

300618

14

20



UNIVERSIDAD LA SALLE

ESCUELA DE QUIMICA
INCORPORADA A LA U. N. A. M.

**DESARROLLO DE UN SIMULADOR DE TORRES DE
DESTILACION UTILIZANDO VERSIONES MODIFI-
CADAS DEL METODO THETA DE CONVERGENCIA.**

**TESIS PROFESIONAL
PARA OBTENER EL TITULO DE:
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A:
RAMSES EDUARDO ORTIZ HERNANDEZ**

México, D. F., a 7 de Octubre de 1991.

1992

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**



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.

CAPITULACION

- I) INTRODUCCION
- OBJETIVO.
 - EQUIPO USADO.
 - BASES DE EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR.
 - ANALISIS DE GRADOS DE LIBERTAD EN COLUMNAS DE DESTILACION.
- II) METODO THETA DE CONVERGENCIA PARA COLUMNAS CONVENCIONALES.
- PLANTEAMIENTO ANALITICO.
 - BALANCES DE MASA Y ENERGIA INVOLUCRADOS.
 - DESARROLLO DEL METODO THETA DE CONVERGENCIA.
 - SECUENCIA DE CALCULO.
- III) MODIFICACION DEL METODO THETA DE CONVERGENCIA PARA COLUMNAS DE DESTILACION COMPLEJAS.
- TIPOS DE COLUMNAS COMPLEJAS.
 - PLANTEAMIENTO ANALITICO.
 - BALANCES DE MASA Y ENERGIA INVOLUCRADOS.
 - DESARROLLO DEL METODO THETA CORRESPONDIENTE.
 - SECUENCIAS DE CALCULO.
- IV) MODIFICACION DEL METODO THETA DE CONVERGENCIA PARA UN SISTEMA DE "N" COLUMNAS INTERCONECTADAS.
- PLANTEAMIENTO ANALITICO.
 - BALANCES DE MASA Y ENERGIA INVOLUCRADOS.
 - DESARROLLO DEL METODO THETA DE CONVERGENCIA.
 - SECUENCIA DE CALCULO.
- VI) CONCLUSIONES.
- VII) APENDICES.
- DESCRIPCION DE LOS PROGRAMAS.
 - MANUAL DEL USUARIO.
 - EJEMPLOS.
 - BIBLIOGRAFIA.

CAPITULO I

INTRODUCCION.

El propósito de la siguiente tesis, es el desarrollo de una serie de programas, basados en modificaciones del método theta de convergencia, con el fin de simular columnas de destilación con diferentes grados de complejidad y sistemas de columnas de destilación interconectadas, quedando la posibilidad de incorporar estos programas en un futuro a un simulador de procesos para la universidad La Salle.

Se pretende ante todo, tener una versatilidad de opciones y lograr la creación de un sistema abierto, en el cual el usuario tenga la oportunidad de crear cualquier tipo de configuración de torres (s), tipos de entradas y sus respectivas localizaciones al igual que las extracciones, pérdidas de calor, tipo de condensador, presiones en cada etapa, etc. y sin embargo, no se necesitará introducir datos no básicos como lo son las condiciones térmicas de las alimentaciones y los perfiles iniciales de flujos y temperaturas, ya que cada programa cuenta con un tipo de inicialización que podrá aún así, ser modificada para que el usuario pueda introducir sus propios perfiles de flujos y temperaturas. con esto se podrá obtener una mas rápida convergencia o se podrá resolver problemas que necesiten un estimado especial de flujos de vapor, flujos de líquidos, perfiles de temperaturas y composiciones en ambas fases. Por otra parte, es el usuario el encargado de crear las subrutinas de datos de equilibrio y entalpías del líquido y del vapor, con lo que este simulador quedará abierto a cualquier sistema de estudio, inclusive sistemas no ideales, donde los datos de equilibrio y entalpías son función de la temperatura, presión y composiciones en ambas fases.

El equipo usado fue una computadora PS Hewlett-Packard del centro de cómputo de la universidad La Salle y el lenguaje usado fue BASIC.

PRINCIPIOS FUNDAMENTALES EMPLEADOS EN EL DISEÑO DE COLUMNAS DE DESTILACION.

Por resolución de una columna de destilación se entiende el encontrar la solución de los balances de materia y energía en el equilibrio. Aquí no se hacen consideraciones de la dinámica del proceso ni de los fenómenos de transporte; razón por la cual, no se utilizan la geometría ni las eficiencias de platos; las variables involucradas son los perfiles de temperaturas, flujos de líquido, flujos de vapor, composiciones en ambas fases, condiciones térmicas y extracciones, con un número determinado de grados de libertad que serán las variables a especificar.

Una vez alcanzada la solución se deben cumplir las siguientes condiciones:

1. Relaciones de equilibrio.
2. Balances de masa global y por componente.
3. Balance global de energía.

A continuación se considerarán los principios básicos referentes al primer punto, los dos restantes podrán ser reacomodados según el método de resolución elegido y serán detalladamente analizados en los siguientes capítulos, para ser útiles al método theta en cuestión.

BASES DE EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR.

En un sistema dado consistente en dos fases, una líquida y otra vapor, se deben cumplir las siguientes condiciones:

- 1) La presión en la fase vapor es igual a la presión en la fase líquida.
- 2) La temperatura en la fase vapor es igual a la temperatura en la fase líquida.
- 3) La tendencia al escape de la fase líquida a la fase vapor de cualquier componente es igual a la tendencia al escape del mismo componente de la fase vapor a la fase líquida.

Estas condiciones pueden establecerse como:

$$T^V = T^L$$

$$P^V = P^L$$

$$f^V = f^L$$

En donde :

$$f_i^L = f_i^{OL} x_i \gamma_i \quad \text{y} \quad f_i^V = P y_i \phi_i$$

f_i^L = Fugacidad del componente i en el líquido.

f_i^{OL} = Fugacidad del componente i puro evaluado a T y P.

γ_i = Coeficiente de actividad del componente i en la solución.

f_i^V = Fugacidad del componente i en el vapor.

ϕ_i = Coeficiente de fugacidad del componente i en la mezcla de gases.

Y están definidas de la siguiente manera:

$$f_i^{OL} = P_i^S \phi_i^S \text{EXP} \left[\int_{P_S}^P \frac{\bar{V}_i}{RT} dP \right]$$

$$\frac{-G_i^{\text{real}}}{RT} - \frac{-G_i^{\text{ideal}}}{RT} = \frac{-\epsilon_i}{RT} = \ln \gamma_i$$

$$\phi_i = \text{EXP} \left[\int_0^P \left(\bar{V}_i - \frac{RT}{P} \right) dP \right]$$

Donde:

P_i^S = Presión de saturación del componente i.

ϕ_i^S = Coeficiente de fugacidad del componente i a la saturación.

G_i = Energía libre de Gibbs.

Partiendo de la ecuación $f_i^V = f_i^L$ se obtiene que las constantes de equilibrio vienen

dadas por:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{f_i^{OL} \gamma_i}{P \phi_i}$$

Casos especiales:

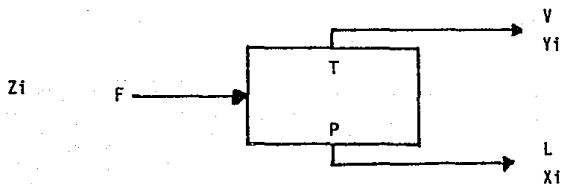
- Si la solución líquida es ideal $\gamma_i = 1$.
- Si la solución líquida es ideal y estamos cerca de la presión de saturación:

$$\text{EXP} \left[\int_{P_S}^P \frac{\bar{V}_i}{R_i} dP \right] \approx 1 \quad \therefore \quad K_i = \frac{P_i^S \phi_i^S}{P \phi_i}$$

Si se consideran gases y líquidos ideales:

$$K_i = \frac{P_i^S}{P}$$

CALCULO DE TEMPERATURAS DE BURBUJA Y DE ROCIO.



$$F = V + L \quad (1)$$

$$FZ_i = Vy_i + Lx_i \quad (2)$$

Utilizando las ecuaciones mencionadas arriba, se obtiene:

$$X_i = \frac{Z_i}{[1 + (K_i - 1) \frac{V}{F}]} \quad (3)$$

$$Y_i = K_i X_i \quad (4)$$

En la ecuación (3) se tiene que la variable V/F toma el valor de 1.0 para los puntos de rocío y para los puntos de burbuja toma el valor de 0.0. En casos ideales solo hay una variable que es la temperatura y en casos no ideales las composiciones deben resolverse por sustitución directa normalizando o sea:

$$X_i = \frac{X_i}{\sum X_i} \quad Y_i = \frac{Y_i}{\sum Y_i}$$

Se eligió la siguiente función error, debido a que con ella se observó una convergencia mas rápida en varios ejemplos:

$$\text{Fun} = \text{Log} \sum \frac{X_i}{Y_i} = 0$$

Esta función error se puede resolver por medio de un método iterativo como lo es el método de Newton de primer orden, la secuencia de cálculo es:

- Dar condiciones ideales y suponer una temperatura.
- Calcular las constantes de equilibrio.
- Calcular la derivada de las constantes de equilibrio con respecto a la variable $(1/T)$.
- Calcular la función error por medio de las ecuaciones (3) y (4).
- Si se cumple la función error entonces la temperatura es la correcta, si no es así entonces:

Calcular una nueva temperatura por medio de:

$$T_{n+1} = T \frac{dF_{un}}{d\left(\frac{1}{T}\right)} - T \cdot F_{un}$$

- Normalizar las composiciones (solo en constantes de equilibrio no ideales):

$$x_i = \frac{x_i}{\sum x_i}$$

$$y_i = \frac{y_i}{\sum y_i}$$

- ir al segundo inciso.

