, d/V) + (bX_{LK}, b/V')}{(dX_{HK}, d/V) + (bX_{HK}, b/V')} \quad (\text{ii-13})$$

la cual, aunada al hecho de que:

$$X_{LK,f} + X_{HK,f} = 1 - \sum X_{NK,f} \quad (\text{ii-14})$$

permite calcular una composición aproximada del plato de alimentación que está razonablemente cercana a la óptima.

En general, las técnicas para la resolución de las ecuaciones de Underwood que presentan Alder y Hanson ^{1/} y Klein y Hanson ^{15/} no requieren de la aproximación de la composición del plato de alimentación, razón por la cual se obtienen mejores resultados. Sin embargo, los procedimientos matemáticos resultan ser mucho más tediosos y en casos prácticos, en los que no se requiere una exactitud considerable, es mucho más recomendable el desarrollo efectuado por King. ^{14/}

Recientemente, Barnés, et. al. ^{4/} desarrollan un método de grupos extendiendo las ecuaciones de Underwood para el cálculo de reflujo mínimo para columnas de destilación con

dos o más alimentaciones. La secuencia de cálculo que presentan estos autores hace uso de tres ecuaciones básicas:

$$V = \sum \frac{\alpha_i P (X_i)_p}{\alpha_i - \phi} \quad (\text{ii-15})$$

donde:

- p = producto neto total ascendente en la sección
- $(x_i)_p$ = fracción mol del componente i en el producto neto ascendente.

$$V = \sum \frac{\alpha_i F (z_i)_F}{\alpha_i - \phi} \quad (\text{ii-16})$$

donde:

- V_F = es el cambio en el flujo de vapor debido a la introducción de la alimentación.
- $F (z_i)_F$ = es la cantidad del componente i en la alimentación
- ϕ = es una raíz común de las dos secciones

$$\left(\frac{\phi_j}{\phi_k} \right)^n = \frac{\sum \frac{\alpha_i (X_i)_u}{\alpha_i - \phi_j}}{\sum \frac{\alpha_i (X_i)_u}{\alpha_i - \phi_k}} \cdot \frac{\sum \frac{\alpha_i (X_i)_e}{\alpha_i - \phi_k}}{\sum \frac{\alpha_i (X_i)_e}{\alpha_i - \phi_j}} \quad (\text{ii-17})$$

donde:

- $(x_i)_n$ = fracción mol del componente i en la parte superior de la sección.

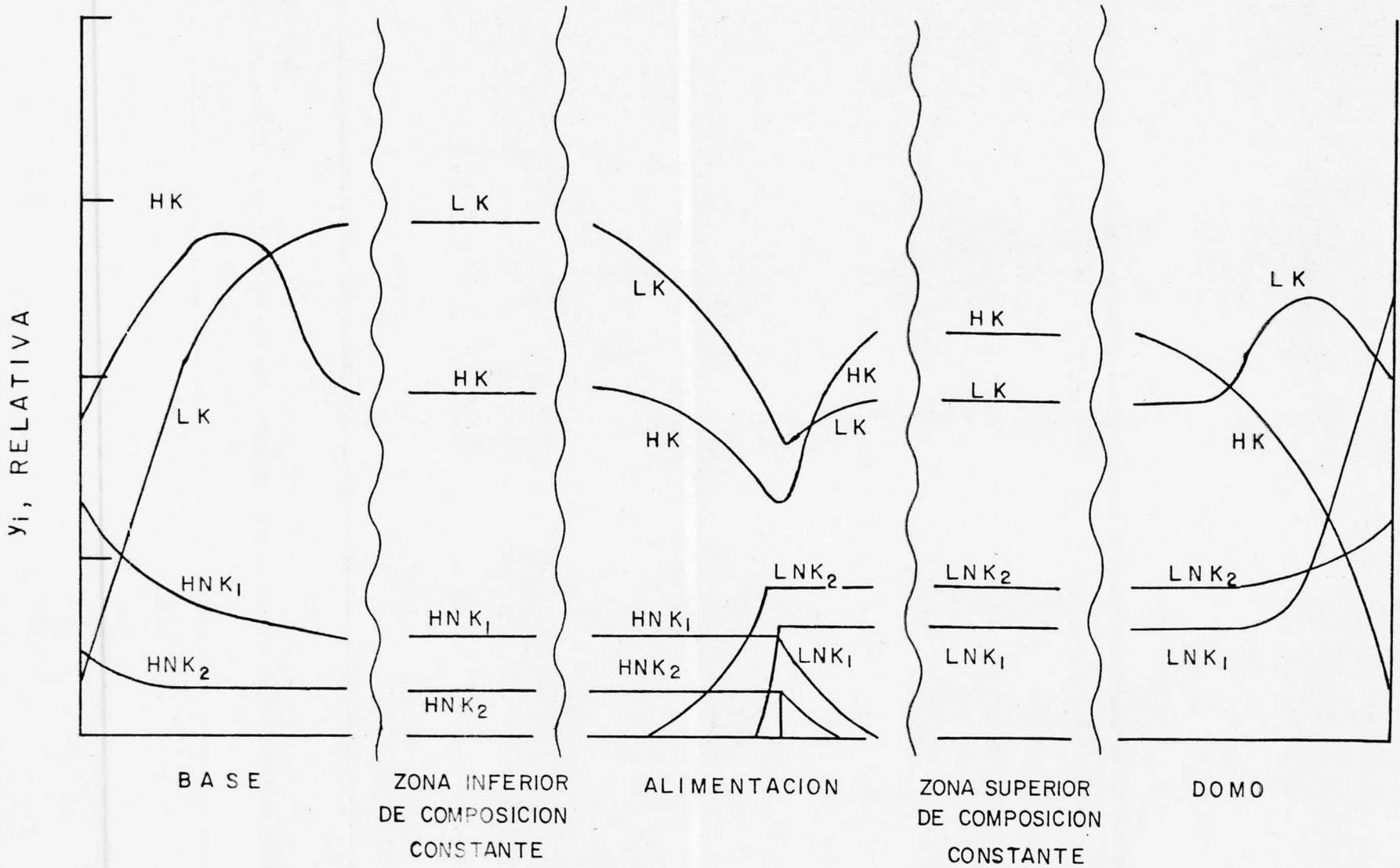
$(x_i)_1$ = fracción mol del componente i en la parte inferior de la sección

ϕ_j y ϕ_k = son dos parámetros para la sección obtenidos de la ecuación (ii-15)

n = número de etapas en equilibrio en la sección

Para demostrar el uso de estas ecuaciones se hace un cálculo de reflujo mínimo para columnas con una alimentación y posteriormente se extiende a columnas con dos o más alimentaciones. El método es general y se ha probado para columnas con una o hasta cinco alimentaciones conteniendo de dos a veinte componentes. Sin embargo, la complejidad de los cálculos aumenta considerablemente con el número de alimentaciones.

Las ecuaciones de Underwood han sido ampliamente usadas tanto para problemas de diseño como para el cálculo de separaciones en las que sean válidas las suposiciones de flujos molares y volatilidad relativa constantes.



CAPITULO III

METODOS ETAPA POR ETAPA

MÉTODOS ETAPA POR ETAPA

Otros métodos disponibles para el cálculo de procesos de separación son los de etapa por etapa. Estos métodos se emplean tanto para el diseño de una nueva columna, dada una separación requerida, como para averiguar qué separación se alcanzará en una torre ya existente.

Los cálculos de separación que se realizan usando los métodos de etapa por etapa consisten en determinar totalmente las condiciones de una etapa antes de pasar a la siguiente, continuando de esta forma hasta definir la cascada de separación. Por lo general el cálculo empieza en alguno de los extremos donde todas las condiciones (flujos terminales, concentraciones, etc.) se conocen o han sido supuestas.

1. SEPARACION DE MULTICOMPONENTES

Al usar los métodos de etapa por etapa en las separaciones de multicomponentes, es necesario determinar con suficiente precisión la composición de alguna de las corrientes de producto, con la finalidad de empezar el cálculo en este extremo.

Debido a que en los problemas de diseño el número de etapas para la separación no se conoce, es necesario fijar en la descripción del problema cuando menos una variable de separación. Tal variable podría ser por ejemplo, la fracción de recuperación de un componente o su pureza en uno de los productos.

En la destilación y, en general, en aquellos procesos donde el agente separador es la energía, los dos flujos entre etapas están relacionados, por lo que en estos problemas es necesario especificar otra variable de separación. Por otro lado, en los procesos en que el agente separador es la masa (absorción, extracción, etc.), solamente se debe especificar una variable de separación si en la descripción del problema se han fijado todos los flujos de alimentación.

En el caso de la destilación se fijan las fracciones de recuperación correspondientes a los componentes clave ligero y clave pesado. El cálculo se empezará en uno u otro de los extremos de la columna, dependiendo del orden que ocupen las volatilidades de los componentes claves con relación a las volatilidades de los componentes no claves. Así por ejemplo, si

las volatilidades de los componentes claves son las más altas, una buena suposición será la de considerar la recuperación del resto de los componentes igual a la unidad en el producto de fondos, lo cual nos determina totalmente ese punto y la secuencia del cálculo será de abajo hacia arriba. Para el caso en el que las volatilidades de los componentes claves sean las más bajas, se da una situación análoga, en donde el cálculo se llevará a cabo de arriba hacia abajo.

Una suposición mejor que la anterior se obtiene al considerar las composiciones de los componentes no clave como iguales a las composiciones que estos tendrían a reflujo total.

Si las volatilidades de los componentes claves se encuentran en una posición intermedia con respecto al resto de los componentes, la situación es más compleja debido a que no se podrá definir ninguno de los extremos de la torre con suficiente exactitud.

El procedimiento general de los métodos plato por plato consiste en suponer las composiciones de los productos e iniciar el cálculo usando balances de materia y relaciones de

equilibrio que permitan definir totalmente cada etapa antes de proceder a la siguiente hasta alcanzar el plato de alimentación. La diferencia entre las composiciones del plato de alimentación calculadas desde uno y otro de los extremos de la torre nos dará una medida del grado y la dirección del error en la suposición original.

Si las volatilidades relativas a lo largo de la columna no fueran constantes, sería necesario calcularlas para cada etapa en función de la temperatura de esa etapa, lo cual se obtendría a partir de un cálculo de punto de burbuja o de punto de rocío dependiendo del extremo en el que se empieza el cómputo. Por otro lado, en el caso en que los flujos molares no fueran constantes, su variación se consideraría en los balances de entalpía para cada etapa.

Sobre el modelo general presentado anteriormente, varios autores exponen algunos refinamientos a los métodos de etapa por etapa.

McIntire ^{16/} desarrolla una técnica para el diseño de un fraccionador por medio de la que se obtiene el número

de etapas requerido para la separación de multicomponentes dada una alimentación.

El autor efectúa una evaporación instantánea en la alimentación con la finalidad de determinar la naturaleza y calidad de la alimentación. Posteriormente resuelve las condiciones terminales de la columna mediante balances totales de energía, materia y equilibrio fijando una relación de reflujo dada. Habiéndose obtenido estos datos es necesario suponer el número de etapas totales así como los perfiles de vapor y temperatura, la corrección de estas suposiciones se hará efectuando cálculos ascendentes del componente clave pesado y los más pesados que éste, hasta que la concentración del componente clave pesado concuerde con la obtenida en el balance total de materia para la etapa N. Un cálculo similar, pero descendente, se realiza para la zona de agotamiento hasta lograr el chequeo en la composición del componente clave ligero con la obtenida en el balance total para la primera etapa. Los perfiles de vapor y temperatura se van corrigiendo mediante cálculos de puntos de burbuja, puntos de rocío y balances de entalpía.

Todo lo anterior involucra la solución de un conjunto de ecuaciones no lineales y, por lo tanto, es un proceso iterativo de prueba y error realizado etapa por etapa.

El diseño concluye cuando la suma de las fracciones mol. es la unidad y el número de etapas teóricas para las secciones de rectificación y agotamiento queda determinado por la concentración de los componentes claves en cada una de estas zonas respectivamente.

Debido a que en este método, como ya se mencionó, los cálculos se llevan a cabo por prueba y error, el tiempo de computadora variará en función de la precisión deseada en los resultados, así como en el tipo de máquina que se use para estos.

Entre las ventajas del método destacan su versatilidad y el hecho de que elimina los juicios de ingeniería al manejar el cálculo a través de ecuaciones analíticas. Sin embargo, una solución por este método no da la localización óptima del plato de alimentación. En general, esta técnica ha sido especialmente diseñada para separaciones finas.

Shelton y McIntire ^{20/} amplían la técnica anterior para ser usada en el cálculo de separaciones de alimentaciones de multicomponentes realizadas con condiciones de operación fijas en un fraccionador determinado.

El método que los autores presentan converge rápidamente cuando se usa en separaciones finas, pero está particularmente diseñado para la realización de separaciones gruesas donde los componentes están distribuidos en apreciables cantidades en ambos productos.

En el desarrollo de la técnica es necesario suponer una distribución aproximada de los componentes en los dos productos y los cálculos se desarrollan siguiendo, en forma análoga, los pasos del método anterior.

La convergencia se alcanza cuando las composiciones de cada componente en el plato de alimentación, obtenido mediante las iteraciones efectuadas en forma ascendente y descendente en la columna guardan una relación igual a la unidad.

La utilidad del método propuesto es fácilmente ampliada para diferentes tipos de condensadores y rehervidores, así como para diferentes condiciones de alimentación.

Por otro lado, Bonner ^{6/} desarrolla un programa de computación en el que refina el esqueleto básico de los métodos plato por plato, tomando en cuenta los siguientes pasos:

1. Se revisan varias veces, en el transcurso del cómputo, las temperaturas individuales de etapa haciendo uso de cálculos de punto de burbuja y de rocío.
2. Los datos de equilibrio y entalpia para cada componente son expresados como funciones de la temperatura y calculados en cada plato.
3. Los perfiles de vapor y líquido son revisados repetidas veces por los balances de energía en cada plato.
4. Se corrigen automáticamente los datos de equilibrio para ciertos tipos de no-idealidad en la fase líquida.
5. Las composiciones de producto son automáticamente ajustadas después de cada iteración.