CALCULO DE UN FLASH ISOTERMICO.

El nombre de Flash Isotérmico se asigna comúnmente a un sistema similar al de la figura anterior, pero con la diferencia de que las variables especificadas son la temperatura y la presión de salida; quedando de incógnita en este caso la relación V/F. Las ecuaciones (3) y (4) siguen siendo válidas para describir el proceso, por lo tanto, la función error anterior también es válida; pero ahora se derivará con respecto a la relación V/F y la secuencia de cálculo queda de la siguiente manera:

- Dar las condiciones iniciales y suponer una relación V/F.
- Calcular las constantes de equilibrio.
- Calcular las composiciones en las dos fases por medio de las ecuaciones (3) y (4).
- Calcular las derivadas de las composiciones con respecto a la variable V/F.
- Calcular la función error.
- Si la función error se cumple, la relación V/F es correcta, si no:
- Calcular la nueva relación V/F por medio de:

$$\left[\frac{V}{F} \right]_{n+1} = \left[\frac{V}{F} \right]_n - \frac{\text{Fun}}{d \left(\frac{V}{F} \right)}$$

- Si son constantes de equilibrio no ideales ir al segundo inciso, si no es así, ir al tercer inciso.

ANALISIS DE GRADOS DE LIBERTAD EN COLUMNAS DE DESTILACION.

En el análisis de cualquier sistema, es indispensable conocer los grados de libertad del mismo, lo cual se define como el número de variables necesarias que deben especificarse para definir completamente un sistema, o sea:

Grados de libertad = Número de variables - Número de ecuaciones y restricciones inherentes.

En una columna de destilación, las variables con las que un diseñador se enfrenta son:

- Temperaturas.
- Presiones.
- Concentraciones en cada flujo.
- Cantidades de cada flujo.
- Cargas Térmicas.

Las tres primeras variables son intensivas, o sea, independientes de la cantidad de materia presente, no así las otras dos que son extensivas.

Las ecuaciones y restricciones independientes se dividen en:

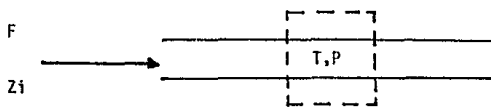
- Balances de masa.
- Balances de energía.
- Distribucion de los componentes en las fases (constantes de equilibrio).
- Restricciones inherentes.

Las restricciones inherentes quedan ilustradas por medio del concepto de etapa teórica en donde el vapor saliente V_j está en equilibrio con el líquido saliente L_j por lo tanto es inherente que:

$$V_j \Big|_{P,T} = L_j \Big|_{P,T}$$

ANÁLISIS DE GRADOS DE LIBERTAD EN COLUMNAS DE DESTILACION.

Para hacer un análisis de los grados de libertad de una columna de destilación, es necesario separar cada uno de los elementos que la constituyen. Por ejemplo, para un flujo en una fase se tiene:



Donde el número de variables es:

- Presión 1
- Temperatura 1
- Flujo (cantidad) 1
- Composiciones c

Ecuaciones independientes:

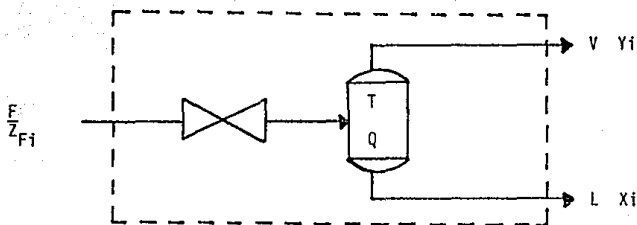
- $\sum X_i = 1$ 1

Por lo tanto el número de grados de libertad es:

$$NGL = 1 + 1 + 1 + C - 1 = \underline{C + 2}$$

Este es el número de variables que especifican a un flujo cualquiera.

Flujo en dos fases:



Número de variables

- 3 Flujos $3(C+2)$
- Pérdida de calor 1

- Total $3C+7$

Número de ecuaciones y restricciones inherentes.

- Balance de energía 1
- Balance por componentes C
- Relaciones de equilibrio C
- Inherentes* 2

- Total $2C+3$

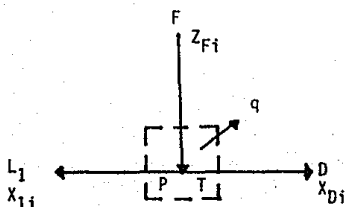
$$NGL = (3C+7) - (2C+3) = C+4$$

Que son:

- Especificación de la alimentación $C+2$
- Presión o temp. de salida 1
- Relación V/F o q. 1

*T y P son iguales en L y V por estar en equilibrio.

Divisor de flujo:



Número de variables

- 3 Flujos $3(C+2)$
 - Pérdida de calor 1

- Total $3C+7$

Número de ecuaciones y restricciones inherentes.

- Balance total de masa 1
 - Balance total de energía 1
 - P y T iguales en L y D 2
 - Composiciones iguales en F y L C-1
 - Composiciones iguales en F y D C-1

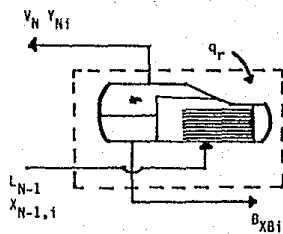
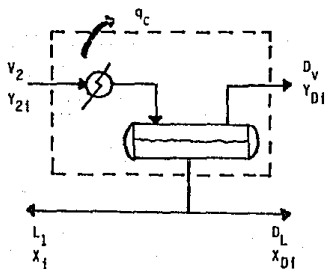
- Total $2C+2$

$$NGL = (3C+7) - (2C+2) = C+5$$

Que son:

- Especificaciones de la alimentación. $C+2$
- Pérdida o ganancia de calor 1
- Relación L/D o L/F 1
- Presión o temp. de salida 1

Condensador o reboilidor:



Número de Variables

- 3 Flujos $3(C+2)$

- Qr o Qc 1

- Total $3C+7$

Número de ecuaciones y restricciones inherentes.

- Balances por componente C

- Relaciones de equilibrio C

- Balance total de energía 1

- T y P iguales en las salidas 2

- Total $2C+3$

$$NGL = (3C+7) - (2C+3) = C+4$$

Que son:

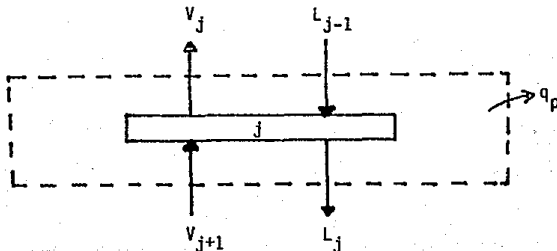
- Especificaciones de la alimentación C+2

- Presión de salida 1

- Temperatura de salida o Qr o Qc 1

Cabe aclarar que si son condensadores o rehedvidores totales Qc o Qr es igual a la entalpia de vaporización y la temperatura de salida es igual a la temperatura de burbuja para el condensador y para el rehedvidor es igual a la temperatura de rocío.

Plato teórico convencional:



Número de variables

Número de ecuaciones y restricciones inherentes.

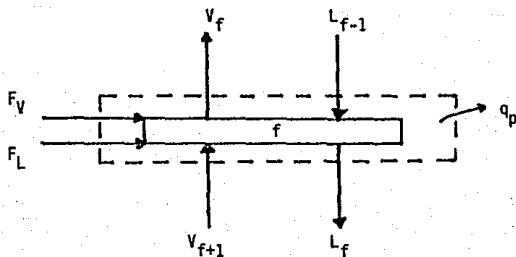
- 4 Flujos	$4(C+2)$	- Balances por componente	C
- Pérdida de calor	1	- Relaciones de equilibrio	1
		- Balance total de energía	1
		- T igual en V_j y L_j	1
		- P igual en V_j y L_j	1
<hr/>		<hr/>	
- Total	$4C+9$	- Total	$2C+3$

$$NGL = (4C+9) - (2C+3) = \underline{2C+6}$$

Que son:

-	Especificaciones de V_{j+1}	$C+2$
-	Especificaciones de L_{j-1}	$C+2$
-	Presión en la etapa	1
-	Transferencia de calor en la etapa	1

Plato de alimentación:



Número de variables

- 6 Flujos $6(C+2)$
- Pérdida de calor 1

- Total $6C+13$

Número de ecuaciones y restricciones inherentes

- Balances por componente C
- Relaciones de equilibrio C
- Balance total de energía 1
- T y P iguales en L_f y V_f 2

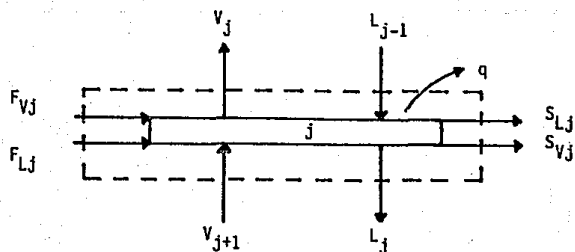
- Total $2C+3$

$$NGL = (6C+13) - (2C+3) = \underline{4C+10}$$

Que son:

- Especificaciones de la alimentación líquida $C+2$
- Especificaciones de la alimentación vapor $C+2$
- Especificaciones de V_{f+1} $C+2$
- Especificaciones de L_{f-1} $C+2$
- Presión en la etapa 1
- Transferencia de calor en la etapa 1

Plato teórico complejo:



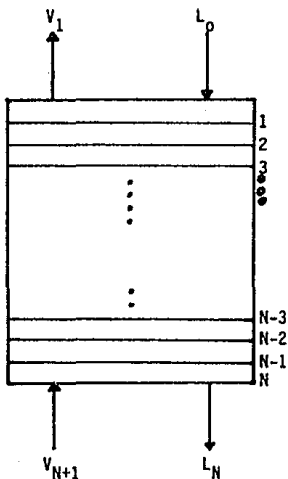
Número de variables.		Número de ecuaciones y restricciones inherentes.	
- 8 Flujos	$8(C+2)$	- Balances por componente	C
- Pérdida de calor	1	- Relaciones de equilibrio	C
		- Balance total de energía	1
		- T y P iguales en V_j y L_j	2
		- T y P iguales en V_j y S_vj	2
		- T y P iguales en L_j y Sl_j	2
		- Comp. iguales en V_j y S_vj	$2(C-1)$
		- Comp. iguales en L_j y Sl_j	$2(C-1)$
<hr/>	<hr/>	<hr/>	<hr/>
-Total	$8C+17$	- Total	$4C+5$

$$NGL = (8C+17) - (4C+5) = \underline{4C+12}$$

Que son:

-	Especificaciones de la alimentación líquida	C+2
-	Especificaciones de la alimentación vapor	C+2
-	Especificaciones de V_{j+1}	C+2
-	Especificaciones de L_{j-1}	C+2
-	Flujo en Sl_j	1
-	Flujo en S_vj	1
-	Transferencia de calor en la etapa	1
-	Presión en la etapa	1

Sección de una columna de platos convencionales:



Número de variables

Número de ecuaciones y restricciones inherentes.

- N etapas teóricas $N(2C+6)$

- $2(N-1)$ Flujos interelementos comunes:
 $2(N-1)(C+2)$

- Número de etapas 1

- Total $2NC+6N+1$

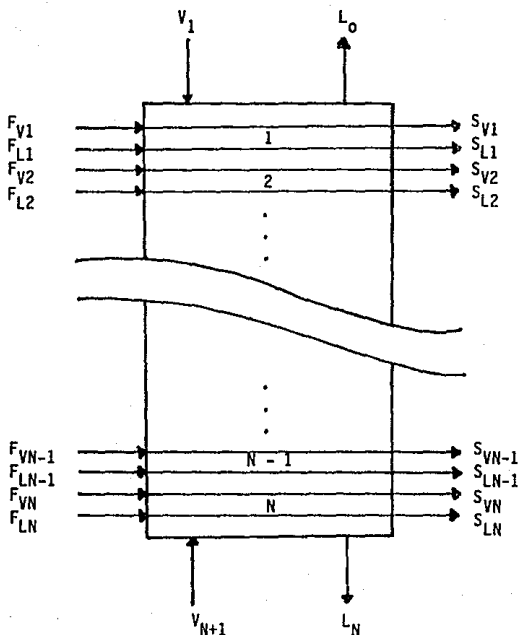
- Total $2NC+4N-2C-4$

$$NGL = (2NC+6N+1) - (2NC+4N-2C-4) = 2N+2C+5$$

Que son:

- Presión en cada etapa N
- Transferencia de calor en cada etapa N
- Especificaciones de las alimentaciones al sistema $2(C+2)$
- Número de etapas 1

Sección de una columna de platos complejos:



Número de variables

- Etapas complejas $N(4C + 12)$
- Número de etapas 1

- Total $4NC + 12N + 1$

Número de ecuaciones y restricciones inherentes.

- Flujos interelementos: $2(N-1)(C+2)$

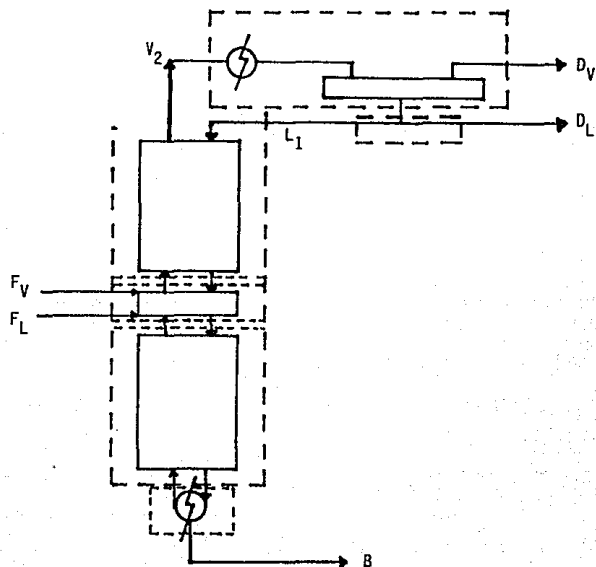
- Total $2NC + 4N - 2C - 4$

$$NGL = (4NC + 12N + 1) - (2NC + 4N - 2C - 4) = \underline{2NC + 8N + 2C + 5}$$

Que son:

-	Presión en cada etapa	N
-	Transferencia de calor en cada etapa	N
-	Especificación de alimentaciones	$2N(C+2)$
-	Flujo de salidas	$2N$
-	Especificaciones de las alimentaciones	$2(C+2)$
-	Número de etapas	1

Columna de destilación convencional:



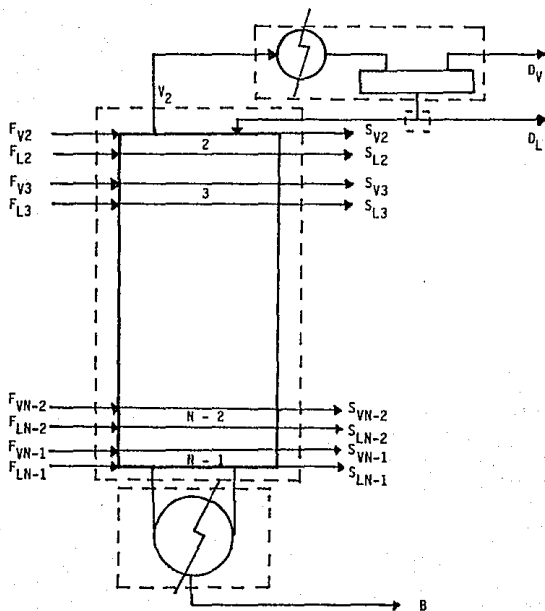
Número de variables		Número de ecuaciones y restricciones inherentes.	
- Condensador	C+4	- 9 Flujos interelementos	9(C+2)
- Divisor de reflujo	C+5		
- (f-2) etapas	2(f-2)+2C+5		
- Etapa de alimentación	4C+10		
- N-(f+1) etapas	2(N-f+1)+2C+5		
- Rehervidor	C+4		
<hr/>		<hr/>	
- Total	2N+11C+27	- Total	9C+18

$$NGL = (2N+11C+27) - (9C+18) = \underline{2N+2C+9}$$

Que son:

-	Presión en cada etapa (incluye al condensador y el rehervidor)	N
-	Transferencia de calor en cada etapa	N-2
-	Pérdida de calor y presión en el divisor de flujo	2
-	Número de etapas	1
-	Localización del plato de alimentación	1
-	Especificación de la alimentación (liq. y vap.)	2(C+2)
-	Destilado total	1
-	Relación L1/D o Qr	1
-	Relación Dv7D o Qc	1

Columna de destilación compleja:



Número de variables:

- Condensador $C+4$
- Divisor de flujo $C+5$
- Sección de (N-2) etapas:
 $2C(N-2)+8(N-2)+2C+5$
- Rehervidor $C+4$

- Total $2CN+8N+C+2$

Número de ecuaciones y restricciones inherentes.

- 5 Flujos interelementos $5(C+2)$

- Total $5C+10$

$$NGL = (2CN + 8N + C + 2) - (5C + 10) = \underline{2CN + 8N - 4C - 8}$$

Que son:

- Presión en cada etapa (incl. cond. y rehervidor) N
- Transferencia de calor en cada etapa $(N-2)$
- Pérdida de calor y presión en el divisor de flujo 2
- Especificación de las alimentaciones (liq. y vap.) $2(N-2)(C+2)$
- Flujo de salida (liq. y vap.) $2(N-2)$
- Destilado total 1
- Relación L1/D o Q_c 1
- Relación Dv/D o Q_r 1
- Número de platos 1

CAPITULO II

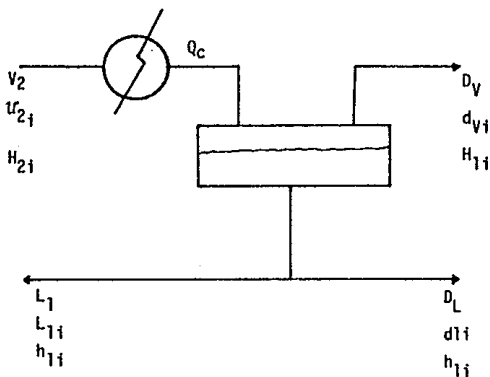
METODO THETA PARA TORRES DE DESTILACION CONVENCIONALES

Planteamiento analítico.