El programa es aplicable para separaciones efectuadas en torres en operación con una alimentación conocida. Los resultados que se obtienen en esta situación son: perfiles finales de temperatura y vapor, composición y temperatura de destilado y de fondos, composición de líquido y vapor en cada plato y las cargas del condensador y del rehervidor.

Una de las grandes ventajas que presenta este método es su generalidad, ya que se puede usar cuando las volatilidades relativas de los componentes claves tienen una localización extrema con respecto a los demás o cuando estos ocupan un lugar intermedio. Por otro lado, tanto las separaciones finas como las gruesas son tratadas con igual facilidad por el mismo procedimiento de cálculo.

Posteriormente Aristovich y Levin ^{3/} desarrollan un algoritmo para calcular destilaciones de multicomponentes para mezclas no ideales y/o para mezclas con alimentaciones con amplio rango de ebullición.

La base del algoritmo es un método plato por plato en el que paralelamente se desarrolla una técnica que permite

ajustar las composiciones de la separación de los productos, además de mejorar la convergencia de las iteraciones para cálculos involucrando separación de mezclas complejas de multicomponentes.

Los cálculos se llevan a cabo en dos etapas: en la primera se fijan composiciones aproximadas de la separación de los productos a una relación de reflujo bastante alta (aproximadamente diez veces mayor que la de operación).

Si las propiedades fisicoquímicas de los componentes difieren significativamente unas de otras, las concentraciones de los componentes cuyas propiedades son las más extremas son fijadas como muy pequeñas en la separación de los productos, de tal forma que en el caso de mezclas de amplios puntos de ebullición, las concentraciones de los componentes más ligeros en el producto de fondos y de los componentes más pesados en el producto del domo, son determinadas tan pequeñas que éstas no tienen influencia en el cálculo del número de platos teóricos.

El número de platos teóricos se calcula en la primera iteración de esta etapa manteniéndolo fijo en las iteraciones subsecuentes donde se refinan las composiciones de los productos en el domo y en la base.

En la segunda etapa del cálculo, se mejora el número de platos teóricos en la primera iteración, usando las composiciones de los productos obtenidos en la última iteración de la primera etapa. Posteriormente el número de platos teóricos se determina a la relación de reflujo de operación.

Los cálculos se efectúan del domo y de la base al plato de alimentación, como es usual en los métodos plato por plato.

La ventaja de este método reside en el hecho de no requerir de un gran número de iteraciones para el cómputo total, por lo que el tiempo de computadora se disminuye considerablemente. Sin embargo, con este método desafortunadamente no es posible prever en qué forma la exactitud lograda en los cálculos afecta la pureza de los productos en condiciones industriales.

Los métodos de etapa por etapa son generalmente útiles cuando es posible calcular aproximadamente los flujos molares de todos los componentes en alguno de los productos del proceso de separación. Esta situación se da si la fracción de recuperación de los componentes no especificados en el problema de descripción no es menor de 0.98 ó 0.99.

En los métodos de etapa por etapa las eficiencias de Murphree para el vapor pueden ser introducidas sin necesidad de cálculos de prueba y error, ya que como se conocen las temperaturas, las $K_{i,n}$ pueden ser obtenidas fácilmente y, por otro lado, las $x_{i,n}$ y $y_{i,n-1}$ han sido calculadas etapa por etapa. La única suposición que surge al introducir estas eficiencias es la de considerar que el líquido y el vapor entre etapas está termodinámicamente saturado.

En los procesos de separación, hasta antes de la aparición de los métodos de aproximaciones sucesivas, los cálculos más rigurosos se llevaban a cabo por medio de algún método de etapa por etapa.

CAPITULO IV

METODOS DE APROXIMACIONES SUCESIVAS

MÉTODOS DE APROXIMACIONES SUCESIVAS

Los problemas de separaciones de multicomponentes en múltiples etapas eran generalmente resueltos mediante alguno de los métodos de etapa por etapa. En estos métodos el problema principal, como ya se mencionó, es la inestabilidad del procedimiento iterativo cuando no está perfectamente definido uno de los dos productos, razón por la cual el uso de este método es limitado.

Con la aparición de las computadoras digitales se hace posible que el análisis de los procesos de separación de multicomponentes se realice en forma más rigurosa y rutinaria mediante los métodos de aproximaciones sucesivas. Una de las grandes ventajas de estos métodos es su generalidad, ya que a partir de ellos se pueden resolver de igual forma problemas de requerimientos de etapa, así como de separaciones que aparezcan en flashes de multicomponentes, columnas de destilación, cascadas de extracción, absorbedores, etc. Otro rasgo de estos métodos es el hecho de que se pueden escribir como algoritmos con direcciones explícitas para cada paso del cálculo.

La capacidad de los métodos de aproximaciones sucesivas está fuertemente ligada a una apropiada selección del método de convergencia.

1. METODOS DE CONVERGENCIA

Los métodos de convergencia surgen a raíz de la necesidad de resolver ecuaciones implícitas de la forma:

$$f(x) = 0 \quad (\text{iv-1})$$

Para la selección adecuada del método de convergencia deben considerarse las siguientes características:

- a) El método de convergencia debe conducir a la raíz deseada de la ecuación.
- b) Debe acercarse a la raíz asintóticamente, es decir, debe ser estable.
- c) Se debe considerar la rapidez de convergencia.
- d) Se deben evitar iteraciones hasta donde sea posible.

1.1 Método de sustitución directa

Este método es adecuado cuando la ecuación por resolver puede arreglarse de la siguiente forma:

$$\varphi(x) = x \quad (\text{iv-2})$$

El procedimiento que propone este método es el siguiente:

- 1o. suponer un valor x_0
- 2o. sustituir x_0 en la ecuación (iv-2)
- 3o. encontrar $x_1 = \varphi(x_0)$
- 4o. repetir los pasos 2 y 3 hasta obtener $x_{i+1} = \varphi(x_i)$

Para asegurar la convergencia del método de sustitución directa es necesario que pase:

$$\left| \frac{d \varphi(x)}{dx} \right| < 1$$

en la solución.

1.2 Método de regla falsi

El método de regla falsi es un método particular de los conocidos como métodos de la secante. Este procedimiento se

sigue cuando se desea resolver una ecuación implícita de la forma de la ecuación (iv-1) y los pasos a desarrollar son los siguientes:

- 1o. A partir de dos valores dados x_0 y x_1 se calcula $f(x)$. Estos valores deben ser seleccionados de tal forma que $f(x_0)$ y $f(x_1)$ sean de signos opuestos.
- 2o. Se hace una interpolación lineal entre los puntos encontrados.
- 3o. Con esta función lineal encontrar x_2 de tal forma que la haga cero.
- 4o. Se realiza una interpolación lineal entre el punto x_2 y cualquiera de los puntos x_0 ó x_1 , dependiendo cuál de estos dos tiene signo contrario a $f(x_2)$.
- 5o. Se repite del segundo al cuarto paso hasta encontrar la solución buscada. Esto es, para la iteración $i + 1$ tendremos un valor de x :

$$x_{i+1} = x_i + (x_1 - x_i) \frac{f(x_i)}{f(x_i) - f(x_1)} \quad (\text{iv-3})$$

El error de la iteración $n + 1$ en estos métodos, decrece en razón a la primera potencia del error de la iteración n , es por esto que se les conoce también como métodos de primer orden. Generalmente estos métodos requieren un número considerable de iteraciones para converger.

1.3 Método de Newton

El método de Newton es uno de los más conocidos procesos de convergencia. Es un método de segundo orden, esto es, el error de la iteración $n + 1$ es proporcional al cuadrado del error de la iteración n . Sin embargo, el método no garantiza la convergencia, ya que si la función $f(x)$ tiene un máximo, un mínimo o punto de inflexión, el método puede diverger o llevarnos a una raíz no deseada. La secuencia es la siguiente:

1o. Escoger un valor inicial x_0

2o. Calcular $f(x_0)$ y $\left[\frac{df(x)}{dx} \right]_{x=x_0}$

3o. Se encuentra la intersección de la pendiente con el eje de las abscisas. Este será el nuevo valor x_1 .



4o. Se repiten el segundo y tercer pasos a partir de

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{\left[\frac{df(x)}{dx} \right]_{x=x_i}} \quad (\text{iv-4})$$

hasta encontrar la raíz deseada.

Como se puede deducir de lo anteriormente dicho, los métodos de mayor orden requerirán de un número menor de iteraciones, ya que el error disminuirá más rápidamente de prueba a prueba.

Un inconveniente que presentan estos métodos es el hecho de que se deberán calcular un número de derivadas igual al orden del método menos 1.

1.4 Métodos de convergencia con múltiples variables

Dentro de esta clase de métodos se encuentran dos grandes grupos: los métodos secuenciales y los métodos simultáneos. Estos métodos pretenden resolver problemas en los cuales aparecen n variables que deben satisfacer a n ecuaciones implícitas, independientes y simultáneas.

En el método secuencial se presenta una serie de ciclos

anidados en cada una de las cuales se realiza la convergencia de cada variable hasta lograr la convergencia del sistema en su conjunto. A medida que el número de variables aumenta, el método secuencial se hace más tardado. Una alternativa para resolver sistemas de ecuaciones con un número considerable de variables desconocido es el método simultáneo, en el que todas las incógnitas se hacen converger conjuntamente. Sin embargo, este método no es tan estable como el anterior si se hace la aproximación:

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) \approx f(x_i)$$

y se desprecia el efecto sobre f_i de todas las variables x_j , $i \neq j$.

El método de Newton de múltiples variables es uno de los métodos simultáneos más conocidos en el que se hace una generalización del método de Newton de una variable. Resulta ser de especial interés ya que en el presente trabajo se propone una modificación a dicho método.

La suposición que hace el método de Newton de múltiples variables es la de considerar que todas las derivadas parciales son lineales entre el último punto calculado y la solución de convergencia. Este método converge rápidamente cuando está cerca de la solución, siempre y cuando no suceda que

$$f'(x_0) \approx 0.$$

En el caso en que se tengan n incógnitas,

x_1, x_2, \dots, x_n , relacionadas por n ecuaciones de la forma

$$f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \dots, f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0,$$

la fórmula de convergencia para cada una de las variables está dada por:

$$(x_{i,n+1} - x_{i,n}) = \frac{\begin{array}{cccc} \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_1}\right) & \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_2}\right) & \dots & (-f_1) \dots \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_n}\right) \\ \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_1}\right) & \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_2}\right) & \dots & (-f_2) \dots \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_n}\right) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \left(\frac{\partial f_k}{\partial x_1}\right) & \left(\frac{\partial f_k}{\partial x_2}\right) & \dots & (-f_k) \dots \left(\frac{\partial f_k}{\partial x_n}\right) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \left(\frac{\partial f_n}{\partial x_1}\right) & \left(\frac{\partial f_n}{\partial x_2}\right) & \dots & (-f_n) \dots \left(\frac{\partial f_n}{\partial x_n}\right) \end{array}}{\begin{array}{cccc} \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_1}\right) & \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_2}\right) & \dots & \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_j}\right) \dots \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_n}\right) \\ \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_1}\right) & \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_2}\right) & \dots & \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_j}\right) \dots \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_n}\right) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \left(\frac{\partial f_k}{\partial x_1}\right) & \left(\frac{\partial f_k}{\partial x_2}\right) & \dots & \left(\frac{\partial f_k}{\partial x_j}\right) \dots \left(\frac{\partial f_k}{\partial x_n}\right) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \left(\frac{\partial f_n}{\partial x_1}\right) & \left(\frac{\partial f_n}{\partial x_2}\right) & \dots & \left(\frac{\partial f_n}{\partial x_j}\right) \dots \left(\frac{\partial f_n}{\partial x_n}\right) \end{array}} \quad (\text{iv-5})$$

El método de Newton implica el cálculo de n^2

derivadas por cada iteración. Esta es una de sus desventajas,

que se ha solucionado en gran parte por medio del método de apareamiento simultáneo en el que cada una de las variables es corregida en cada iteración en una sola rama con una ecuación determinada. Para obtener mejores resultados se recomienda aparear cada una de las variables con aquella ecuación sobre la que tenga efecto dominante. De esta manera los cálculos por iteración se han reducido sustancialmente.

2. PROCESOS DE SEPARACION DE MULTIPLES ETAPAS

La resolución de problemas de mezclas de multicomponentes en múltiples etapas actualmente se lleva a cabo, en la mayoría de los casos, mediante los métodos de aproximaciones sucesivas. Estos métodos permiten calcular tanto condiciones de etapa como condiciones de producto en cualquier proceso de separación de múltiples etapas a contra corriente, ya que estos métodos proporcionan un análisis de columnas en operación en el problema de descripción ¹⁴/ debe necesariamente fijarse un número determinado de variables. En el caso particular de la destilación, las variables por fijar son: número de etapas de equilibrio (N), localización de alimentaciones, locali-

zación de corrientes laterales, condiciones de la alimentación, velocidad de flujo del destilado (D), condiciones de las corrientes laterales (S_n), reflujo (r) y presión (P). Estas variables no son rígidas, se pueden cambiar por alguna otra, dependiendo de la situación, a excepción del número de etapas y la localización de alimentaciones y productos.