El método theta de convergencia, fue desarrollado como un procedimiento de cálculo iterativo, en el cual las composiciones obtenidas de la iteración anterior son corregidas por medio de un multiplicador que se obtiene mediante un balance general de materia en la columna, con esto es posible obtener un nuevo perfil de temperaturas que junto con los balances de energía plato por plato, nos permitirán obtener nuevos perfiles de flujos líquidos y flujos de vapor, mismos que serán empleados en la siguiente iteración. Los balances de masa por componentes (que son utilizados para calcular los nuevos flujos de líquidos y de vapor por componentes y con estos las composiciones), son reacomodados de forma tal que su solución pueda ser planteada por medio de una matriz tridiagonal, con lo cual se puede reducir el tiempo de cálculo y el espacio de memoria necesaria para almacenar todos los datos.

El multiplicador en cuestión, denotado por la letra griega Θ , es en si una medida de que tan alejados nos encontramos de la solución del sistema; cuando la solución ha sido alcanzada, el valor del multiplicador es igual a la unidad, entoces no se producen cambios en las composiciones y por lo tanto, los perfiles de temperaturas, flujos de líquidos y flujos de vapor quedan constantes y cumplen con los balances de materia y de energía, los cuales serán tratados a continuación.

Balances de masa y de energía involucrados.
Condensador.



$$D = D_V + D_L \quad (1)$$

$$d_i = d_{Vi} + d_{Li} \quad (2)$$

Se tiene que $(L_1 + D_L)$ y D_V están en equilibrio, por lo tanto:

$$\frac{d_{Vi}}{D_V} = K_{1i} \quad \frac{L_{1i}}{L_1} \quad \text{despejando } L_{1i}: L_{1i} = \frac{L_1}{D_V K_{1i}} d_{Vi} \quad (3)$$

También se tiene que:

$$\frac{d_{Vi}}{D_V} = K_{1i} \quad \frac{d_{Li}}{D_L} \quad (4)$$

Utilizando las ecuaciones (2) y (4) se obtiene:

$$d_{Vi} = \frac{D_V K_{1i}}{D_L + D_V K_{1i}} d_{Li} \quad (5)$$

Sustituyendo (5) en (3):

$$l_{1i} = \frac{L_1}{D_L + D_V K_{1i}} d_i$$

Donde:

$$A_{1i} = \frac{L_1}{D_L + D_V K_{1i}} \quad (\text{II.1})$$

Por lo tanto:

$$l_{1i} = A_{1i} d_i \quad (\text{II.2})$$

$A_{1,i}$ es el factor de absorción del condensador; si este es total se tiene que $D_v=0$, $D=D_L$ y $A_{1,i}=L_1/D$, Si solo se extrae el vapor como destilado se tiene que $D=D_v$ y $A_{1,i}=L_1/(D*K_{1,i})$.

Balance por componente del condensador:

$$U_{2i} = l_{1i} + d_{vi} + d_{li} \quad (6)$$

Sustituyendo (2) y (II.2) en (6) y reordenando tenemos:

$$-(A_{1i} + 1) d_i + U_{2i} = 0 \quad (7)$$

Por medio del balance total de energía se obtiene:

$$Q_c = (L_1 + D_L) \sum_{i=1}^c (H_{2i} - h_{1i}) X_{1i} + D_v \sum_{i=1}^c (H_{2i} - H_{1i}) Y_{Di} \quad (\text{II.4})$$

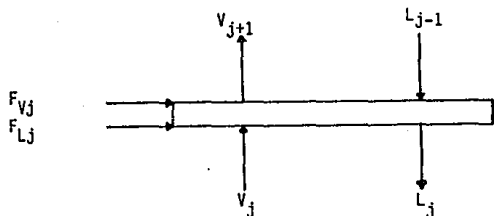
Que es la ecuación necesaria para obtener el valor de la carga térmica del condensador.

La ecuación (7) puede quedar de la siguiente forma:

$$-\left(A_{1i} + 1\right) d_i + \mathcal{U}_{2i} = -F_{V_{2i}} \quad (II.3)$$

Si se considera que la parte vapor de la alimentación del plato número 2 entra directamente al condensador.

Plato "J".



En este planteamiento se considerará que en cada plato puede entrar una alimentación. Balance por componentes:

$$\mathcal{U}_{j+1,i} + l_{j-1,i} + F_{V_{ji}} + F_{L_{ji}} = \mathcal{U}_{ji} + l_{ji} \quad (1)$$

El factor de absorción para el plato "j" viene dado por la expresión:

$$A_{ji} = \frac{L_j}{V_j K_{ji}} \quad (II.5)$$

De esto se deduce que:

$$l_{ji} = A_{ji} \mathcal{U}_{ji} \quad (2)$$

Sustituyendo (2) en (1) y reordenando se obtiene:

$$A_{j-1,i} \mathcal{U}_{j-1,i} - \left(A_{ji} + 1\right) \mathcal{U}_{ji} + \mathcal{U}_{j+1,i} = -F_{V_{ji}} - F_{L_{ji}}$$

Con el fin de optimizar el proceso, se consideró que la alimentación vapor es introducida en el plato superior, por lo tanto se tiene:

$$A_{j-1,i} U_{j-1,i} - (A_{j,i} + 1) U_{j,i} + U_{j+1,i} = - \left[F_{U_{j+1,i}} + F_{L_{j,i}} \right] \quad (II.6)$$

El balance total de masa y el balance total de energía vienen dados por las siguientes expresiones:

$$H_{j+1} V_{j+1} + h_{j-1} L_{j-1} + H_{F_{j+1}} F_{V_{j+1}} + h_{F_j} F_{L_j} = H_j V_j + h_j L_j - Q_p \quad (3)$$

$$V_{j+1} = L_j + V_j - L_{j-1} - F_{V_{j+1}} - F_{L_j} \quad (4)$$

Sustituyendo la ecuación (4) en la (3) y reagrupando obtenemos las siguientes expresiones:

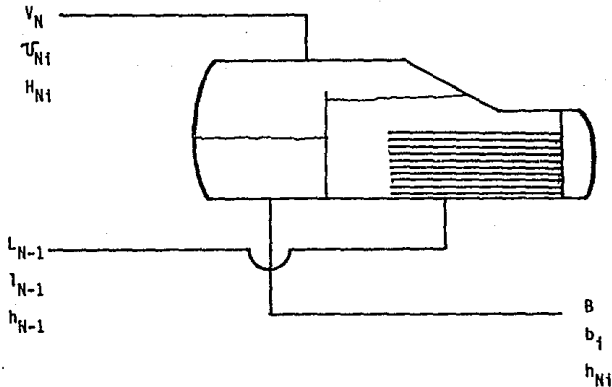
$$L_j = \frac{1}{\sum_{i=1}^c (h_{j,i} - H_{j+1,i}) X_{j,i}} \left[\begin{aligned} & V_j \sum_{i=1}^c (H_{j+1,i} - H_{j,i}) Y_{j,i} + \\ & L_{j-1} \sum_{i=1}^c (h_{j-1,i} - H_{j+1,i}) X_{j-1,i} + \\ & F_{V_{j+1}} \sum_{i=1}^c (H_{F_{j+1,i}} - H_{j+1,i}) Y_{F_{j+1,i}} + \\ & F_{L_j} \sum_{i=1}^c (h_{F_{j,i}} - H_{j+1,i}) X_{F_{j,i}} + Q_p \end{aligned} \right] \quad (II.7)$$

Donde:

$$V_{j+1} = V_j + L_j - F_{V_{j+1}} - F_{L_j} - L_{j-1} \quad (II.8)$$

Las ecuaciones (II.6), (II.7) y (II.8), son utilizadas desde $j=2$ hasta $j=(\text{número de platos}-1)$, Q_p representa la carga térmica (positiva si se le adiciona o viceversa), con el fin de simular pérdidas de calor o calentadores y enfriadores interetapas.

Rehervidor.



Balance por componente:

$$T_{Ni} + b_i = L_{N-1,i} \quad (1)$$

$$\frac{T_{Ni}}{V_N} = K_{Ni} \frac{b_i}{B} \quad \text{o sea que: } b_i = \frac{B}{V_N K_{Ni}} T_{Ni}$$

Por lo tanto:

$$A_{Ni} = \frac{B}{V_N K_{Ni}} \quad \text{Y } b_i = A_{Ni} T_{Ni} \quad (2)$$

Sustituyendo (2) en (1) y reagrupando:

$$A_{N-1,i} T_{N-1,i} - (A_{Ni} + 1) T_{Ni} = 0 \quad (II.9)$$

Por medio de un balance de energía en el rehervidor:

$$QR = B \sum_{i=1}^C (h_{N-1,i} - h_{Ni}) X_{Ni} + V_N \sum_{i=1}^C (h_{N-1,i} - H_{Ni}) Y_{Ni} \quad (II.10)$$

Una vez establecidos los balances de masa y energía en la columna se tiene que las ecuaciones (II.3), (II.6) y (II.9) pueden ser establecidas en la siguiente forma matricial:

$$= A_i = \begin{bmatrix} -P_{1i} & 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ A_{1j} & -P_{2i} & 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & A_{f-2,i} & -P_{f-1,i} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{f-1,i} & -P_{fi} & 1 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & A_{N-2,i} & -P_{N-1,i} & 1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & A_{N-1,i} & -P_{Ni} \end{bmatrix}$$