Para el caso de destilación con etapas en equilibrio, condensador parcial y número determinado de alimentaciones y corrientes laterales, las cuatro ecuaciones básicas que relacionan al resto de las incógnitas son las siguientes:

1. Relaciones de equilibrio:

$$v_{i,n} = \frac{K_{i,n} V_n}{L_n} l_{i,n} \quad (\text{iv-6})$$

2. Balances de masa por componente:

$$l_{i,n} + v_{i,n} - l_{i,n+1} - v_{i,n-1} - f_{i,n} = 0 \quad (\text{iv-7})$$

3. Balances de entalpia:

$$L_n h_n + V_n H_n - L_{n+1} h_{n+1} - V_{n-1} H_{n-1} - F h_{F_n} - q_n = 0 \quad (\text{iv-8})$$

4. Sumatoria de flujos

$$\sum_i l_{i,n} = L_n \quad \text{y} \quad \sum_i v_{i,n} = V_n \quad (\text{iv-9})$$

Estas cuatro ecuaciones podrán reducirse a partir de manipulaciones algebraicas y de un balance de masa desde el plato n hasta cualquier extremo de la columna, en tres grupos:

1. Balance de masa por componente:

$$-l_{i,n+1} + \left[1 + \frac{S_{L_n} + K_{i,n} (V_n + S_{V_n})}{L_n} \right] l_{i,n} - \frac{K_{i,n-1} V_{n-1}}{L_{n-1}} l_{i,n-1} - z_{i,n} F_n = 0 \quad (\text{iv-10})$$

2. Balance de entalpia dado por la ecuación

$$H_n (l_{i,n+1}, l_{i,n}, l_{i,n-1}, v_{n+1}, v_n, v_{n-1}, T_{n+1}, T_n, T_{n-1}) = 0 \quad (\text{iv-11})$$

3. Suma de fracciones

$$\sum_i \frac{K_{i,n} V_n}{L_n} l_{i,n} - V_n = 0 \quad (\text{iv-12a})$$

$$\sum_i l_{i,n} - L_n = 0 \quad (\text{iv-12b})$$

Esté sistema se puede resolver a partir del método de convergencia de Newton de múltiples variables, ya sea efectuando un agrupamiento de las ecuaciones por etapas o por tipo de ecuación 7/, siendo esta última la forma más adecuada cuando las composiciones terminales no se conocen. Por esta razón este agrupamiento es el mejor cuando se emplean los métodos de aproximaciones sucesivas.

En la solución de estos sistemas de ecuaciones es imprescindible suponer los perfiles de temperatura y los perfiles de vapor 14/ y resolver primeramente los balances de masa por componente. En general, una secuencia para la solución de ecuaciones por el método de aproximaciones sucesivas para procesos de separación en etapas múltiples es la que se indica en la Fig. IV-1.

Como se puede observar del algoritmo anterior, aún quedan algunos problemas por determinar como son: encontrar la forma más adecuada para la resolución de los balances de materia por componente, analizar si el camino de convergencia a seguir debe ser secuencial o simultáneo y, finalmente,

escoger los métodos de convergencia más adecuados para cada uno de los ciclos del cálculo.

2.1 Solución del balance de masa por componente

Con respecto a los balances de masa por componente, una vez supuestos los perfiles de vapor y temperatura, las ecuaciones correspondientes que resultan son:

$$\begin{aligned}
 & B_1 I_{i,1} + C_1 I_{i,2} = D_1 \\
 & A_2 I_{i,1} + B_2 I_{i,2} + C_2 I_{i,3} = D_2 \\
 & \quad \quad \quad \vdots \\
 & A_n I_{i,n-1} + B_n I_{i,n} + C_n I_{i,n+1} = D_n \\
 & \quad \quad \quad \vdots \\
 & A_N I_{i,N-1} + B_N I_{i,N} = D_N
 \end{aligned}
 \tag{iv-13}$$

donde la etapa 1 corresponde al rehervidor y la etapa N al condensador parcial, y:

$$A_n = - \frac{K_{i,n-1} V_{n-1}}{L_{n-1}} \quad 2 \leq n \leq N
 \tag{iv-14}$$

Debido a que dicha matriz sólo contendrá elementos no nulos en la diagonal principal y sus adyacentes (matriz tridiagonal), el camino más adecuado para resolverla es el método de Thomas que presenta las ventajas de ser rápido, fácilmente programable y no requiere de mucha memoria de computadora, a diferencia de otros métodos de solución de la matriz tridiagonal.

Si definimos:

$$A_1 = q_0 = g_0 = 0 \quad (\text{iv-22})$$

Este método involucra el cálculo de las siguientes cantidades para cada hilera:

$$w_n = B_n - A_n q_{n-1} ; 2 \leq n \leq N \quad (\text{iv-23})$$

$$q_n = \frac{D_n - A_n q_{n-1}}{w_n} ; 2 \leq n \leq N \quad (\text{iv-24})$$

$$g_n = \frac{C_n}{w_n} ; 2 \leq n \leq N \quad (\text{iv-25})$$

En el caso en que la matriz no fuese tridiagonal, como sucede en los problemas de cascadas a contracorriente con "by-pass" en alguna de las corrientes, desafortunadamente

el método de Thomas ya no funciona y se tendrá la necesidad de recurrir a métodos generalmente engorrosos para llevar a cabo la inversión de la matriz.

Otro de los métodos para resolver las ecuaciones de balance de masa por componente, una vez supuestos los perfiles de vapor y temperatura, es el de Thiele-Geddes, que involucra cálculo de etapa por etapa usando las ecuaciones de relación de equilibrio y balance de masa por componente.

$$v_{i,n} = \frac{K_{i,n} V_n}{L_n} l_{i,n} \quad (\text{iv-26})$$

$$l_{i,n} + v_{i,n} - l_{i,n-1} - v_{i,n-1} - f_{i,n} = 0 \quad (\text{iv-27})$$

Wang y Henke ^{25/} demuestran en su trabajo que el método de Thomas preserva la exactitud y la estabilidad numérica en los cálculos de destilaciones complejas, ya que el algoritmo mencionado evita los errores de truncamiento que surgen al efectuar diferencias entre cantidades casi iguales.

2.2 Selección del método de convergencia

Como se mencionó anteriormente, en la solución de problemas de separación de multicomponentes en múltiples

etapas es de primordial importancia la selección adecuada del camino de convergencia a seguir. En esta sección se tratarán en forma general algunos de los métodos de convergencia más usados en este tipo de separaciones.

2.2.1 Método de Newton-Raphson de múltiples variables

Un camino hacia la convergencia en la solución de aproximaciones sucesivas es el que se muestra en la Figura IV-2, que hace uso de una generalización del método de Newton.

En éste las ecuaciones (iv-8) y (iv-12a) son usadas como f_1, \dots, f_n en la ecuación (iv-5) y las incógnitas x_1, \dots, x_n están dadas por los perfiles de vapor y temperatura. De esta forma, el número de derivadas parciales que se deben calcular es grande pero no prohibitivo. Se hizo una revisión de algunos artículos que usan este método o crean modificaciones al mismo; en los párrafos siguientes se hará una pequeña descripción de cada uno de ellos.

Amundson y Pontinen 2/ tratan los problemas de rectificación de mezclas multicomponentes usando series de

Taylor y la aproximación de Newton en la corrección del perfil de temperatura. Estos autores logran la convergencia del método calculando el punto de burbuja de la corriente líquida de cada plato usando las composiciones normalizadas.

Tierney y Bruno ^{22/} por otro lado, realizan una corrección a este método, con el fin de disminuir el tiempo de computación requerido. Los autores hacen las siguientes suposiciones: las relaciones de equilibrio y las entalpías son funciones conocidas de la temperatura y de la composición; el sistema opera a régimen permanente y se usa un sistema multicomponente con dos fases (líquida y vapor). Con base en éstas y en un manejo adecuado de las ecuaciones de los balances de materia y energía, ellos aportan las siguientes contribuciones al método.

1. Desarrollan un procedimiento de corrección de temperatura en el que el efecto de un cambio en la temperatura de cualquier plato sobre la composición en todas las etapas es tomado en cuenta.
2. Desarrollan un procedimiento de corrección de velocidades de flujo en el que los efectos de un cambio en cualquier velocidad de flujo sobre la composición en todas las etapas son tomados en cuenta.

3. Se muestra el desarrollo de una notación matricial para las ecuaciones de balance de materia que permite el uso de cualquier arreglo de conexión del flujo entre etapas.

Las derivadas parciales usadas en las matrices de corrección son obtenidas por una diferenciación analítica de los errores y no por aproximaciones de diferencias finitas.

Con todo lo anterior, Tierney y Bruno logran una velocidad de convergencia cuadrática en el tratamiento de problemas con flujo molar constante y problemas de extracción a temperatura constante.

Otras modificaciones han sido propuestas por Orbach et. al. ^{19/} quienes presentan algunos cambios realizados al método de Newton para resolver problemas de destilación multicomponente (o absorción) a estado permanente. Estos problemas son reducidos en dos clases de ecuaciones:

$$S_n = \sum_i x_{i,n} - 1 = 0 \quad (\text{iv-28})$$

$$E_n = \frac{(\text{calor que entra} - \text{calor que sale})}{\text{calor que entra}} = 0 \quad (\text{iv-29})$$

donde:

$$\text{calor que entra} = F_n H_n + L_{n-1} h_{n-1} + V_{n+1} H_{n+1} + Q_n$$

$$\text{calor que sale} = (L_n + S_{L_n}) h_n + (V_n + S_{V_n}) H_n$$

donde las variables independientes son los perfiles de vapor y temperatura. El método se extiende para incluir el uso de datos de equilibrio vapor-líquido que dependen de la temperatura y de la composición.

Naphtali y Sandholm ^{18/} muestran un camino diferente para aplicar la técnica de Newton-Raphson a problemas de separación y las ventajas que muestran son las siguientes:

1. Los rangos de volatilidad de los componentes no afectan la convergencia. Absorbedores, agotadores y absorbedores con rehervidor pueden calcularse con el mismo algoritmo usado en problemas de destilación sin efectuar modificaciones.
2. La presencia de soluciones no ideales es considerada simple y rigurosamente sin cambios en el método.

3. La temperatura, composición de componentes claves o gastos, relación de reflujo, recuperación o cualquier otra función de los flujos del condensador o del reherbido pueden usarse como especificaciones.

4. Las eficiencias de etapa de Murphree son tomadas en cuenta de una forma rigurosa.

5. El número de alimentaciones y corrientes laterales es ilimitado, ya que no surgen dificultades causadas por flujos negativos o errores de redondeo en problemas de múltiples alimentaciones.

6. El método se basa en una linearización de las ecuaciones de destilación, de tal forma que se acelera la convergencia cuando la solución está próxima.

7. No surgen complicaciones debidas a flujos de componente muy pequeños.

El agrupamiento de ecuaciones y variables en este artículo se efectúa de acuerdo al plato, ya que en esta forma la matriz de derivadas parciales necesaria en el método de

Newton es fácilmente resuelta y se reduce en gran parte la cantidad de memoria de computadora necesaria y el número de cálculos requeridos. 17/

Debido a que la experiencia muestra que el método de Newton es algunas veces inestable cuando los valores de las variables están lejos del valor correcto, Naphtali y Sandholm presentan en su trabajo un método de mejoramiento a las características de convergencia total usando la suma de los cuadrados de las funciones error. Una de las desventajas que presenta este método es la de necesitar un almacén de memoria secundaria para problemas complejos, la que no siempre está disponible.

Finalmente, Goldstein y Stanfield 9/ realizan un estudio para la solución de problemas de diseño de destilación usando el método de Newton. Ellos tratan el problema en la forma clásica, con la única diferencia de que realizan la inversión de la matriz del jacobiano, efectuando primero la triangularización parcial de ésta y posteriormente invierten cada una de las pequeñas matrices obtenidas. Muestran la efectividad del método en torres conteniendo más de 40 platos.

2.2.2 Métodos BP

Estos métodos siguen un esquema de apareo simultáneo en el que la ecuación (iv-12a) será usada como función de comprobación para el perfil de temperaturas y la ecuación de balance de energía por componente se usará como función de comprobación del perfil de vapor. 7/

Usando las composiciones normalizadas de líquido calculadas en cada etapa, se obtiene una nueva temperatura del plato mediante el cálculo del punto de burbuja, que servirán como $T_n, i + 1$. En general, este es un procedimiento de sustitución directa para el ciclo de convergencia de la temperatura.

Algunos investigadores 2,22/ usan este método arreglando la ecuación (iv-12a) de la siguiente forma:

$$\sum_i \frac{K_{i,n} V_n}{L_n} l_{i,n} - \sum_i l_{i,n} = 0 \quad (\text{iv-30})$$

El apareo de variables que efectúa este método se aplica a situaciones donde las temperaturas de la etapa son más sensibles a la composición que a los balances de entalpia y donde los flujos totales están determinados más por balances de entalpia que por composición. Estos casos se encuentran en los problemas donde los efectos de calor latente predominan sobre los efectos de calor sensible en las ecuaciones de balances de entalpia. En general, estos criterios los satisfacen las destilaciones en las que las mezclas alimentadas tienen un rango estrecho de temperaturas de ebullición.

Con respecto a el ciclo de convergencia de temperatura, el método presenta algunos inconvenientes debido al cálculo de los puntos de burbuja en cada plato y a que el perfil de temperaturas inicialmente puede ser muy alto o demasiado bajo por lo que el tiempo de computadora aumenta.

Una corrección adecuada a este problema ^{14/} es hacer un ajuste en los flujos de componentes individuales antes de efectuar el cálculo de los puntos de burbuja, así como satisfacer las velocidades de flujo total. En este sentido, Holland ^{10/} ha realizado estudios para la corrección de la relación $l_{n,i}/V_{n,i}$

para cada componente por medio de un simple factor θ . El valor necesario de θ es obtenido de una solución iterativa de la ecuación:

$$\text{Desp.} = \sum_i \frac{f_i}{1 + \theta (l_{i,n} / v_{i,n})} \quad (\text{iv-31})$$

Recientemente él mismo propone una serie de modificaciones a este método 8, 11/ para extender su uso a absorbedores y demuestra que el método θ de convergencia da soluciones exactas para problemas de reflujo total, así como para otras diferentes especificaciones de reflujo.

2.2.3 Métodos SR

A diferencia del método anterior, éste usa la ecuación (iv-12a-b) como función de comprobación para el perfil de vapor y la ecuación (iv-8) como función de comprobación para el perfil de temperaturas.7/ Este método debe ser empleado en situaciones donde las mezclas de alimentación tengan un amplio rango de puntos de burbuja.

En general, los problemas de extracción líquida de multicomponentes en múltiples etapas, problemas de absorción y de destilación con amplio rango de punto de burbuja, son tratados eficientemente por este método.

La limitación que presentan los métodos de punto de burbuja y suma de velocidades es que no todas las ecuaciones pueden ser resueltas simultáneamente.