Donde: $P_{ji} = (A_{ji} + 1)$

Y la solución viene dada por: $\bar{A}_i \bar{U}_i = \bar{F}_i$

$$\bar{U}_i = [d_i \ U_{2i} \ U_{3i} \ \dots \ U_{f-1,i} \ U_{fi} \ \dots \ U_{N-1,i} \ U_{Ni}]$$

$$\bar{F}_i = [0 \ 0 \ \dots \ F_{Vf} \ F_{Lf} \ \dots \ 0 \ 0]$$

La matriz A es una matriz tridiagonal, la cual no es necesario invertir para obtener la solución a los valores de los flujos vapor por componente, ya que puede resolverse por medio del algoritmo de Thomas, creado para resolver el siguiente sistema de ecuaciones lineales independientes:

$$b_1x_1 + c_1x_2 = d_1$$

$$a_2x_1 + b_2x_2 + c_2x_3 = d_2$$

$$a_3x_2 + b_3x_3 + c_3x_4 = d_3$$

.....
.....

$$a_{N-1}x_{N-2} + b_{N-1}x_{N-1} + c_{N-1}x_N = d_{N-1}$$

$$a_Nx_{N-1} + b_Nx_N = d_N$$

$$f = \frac{c_1}{b_1}$$

$$g_1 = \frac{d_1}{b_1}$$

$$f_K = \frac{c_K}{b_K - a_K f_{K-1}}$$

$$K = 2, 3, \dots, N-1$$

$$g_K = \frac{d_K - a_K g_{K-1}}{b_K - a_K f_{K-1}}$$

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

$$x_N = g_N$$

$$x_k = g_k - f_k x_{k-1}$$

$$K = N-1, N-2, \dots, 2, 1$$

Para nuestro caso las fórmulas de recurrencia se transforman en:

$$f_1 = \frac{1}{-(A_{1i+1})} \quad g_1 = \frac{F_{V2i}}{-(A_{1i} + 1)} = F_{V2i} f_1$$

$$f_j = \frac{1}{-(A_{j+1}) - A_{j-1,i} f_{j-1}} \quad j = 2, 3, \dots, N-1$$

$$g_j = \frac{-(F_{V_{j+1,i}} + F_{L_{j+1,i}}) - a_{j-1,i} g_{j-1}}{-(A_{j+1}) - A_{j-1,i} f_{j-1}}$$

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

$$U_{Ni} = g_N$$

$$U_{ji} = g_j - f_j U_{j+1,i}$$

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

Ecuaciones (II.11)

En estas fórmulas se considera que la parte vapor de las alimentaciones entran en el plato superior.

Para el cálculo de los flujos líquidos por-componentes se recurre a las siguientes fórmulas, obtenidas mediante balances de masa por componentes:

$$l_{1i} = U_{2i} - d_i \quad (II.12)$$

$$d l_i = \left(\frac{DL}{L_1} \right) l_{1i} \quad (II.13)$$

$$d_{Vi} = d_i - d l_i \quad (II.14)$$

Por medio de un balance por componente del plato "j":

$$l_{ji} = F_{V_{j+1,i}} + F_{L_{j+1,i}} + l_{j-1,i} + U_{j+1,i} - U_{ji} \quad (II.15)$$

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

Y por último:

$$b_i = l_{N-1,i} - U_{Ni} \quad (II.16)$$

DESARROLLO DEL METODO THETA DE CONVERGENCIA PARA COLUMNAS DE DESTILACION CONVENCIONALES.

Consideremos el balance total de la columna por componente:

$$\sum_{k=1}^{NF} F_k Z_{k,i} = d_{i,co} + b_{i,co}$$

Donde:

- NF = Número de alimentaciones.
- F_k = Flujo de las alimentaciones.
- $Z_{k,i}$ = Composición del componente i en la alimentación k.
- $d_{i,co}$ = Destilado corregido.
- $b_{i,co}$ = Fondo corregido.

Por definición, los flujos corregidos en el domo y el fondo vienen dados por la expresión:

$$\left(\frac{b_{i,co}}{d_{i,co}} \right) = \theta \left(\frac{b_{i,ca}}{d_{i,ca}} \right)$$

Donde:

- $b_{i,ca}$ = Fondo calculado de la última iteración.
- $d_{i,ca}$ = Domo calculado de la última iteración.

Combinando las dos últimas ecuaciones se tiene:

$$d_{i,co} = d_{i,ca} P_i$$

Donde:

$$P_i = \frac{\sum_{k=1}^{NF} F_k Z_{k,i}}{d_{i,ca} + \theta b_{i,ca}}$$

(II.17)

La solución es correcta cuando se cumple con la siguiente ecuación:

$$D = \sum_{i=1}^c \text{dico}$$

Donde se observa que el método theta de convergencia consiste en obtener el valor del multiplicador θ que cumpla con la siguiente función error:

$$g(\theta) = D - \sum_{i=1}^c \text{dico } P_i \quad (\text{II.18})$$

Para obtener la solución de esta función error, se utiliza el método de Newton de primer orden, donde:

$$g'(\theta) = \frac{d g(\theta)}{d(\theta)} = \sum_{i=1}^c \text{dico} \frac{\sum_{k=1}^{NF} F_k Z F_{ki} \text{ bica}}{(\text{dico} + \theta \text{ bica})^2}$$

$$Y: \theta_{N+1} = \theta_N - \frac{g(\theta)}{g'(\theta)}$$

(II.19)

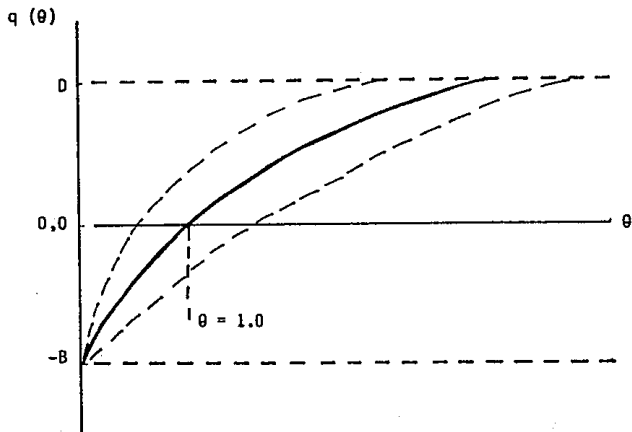
Una vez obtenido el valor de theta que satisfaga la ecuación (II.18), se corrigen las composiciones mediante:

$$x_{ji} = \frac{l_{ji} P_i}{\sum_{i=1}^c l_{ji} P_i} \quad (\text{II.20})$$

$$y_{ji} = \frac{v_{ji} P_i}{\sum_{i=1}^c v_{ji} P_i} \quad (\text{II.21})$$

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

La siguiente gráfica nos muestra el valor de la función error a valores positivos de theta:



Según los valores iniciales tomados, la curva puede tomar la forma de cualquiera de las líneas punteadas, mientras nos acercamos a la solución la función tomará el valor de la curva continua.

SECUENCIA DE CALCULO.

I) INICIALIZACION.

Se piden los siguientes datos:

- Número de componentes y sus datos termodinámicos.
- Número de platos.
- Relación L/D.
- Relación Dv/D.
- Destilado total.
- Presión en cada plato.
- Transferencia de calor en cada plato.
- Número de alimentaciones:
Composición, flujo, localización y sus relación V/F o T_F .

II) SUPONER UN PERFIL DE TEMPERATURAS Y FLUJOS DE VAPOR O RELACIONES L_j/V_j .

III) CALCULAR LOS FACTORES DE ABSORCION.

- Ecuaciones (II.1) y (II.5).

IV) RESOLVER LA MATRIZ TRIDIAGONAL Y CALCULAR LOS FLUJOS $V_{j,i}$.

- Ecuación (II.11).

V) CALCULAR LOS FLUJOS DE LIQUIDO POR COMPONENTE.

- Ecuaciones (II.12), (II.13), (II.14), (II.15) y (II.16).

VI) CON LOS VALORES OBTENIDOS DE b_i Y d_i APLICAR EL METODO THETA DE CONVERGENCIA.

- Ecuaciones (II.17), (II.18) y (II.19).

VII) CALCULAR LAS COMPOSICIONES CORREGIDAS EN EL LIQUIDO Y EN EL VAPOR.

- Ecuaciones (II.20) y (II.21).

VIII) CALCULAR LOS NUEVOS PERFILES DE TEMPERATURAS.

- Por medio de puntos de rocío, utilizando las nuevas composiciones obtenidas del inciso anterior.

IX) CALCULAR LOS NUEVOS PERFILES DE FLUJOS DE LIQUIDOS Y DE VAPOR.

- Ecuaciones (II.4), (II.7), (II.8) y (II.10).

X) CHECAR CONVERGENCIA.

- Si $\theta \approx 1.0$ imprimir los resultados, si no es así ir al inciso III).

CAPITULO III

MODIFICACION DEL METODO THETA DE CONVERGENCIA PARA COLUMNAS DE DESTILACION COMPLEJAS.

Tipos de columnas complejas.

Con el fin de optimizar el tiempo de cálculo y simplificar el modelo matemático en cuestión, se dividió en tres tipos a las columnas de destilación; el primer grupo es aquel en el cual existe una sola alimentación y las extracciones son el destilado vapor, el destilado líquido y el fondo, o también puede ser una columna con dos o más alimentaciones y las mismas extracciones.

Para este tipo de columnas, se utiliza el procedimiento de cálculo descrito en el capítulo dos y fueron denominadas columnas de destilación convencionales.

Los otros dos tipos de columnas de destilación serán tratados en este capítulo y se hará referencia a ellos como columna de destilación compleja I y columna de destilación compleja II (ver figura I y figura II).