A este respecto, Tomich ^{23/} usa el método de Broyden para resolver las ecuaciones de sumatoria y las de balance de calor. De esta forma todas las ecuaciones se pueden resolver en forma simultánea.

El procedimiento de Broyden presenta además dos ventajas sobre el método clásico de Newton-Raphson: primero, la estabilidad numérica es mejorada debido a que la técnica de Broyden garantiza que cada paso iterativo se acerca a la solución y, por otro lado, ya que este procedimiento usa solamente la inversión de una matriz por programa, el tiempo de computación requerido se reduce considerablemente.

3. METODOS DE RELAJACION

Los métodos de relajación se desarrollan siguiendo el comportamiento transitorio de los procesos de separación a medida que estos se acercan al régimen permanente. Las variables que se suponen son: los flujos entre etapas, las composiciones y las temperaturas de etapa. En estos métodos el balance de materia transitorio que se maneja queda expresado como:

$$\frac{d}{dt} \left[U_n X_{i,n} + W_n y_{i,n} \right] = L_{n-1} X_{i,n-1} + V_{n+1} y_{i,n+1} + F_n Z_{i,n} - (V_n + S_{V_n}) y_{i,n} - (L_n + S_{L_n}) x_{i,n} \quad (\text{iv-32})$$

donde:

U_n = líquido retenido en el plato n

W_n = vapor retenido en el plato n

Estos métodos de relajación se pueden usar para la solución total de un problema dado o solamente para satisfacer una o más de las funciones moderadoras.

Los métodos de relajación son altamente estables y esta facultad es muy útil en problemas en donde la constante de equilibrio de los componentes ($K_{i,n}$) está fuertemente relacionada con la composición. Sin embargo, el uso de estos métodos debido a su lenta convergencia, debe reservarse a problemas particularmente difíciles, los cuales no puedan ser resueltos en forma eficiente por otros métodos.

Al respecto, Jelinek ^{13/} propone algunas modificaciones para acelerar la rapidez de convergencia. La ecuación diferencial (iv-34) se puede resolver mediante el método de Euler; sin embargo, este método es tardado. Jelinek y colegas proponen una modificación en la que obtienen una matriz pentagonal con la que logran aumentar la rapidez de convergencia del método.

El método de relajación resuelve problemas tanto de destilación como de absorción y, en general, es aplicable a toda operación a contracorriente con etapas en equilibrio. Se puede emplear también en columnas con múltiples alimentaciones y corrientes laterales, así como para cualquier configuración de columnas conectadas entre sí.

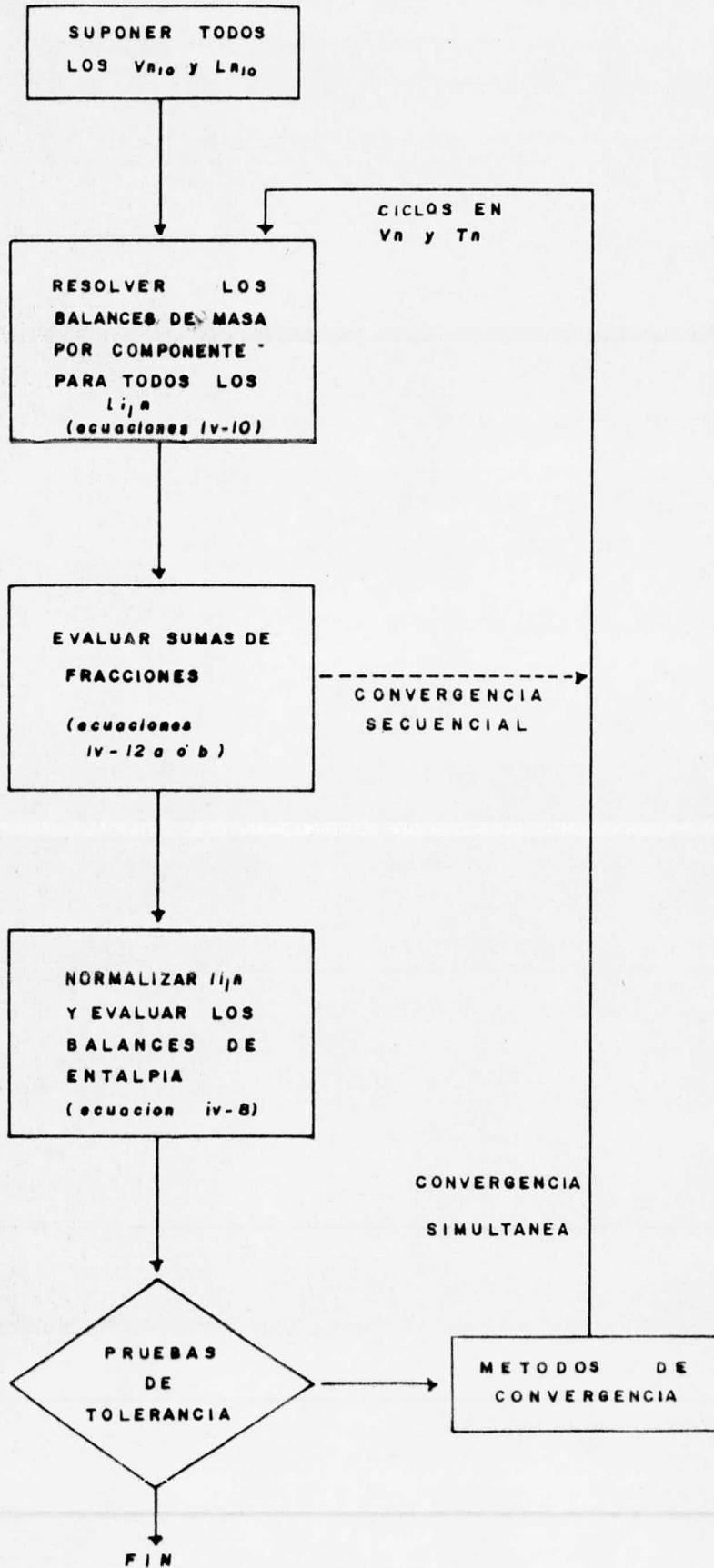


FIGURA IV-1

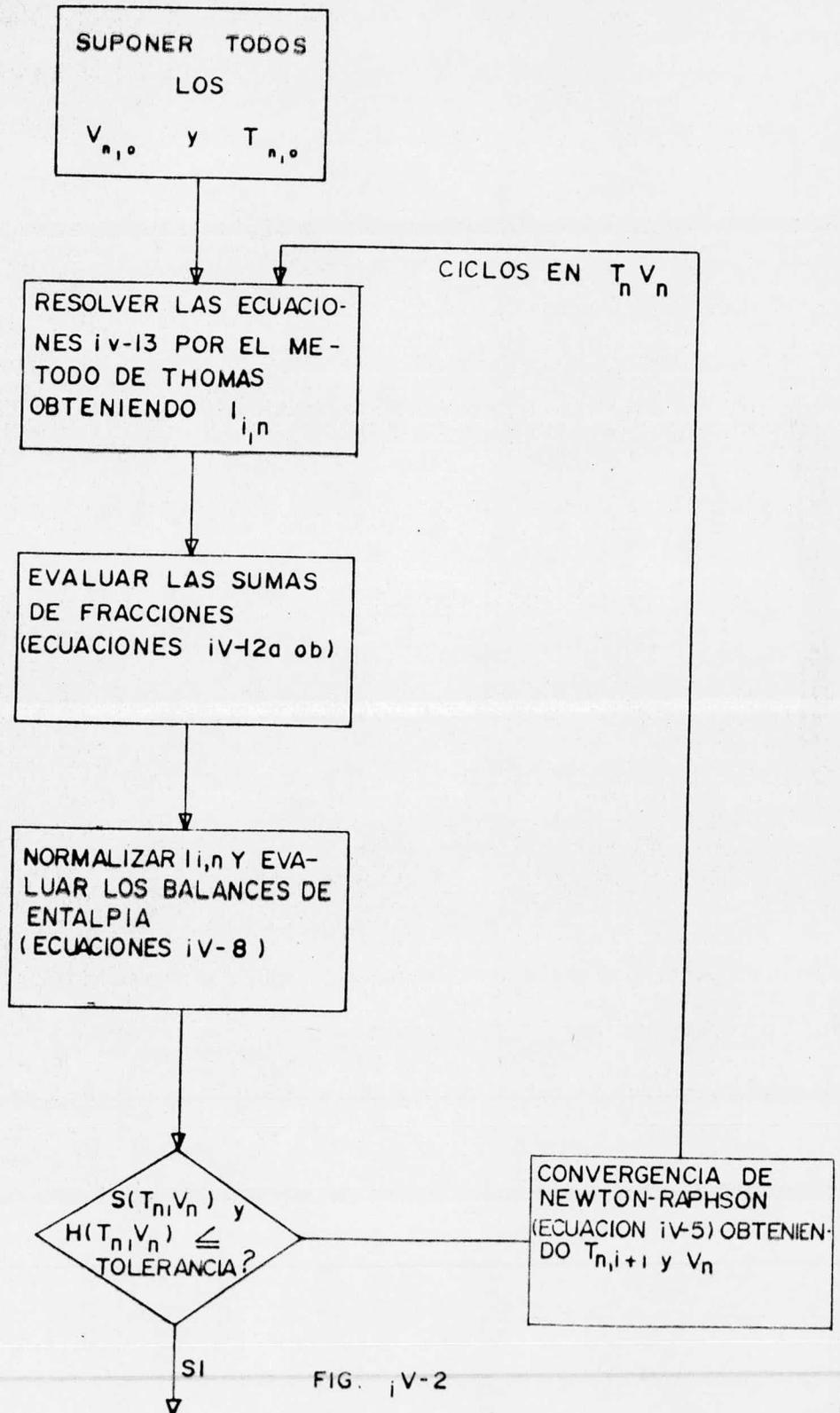


FIG. iV-2

BIBLIOGRAFIA

1. Alder B.J. and D.N. Hanson: "Algebraic Calculation of Distillation Columns"; Chem. Eng. Prog., 46:48 (1950)
2. Amundson N.R. and A.J. Pontinen: "Multicomponent Distillation Calculations on a Large Digital Computer"; Ind. Eng. Chem., 50:730 (1958)
3. Aristovich V. Y. and A.I. Levin: "Method for Calculating Rectification of Multi-Component Mixtures on Digital Computers"; Ind. Chem. Eng., 8:1 (1968)
4. Barnes F.J., Hanson D.N. and King. C.J.: "Calculation of Minimum Reflux for Distillation Columns with Multiple Feeds"; Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop., 11 (1): 136 (1972)
5. Birmingham D.W. and F.D. Otto: "Which Computer Design for Absorbers?", Hydrocarbon Process., 46 (10): 163 (1967)
6. Bonner J.S.: "An Integrated System for the Automatic Solution of Distillation Problems"; Chem. Eng. Prog. Symp. Series, 55 (21): 87 (1959)
7. Friday J.R. and B.D. Smith: "An Analysis of the Equilibrium Stage Separations Problem-Formulation and Convergence"; A.I.C.H.E.J., 10 (5): 698 (1964)
8. Gallum S.E. and C.D. Holland: "Solve More Distillation Problems", Part 5; Hydrocarbon Process., January 1976, p. 137
9. Goldstein R.P. and R.B. Stanfield: "Flexible Method for the Solution of Distillation Design Problems Using the Newton-Raphson Technique"; Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop., 9 (1): 78 (1970)

BIBLIOGRAFIA

10. Holland C.D. and G.P. Pendon: "Solve More Distillation Problems" Parts 1-2; Hydrocarbon Process., July 1974, p. 148
11. Holland C.D., G.P. Pendon and S.E. Gallun: "Solve More Distillation Problems", Parts 2-4, Hydrocarbon Process., January 1975, p. 101
12. Jelinek J., V. Hlavacek and M. Kubicek: "Calculation of Multistage Countercurrent Separation Processes - II, Multicomponent Multistage Separation by Relaxation Procedure"; Chem. Eng. Science, 28 (10): 1825 (1972)
13. Jelinek J., V. Hlavacek and Z. Krivsky: "Calculation of Countercurrent Separation Processes - III. Computation of Two Interlinked Columns"; Chem. Eng. Science, 28: 1833 (1973)
14. King. C.J.: "Separation Processes", McGraw - Hill Book Co., 1971
15. Klein G. and D.N. Hanson: "The Solution of Multi - component Distillation Columns"; Chem. Eng. Science, 4: 229 (1955)
16. McIntire R.L.: "Fractionator Design with Automatic Computing Equipment, Part I"; Chem. Eng. Prog. Symp. Series, 55(21): 59 (-).
17. Naphtali, L.M.: "Process Heat and Material Balances"; Chem. Eng. Prog., 60(9): 70 (1964)
18. Naphtali, L.M. and D.P. Sandholm: "Multicomponent Separation Calculations by Linearization"; A.I.Ch.E.J., 17(1): 148 (1971)
19. Orbach O., C.M. Crowe and A.I. Johnson: "Multi - component Separation Calculation by the Modified Form of Newton's Method"; Chem. Eng. J., 3: 176 (1972)

BIBLIOGRAFIA

20. Shelton R.O. and McIntire R.L.: "Fractionator Design, Part II"; Chem. Eng. Prog. Symp. Series, 55(21): 69 (-)
21. Shiras R.N., D.N. Hanson and C.H. Gibson: "Calculation of Minimum Reflux in Distillation Columns", Ind. & Eng. Chem., 42(5): 871 (1950)
22. Tierney J.W. and J.A. Bruno: "Equilibrium Stage Calculations"; A.I.C.H.E.J., 13(3): 556 (1967)
23. Tomich F.J.: "A New Simulation Method for Equilibrium Stage Processes"; A.I.C.H.E.J., 16(2): 229 (1970)
24. Underwood A.J.V.: "Fractional Distillation of Multi-component Mixtures"; Chem. Eng. Prog., 44(8): 603 (1948)
25. Wang J.C. and G.E. Henke: "Tridiagonal Matrix for Distillation"; Hydrocarbon Process, 15(8): 155 (1966)