En este trabajo se define a una columna compleja I como aquel tipo de columna compuesta por platos teóricos complejos (ver capítulo uno), esto es, con múltiples alimentaciones y extracciones laterales.

Una columna de destilación compleja II es aquel tipo de columna compuesta por platos teóricos complejos, y en donde una o más extracciones pueden ser calentadas o enfriadas y son recirculadas, ya sea total o parcialmente al mismo u otro plato de la columna.

A continuación se muestra un ejemplo de ambos tipos de columnas:

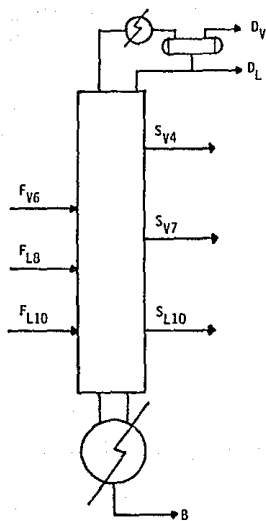


FIGURA I

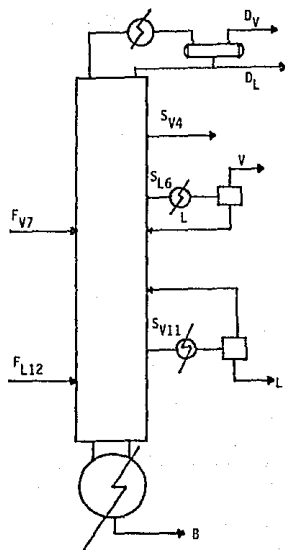


FIGURA II

Planteamiento analítico.

El método theta de convergencia, fue definido en el capítulo anterior como un procedimiento de cálculo iterativo, en el cual las composiciones de la iteración anterior son corregidas por medio de un multiplicador denominado O que se obtiene mediante un balance de masa en la columna. Ahora bien, en el caso de columnas complejas, el método theta se define como un procedimiento iterativo, en el cual las composiciones de la iteración anterior son corregidas por medio de un multiplicador denominado P_i , el cual es a su vez función de " N " multiplicadores theta, cuyo número depende del número de extracciones presentes en la columna, y que además, en el caso de una columna compleja II , P_i es dependiente de la cantidad de materia recirculada a la columna.

Los balances de masa por componente se siguen resolviendo por medio de una matriz tridiagonal aunque en cada caso son modificados para poder considerar las extracciones laterales y las recirculaciones, lo mismo sucede con las ecuaciones necesarias para obtener los nuevos perfiles de flujos de líquidos y flujos de vapor.

Para la obtención de los " N " multiplicadores theta involucrados, se utilizarán " N " funciones error independientes basadas en balances de materia en la columna y se resolverán a través del método de Newton-Raphson, al igual que el planteamiento del capítulo anterior, la solución se encontrará, cuando los " N " multiplicadores theta sean igual a la unidad (o muy próximos debido a errores de truncamiento) y cumplan con las funciones error.

Balances de masa y energía involucrados.

Condensador.

El planteamiento matemático no sufre modificaciones con respecto al efectuado en el capítulo anterior, por lo tanto, se utilizarán las mismas ecuaciones:

$$A_{1f} = \frac{L_1}{D_L + D_V K_{1f}} \quad (\text{III.1})$$

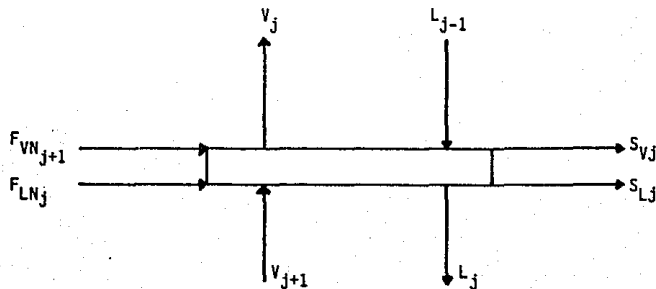
$$l_{1f} = A_{1f} d_f \quad (\text{III.2})$$

$$d_f = d_{vi} + d_{li} \quad (\text{III.3})$$

$$- (1 + A_{1f}) df + v_{2f} = -F_{VN2f} \quad (\text{III.4})$$

$$Q_c = (L_1 + D_L) \sum_{i=1}^c (H_{2i} - h_{1i}) X_{1f} + D_V \sum_{i=1}^c (H_{2i} - H_{1i}) Y_{Df} \quad (\text{III.5})$$

Plato "J".



El balance por componente viene dado por la expresión:

$$V_{ji} + l_{ji} + S V_{ji} + S l_{ji} = F_{VN_{j+1,i}} + F_{LN_{ji}} + V_{j+1,i} + l_{j-1,i}$$

Donde:

$$l_{ji} = A_{ji} V_{ji} \quad S l_{ji} = \frac{S L_j}{L_j} l_{ji} \quad S V_{ji} = \frac{S V_j}{V_j} V_{ji}$$

Sustituyendo estas ecuaciones en la primera expresión y reordenando se obtiene:

$$A_{j-1,i} V_{j-1,i} - \left[1 + \frac{S V_j}{L_j} + A_{ji} \left(1 + \frac{S L_j}{L_j} \right) \right] V_{ji} + V_{j+1,i} = - \left[F_{VN_{j+1,i}} + F_{LN_{ji}} \right] \quad j = 2, 3, \dots (N-1)$$

(III.6)

$$A_{ji} = \frac{L_j}{K_{ji} V_j}$$

Los balances de masa y energía para el plato "j" vienen dados por:

$$H_{j+1} V_{j+1} + h_{j-1} L_{j-1} + H_{FN_{j+1}} F_{VN_{j+1}} + h_{FN_{ji}} F_{LN_{ji}} =$$

$$H_j V_j + h_j L_j + H_j S V_j + h_j S L_j - Q_p$$

$$V_{j+1} = L_j + V_j + S V_j + S L_j - L_{j-1} - F_{VN_{j+1}} - F_{LN_j}$$

Sustituyendo la segunda expresión en la primera ecuación y reordenando se obtiene:

$$L_j = \frac{1}{X_{ji} (H_{j+1,i} - h_{ji})} \left[\begin{aligned} & (V_j + S_{V_j}) \sum_{i=1}^c Y_{ji} (H_{j+1,i} - H_{ji}) + \\ & S_{L_j} \sum_{i=1}^c (H_{j+1,i} - h_{ji}) X'_{ji} + \\ & F_{VN_{j+1,i}} \sum_{i=1}^c Y_{FN_{j+1,i}} (H_{FN_{j+1,i}} - H_{j+1,i}) + \\ & FLN_{ji} \sum_{i=1}^c X_{FN_{ji}} (h_{FN_{ji}} - H_{j+1,i}) + \\ & L_{j-1} \sum_{i=1}^c X_{j-1,i} (h_{j-1,i} - H_{j+1,i}) + Qp \end{aligned} \right] \quad (III.7)$$

$$j = 2, 3, \dots (N-1)$$

$$V_{j+1} = S_{V_j} + S_{L_j} + L_j + V_j - F_{VN_{j+1}} - F_{LN_j} - L_{j-1} \quad (III.8)$$

$$j = 2, 3, \dots (N-1)$$

En el caso de una columna compleja I se tiene:

$$F_{VN_{j+1}} = F_{V_{j+1}}$$

$$F_{LN_j} = F_{L_j}$$

Y para una columna compleja II se tiene:

$$F_{VN_{j+1}} = F_{V_{j+1}} \quad + \text{vapor recirculado a ese plato}$$

(III.9)

$$F_{LN_j} = F_{L_j} \quad + \text{líquido recirculado a ese plato}$$

También para una columna compleja II, la ecuación (III.7), se cambia por la siguiente ecuación:

$$L_j = \frac{1}{\sum_{i=1}^c X_{ji} (H_{j+1,i} - h_{ji})} \left[\begin{aligned} & (V_j + S_{V_j}) \sum_{i=1}^c Y_{ji} (H_{j+1,i} + H_{ji}) + \\ & S_{L_j} \sum_{j=1}^c (H_{j+1,i} - h_{ji}) X_{ji} + \\ & F_{VN_{j+1}} \sum_{j=1}^c Y_{FN_{j+1}} (H_{FN_{j+1},i} - H_{j+1,i}) + \\ & F_{LN_j} \sum_{j=1}^c (h_{FN_{j,i}} - H_{j+1,i}) X_{FN_{j,i}} + \\ & L_{j-1} \sum_{j=1}^c (h_{j-1,i} - H_{j+1,i}) X_{j-1,i} + Qp + \\ & S_{VE_j} \sum_{i=1}^c (H_{SE_{j,i}} - H_{j+1,i}) Y_{SVE_{j,i}} + \\ & S_{LE_j} \sum_{i=1}^c (h_{SE_{j,i}} - H_{j+1,i}) X_{SLE_{j,i}} \end{aligned} \right]$$

$j = 2, 3, \dots (N-1)$

(III.7b)

Donde:

SV_{E_j} = vapor que recircula al plato "j".

SL_{E_j} = líquido que recircula al plato "j".

Rehervidor.

Al igual que con el condensador, el planteamiento matemático no sufre modificaciones con respecto al capítulo anterior, por lo tanto se tiene:

$$A_{Ni} = \frac{B}{V_N K_{Ni}} \quad (III.10)$$

$$A_{N-1,i} \mathcal{U}_{N-1,i} - (1 + A_{Ni}) \mathcal{U}_{Ni} = 0$$

$$QR = B (h_{N-1,i} - h_{Ni}) X_{Ni} + V_N (h_{N-1,i} - h_{Ni}) Y_{Ni} \quad (III.11)$$

$$(III.12)$$

Debido a las modificaciones hechas a los balances por componentes, las formulas de recurrencia para la resolución de la matriz tridiagonal y con ella el valor de los flujos de vapor por componente se establecen de la siguiente manera:

$$F_1 = \frac{1}{-(1 + A_{1i})} \quad g_1 = F_{V_{2i}} F_1$$

$$F_j = \frac{1}{-\left[1 + \frac{S_{Vj}}{V_u} + A_{ji} \left(1 + \frac{S_{Lj}}{L_j}\right)\right] - A_{j-1,i} F_{j-1}}$$

$$j = 2, 3, \dots (N-1)$$

$$g_j = \left[F_{VN_{j+1,i}} + F_{LN_{ji}} + A_{j-1,i} g_{j-1} \right] F_j$$

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

$$\mathcal{U}_N = g_N$$

$$\mathcal{U}_{ji} = g_j - F_j \mathcal{U}_{j+1,i}$$

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

$$(III.13)$$

Para el cálculo de los flujos líquidos por componente, las fórmulas quedan de la siguiente forma:

$$l_{1i} = r_{2i} - d_i \quad (\text{III.14})$$

$$d_{1i} = \left(\frac{D_L}{L_1} \right) l_{1i} \quad (\text{III.15})$$

$$d_{Vi} = di - d_{1i} \quad (\text{III.16})$$

$$l_{ji} = \frac{1}{\left(1 + \frac{S_{Lj}}{L_j} \right)} \left[F_{VNj+1,i} + F_{LNji} + l_{j-1,i} + r_{j+1,i} - r_{ji} \left(1 + \frac{S_{Vj}}{V_j} \right) \right]$$

$$j = 2, 3, \dots (N-1) \quad (\text{III.17})$$

$$b_{\psi}^j = l_{N-1,i} - r_{N,i} \quad (\text{III.18})$$

DESARROLLO DEL METODO THETA DE CONVERGENCIA PARA UNA COLUMNA COMPLEJA I.

El balance general de la columna por componente viene dado por:

$$\sum_{M=1}^{NF} F_M Z_{F_{Mi}} = d_{i\text{co}} + \sum_{j=1}^{NSV} (SV_{LV_{j,i}})_{\text{co}} + \sum_{K=1}^{NSL} (SL_{LL_{K,i}})_{\text{co}} + b_{i\text{co}}$$

Donde:

- NF= Número de alimentaciones.
- NSV= Número de extracciones de vapor.
- NSL= Número de extracciones del líquido.
- F_M = Flujo de la alimentación "M".
- $Z_{F_{Mi}}$ = Composición del componente i en la alimentación M.
- LV_j = Vector que contiene el número de plato de localización de la extracción de vapor j.
- LL_k = Vector que contiene el número de plato de localización de la extracción líquida k.
- $SV_{LV_{ji}}$ = Flujo del componente i en la extracción del plato $LV(j)$.
- $SL_{LL_{ki}}$ = Flujo del componente i en la extracción del plato $LL(j)$.

Como en el capítulo anterior, los sufijos co y ca corresponden a los flujos corregidos y los flujos calculados de la última iteración respectivamente.

Por definición, los flujos corregidos son obtenidos por medio de:

$$\left(\frac{b_{i\text{co}}^{ca}}{d_{i\text{co}}^{ca}} \right) = \theta_0 \left(\frac{b_{i\text{ca}}^{ca}}{d_{i\text{ca}}^{ca}} \right)$$

$$\left(\frac{SV_{LV_{j,i}}^{ca}}{d_{i\text{co}}^{ca}} \right) = \theta_j \left(\frac{SV_{LV_{j,i}}^{ca}}{d_{i\text{ca}}^{ca}} \right)$$

$j = 1, 2, \dots, NSV$

$$\left(\frac{SL_{LL_{K,i}}^{ca}}{d_{i\text{co}}^{ca}} \right) = \theta_{NSV+K} \left(\frac{SL_{LL_{K,i}}^{ca}}{d_{i\text{ca}}^{ca}} \right)$$

$K = 1, 2, \dots, NSL$

Combinando el balance total de masa por componente con las últimas ecuaciones se obtiene que:

$$P_i = \frac{\sum_{k=1}^{NF} F_k Z_{F_{ki}}}{d_{i\text{ca}}^{ca} + \theta b_{i\text{ca}}^{ca} + \sum_{j=1}^{NSV} \theta_j \left(SV_{LV_{j,i}}^{ca} \right) + \sum_{k=1}^{NSL} \theta_{NSV+K} \left(SL_{LL_{K,i}}^{ca} \right) ca}$$

(III.19)

$$d_{i\text{co}}^{ca} = d_{i\text{ca}}^{ca} P_i$$

(III.20)

$$b_{i\text{co}}^{ca} = \theta_0 b_{i\text{ca}}^{ca} P_i$$

(III.21)

$$\left(SV_{LV_{j,i}} \right)_{co} = \theta_j \left(SV_{LV_{j,i}} \right)_{ca} P_i$$

$$j = 1, 2, \dots, NSV$$

(III.22)

$$\left(SL_{LL_{K,i}} \right)_{co} = \theta_{K+NSV} \left(SL_{LL_{K,i}} \right)_{ca} P_i$$

$$K = 1, 2, \dots, NSL$$

(III.23)

Los flujos corregidos de las ecuaciones (III.29) a (III.23) deben satisfacer las siguientes funciones error:

$$F_0 \left(\theta_0, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{NST} \right) = \left[\sum_{i=1}^c di_{co} \right] - D$$

$$F_j \left(\theta_0, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{NST} \right) = \left[\sum_{i=1}^c \left(SV_{LV_{j,i}} \right)_{co} \right] - SV_{LV_j}$$

$$j = 1, 2, \dots, NSV$$

$$F_K \left(\theta_0, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{NST} \right) = \left[\sum_{i=1}^c \left(SL_{LL_{K,i}} \right)_{co} \right] - SL_{LL_K}$$

$$K = 1, 2, \dots, NSL$$

(III.24)

Donde NST es el número de salidas totales (NST = NSV + NSL).

DESARROLLO DEL METODO THETA DE CONVERGENCIA PARA UNA COLUMNA COMPLEJA II.

Para este caso, el balance general de la columna por componente viene dado por:

$$\sum_{M=1}^{NF} F_{M2} Z_{Mi} = d_{i\text{co}} + \sum_{j=1}^{NSV} (S_{LV_{j,i}})_{\text{co}} + \sum_{K=1}^{NSL} (S_{LL_{k,i}})_{\text{co}} + b_{i\text{co}} \sum_{L=1}^{NSTR} R_{Li}$$

Donde:

- NSTR= Número de salidas que recirculan.
- R_{Li} = flujo total del componente i recirculado.

Los flujos corregidos se siguen obteniendo por medio de las mismas ecuaciones que el caso anterior.

$$\frac{b_{i\text{co}}}{d_{i\text{co}}} = \theta_0 \frac{b_{i\text{ca}}}{d_{i\text{ca}}}$$

$$\left(\frac{S_{LV_{j,i}}}{d_{i\text{co}}} \right) = \theta_j \left(\frac{S_{LV_{j,i}}}{d_{i\text{ca}}} \right)$$

$$j = 1, 2, \dots, NSV$$

$$\left(\frac{SL_{LLk,i} \text{ co}}{di_{co}} \right) = \theta_{K+NSV} \left(\frac{SL_{LLk,i} \text{ ca}}{di_{ca}} \right) \quad k = 1, 2, \dots, NSL$$

Combinando el balance de masa con las relaciones anteriores, se obtiene que:

$$P_i = \frac{\sum_{M=1}^{NF} F_M Z_{F_M,i} + \sum_{L=1}^{NSTR} R_{L,i}}{di_{ca} + \theta b_{i,ca} + \sum_{j=1}^{NSV} \theta_j \left(SV_{LV_{j,i}} \right)_{ca} + \sum_{k=1}^{NSL} \theta_{NSV+K} \left(SL_{LL_{k,i}} \right)_{ca}}$$

$$di_{co} = di_{ca} P_i \quad (III.25)$$

$$b_{i,co} = \theta_0 b_{i,ca} P_i \quad (III.26)$$

$$\left(SV_{LV_{j,i}} \right)_{co} = \theta_j \left(SV_{LV_{j,i}} \right)_{ca} P_i \quad (III.27)$$

$$j = 1, 2, \dots, NSV$$

$$\left(SL_{LL_{k,i}} \right)_{co} = \theta_{K+NSV} \left(SL_{LL_{k,i}} \right)_{ca} P_i \quad (III.28)$$

$$K = 1, 2, \dots, NSL$$

$$(III.29)$$

Por último, los flujos corregidos tienen que satisfacer las siguientes funciones error:

$$F_0(\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_{NST}) = \left[\sum_{i=1}^c d_{co}^i \right] - D$$

$$F_j(\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_{NST}) = \left[\sum_{i=1}^c (SV_{LV_{ji}})_{co} \right] - SV_{LV_j}$$

$$j = 1, 2, \dots, NSV$$

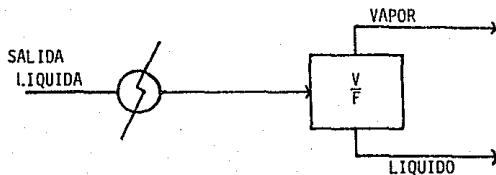
$$F_k(\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_{NST}) = \left[\sum_{i=1}^c (SL_{LL_{ki}})_{co} \right] - SL_{LL_k}$$

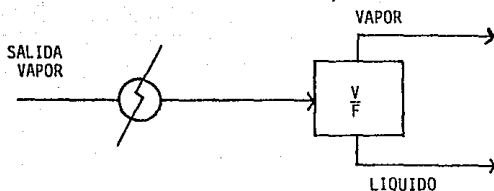
$$k = 1, 2, \dots, NSL$$

(III.30)

Se puede observar que la diferencia del método theta de convergencia entre la columna compleja I y la columna compleja II, es el multiplicador P_i , el cual toma la forma de la ecuación (III.19) para el primer caso, mientras que para el segundo caso toma la forma de la ecuación (III.25).

Con respecto a las recirculaciones, considérense los siguientes diagramas:





En donde en ambos casos, una de las salidas puede ser recirculada.

Se considera que la extracción líquida que sale de la columna como líquido saturado, se le adiciona calor hasta pasarla a vapor saturado o hasta llegar a un determinado valor de relación V/F y una de sus salidas, ya sea líquida o vapor es recirculada a la columna.

Similarmente, la extracción vapor que sale de la columna como vapor saturado, se le sustrae calor hasta llegar a líquido saturado o hasta llegar a un determinado valor de relación V/F y una de sus salidas, ya sea la líquida o la vapor es recirculada a la columna.

Por tanto, existe en ambos casos una relación V/F que será especificada por el usuario quien además deberá especificar que flujo recircula (el líquido o el vapor) y a que plato de la columna. Estos datos son también variables de diseño y se especificarán al inicio del programa.

Como se ha podido observar, el método theta de convergencia en el caso de columnas complejas consiste en buscar los valores de las variables theta que satisfagan las funciones error (III.24) o (III.30), para esto se utilizará el método de Newton-Raphson.

Una vez obtenidos los valores de theta que satisfagan las funciones error, se corrigen las composiciones mediante:

$$X_{ji} = \frac{l_{ji}^{P_i}}{\sum_{k=1}^c l_{ki}^{P_i}} \quad j = 1, 2, \dots, N$$

(III.31)

$$Y_{ji} = \frac{v_{ji}^{P_i}}{\sum_{k=1}^c v_{ki}^{P_i}}$$

(III.32)

Y con estas nuevas composiciones, la secuencia de cálculo es continuada hasta llegar a la convergencia.

SECUENCIA DE CALCULO COLUMNA COMPLEJA I

I) INICIALIZACION.

Se piden los siguientes datos:

- Número de componentes y sus datos termodinámicos.
- Número de platos.
- Relación L1/D.
- Relación Dv/D.
- Destilado total.
- Presión en cada plato.
- Transferencia de calor en cada plato.
- Número de alimentaciones (composición, flujo, localización y su relación V/F o TF).
- Número de extracciones (Flujo y localización).

II) SUPONER UN PERFIL DE TEMPERATURAS Y FLUJOS DE VAPOR O L_j/V_j .

III) CALCULAR LOS FACTORES DE ABSORCION.

- Ecuaciones (III.1), (III.6) y (III.10).

IV) RESOLVER LA MATRIZ TRIDIAGONAL Y CALCULAR LOS FLUJOS $V_{j,i}$.

- Ecuaciones (III.9) y (III.13).

V) CALCULAR LOS FLUJOS LIQUIDOS POR COMPONENTE.

- Ecuaciones (III.9), (III.14) a (III.18).

VI) APLICAR EL METODO THETA DE CONVERGENCIA.

- Ecuaciones (III.19), (III.20) a (III.23) y (III.24).

VII) CALCULAR LAS COMPOSICIONES CORREGIDAS EN EL LIQUIDO Y EN EL VAPOR.

- Ecuaciones (III.31) y (III.32).

VIII) CALCULAR NUEVOS PERFILES DE TEMPERATURAS.

- Por medio de puntos de rocío, utilizando las nuevas composiciones obtenidas en el inciso anterior.

IX) CALCULAR NUEVOS PERFILES DE FLUJOS LIQUIDOS Y VAPOR.

- Ecuaciones (III.5), (III.7), (III.8), (III.9) y (III.12).

X) CHECAR LA CONVERGENCIA.

- Si se cumple la norma Euclidiana imprimir resultados, si no es así, ir al inciso III); se utilizó la siguiente norma Euclidiana:

$$Q = \text{Log} \left(\frac{1}{(NST+1)} \sum_{k=0}^c a_k^2 \right)$$

SECUENCIA DE CALCULO COLUMNA COMPLEJA II

I) INICIALIZACION.

Se piden los siguientes datos:

- Número de componentes y sus datos termodinámicos.
- Número de platos.
- Relación L/D .
- Relación Dv/D .
- Destilado total.
- Presión en cada plato.
- Transferencia de calor en cada plato.
- Número de alimentaciones (composición, flujo, localización, y su relación V/F o TF).
- Número de extracciones (flujo y localización).
- Número de extracciones que recirculan (flujo, localización, V/F , tipo de recirculación, (líquido o vapor), plato a donde recircula).

II) SUPONER UN PERFIL DE TEMPERATURAS Y FLUJOS DE VAPOR O L_j/V_j .

III) CALCULAR LOS FACTORES DE ABSORCION.

- Ecuaciones (III.1), (III.6) y (III.10).
- Calcular los Flashes de las extracciones que recirculan con el fin de obtener la distribución de los componentes en el líquido y en el vapor, con esto es posible calcular cuanta materia es recirculada en la columna además de FV_n y FL_n (Ecuación III.9).

IV) RESOLVER LA MATRIZ TRIDIAGONAL Y CALCULAR LOS FLUJOS $V_{j,i}$.

- Ecuaciones (III.9) y (III.13).

V) CALCULAR LOS FLUJOS LIQUIDOS POR COMPONENTE.

- Ecuaciones (III.9), (III.14), a (III.18).

VI) APLICAR EL METODO THETA DE CONVERGENCIA.

- Ecuaciones (III.25), (III.26), a (III.29) y (III.30).

VII) CALCULAR LAS COMPOSICIONES CORREGIDAS EN EL LIQUIDO Y EN EL VAPOR.

- Ecuaciones (III.31) y (III.32).

VIII) CALCULAR LOS NUEVOS PERFILES DE TEMPERATURAS.

- Por medio de los puntos de rocío, utilizando las nuevas composiciones obtenidas en el inciso anterior.

IX) CALCULAR LOS NUEVOS PERFILES DE FLUJOS DE LIQUIDOS Y DE VAPOR.

- Ecuaciones (III.5), (III.7b), (III.8), (III.9) y (III.12).

X) CHECAR LA CONVERGENCIA.

- Si se cumple la norma Euclidiana imprimir los resultados y si no es así ir al inciso III); se utilizó la siguiente norma euclidiana:

$$Q = \text{Log} \left(\frac{1}{NST + 1} \sum_{k=0}^{NST} \theta_k^2 \right)$$

CAPITULO IV

MODIFICACION DEL METODO THETA DE CONVERGENCIA PARA UN SISTEMA DE "N" COLUMNAS DE DESTILACION INTERCONECTADAS.

Planteamiento analítico.

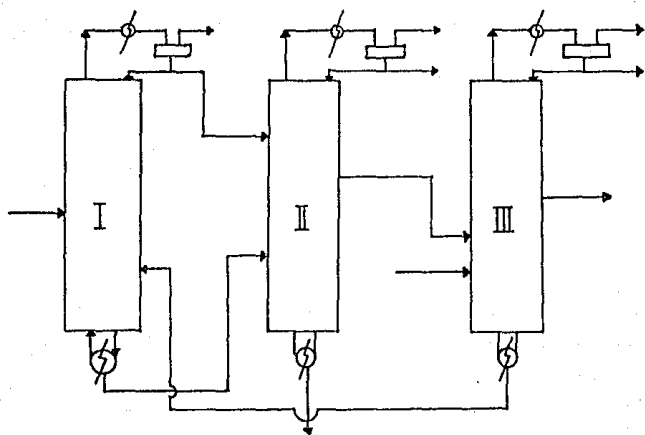
En este capítulo se estudiará una modificación al método theta de convergencia con el fin de que pueda ser aplicado a un sistema de "N" columnas de destilación interconectadas.

En este caso, el método theta de convergencia se define como un procedimiento de cálculo iterativo, en el cual, las composiciones de cada columna son corregidas por medio de un multiplicador P_i para cada columna, el cual es función de la cantidad de materia alimentada a la columna (ya sea que provenga de otra columna o externamente) y de varios multiplicadores theta, cuyo número depende de las extracciones presentes en la columna.

Por otra parte, los balances de masa y energía en cada columna son exactamente iguales a aquellos descritos en el capítulo anterior, para columnas complejas I.

Para los problemas que involucren columnas interconectadas, se obtendrán "N" grupos de multiplicadores theta, donde cada uno de ellos pertenece a una columna en cuestión, y la solución será alcanzada cuando todos los multiplicadores theta pertenecientes a todas las columnas sean iguales a la unidad (o muy próximos debido a errores de truncamiento) y cumplan con las funciones error de cada columna.

A continuación se presenta un ejemplo de un sistema de columnas de destilación interconectadas:



Balances de masa y energía involucrados.

El planteamiento matemático utilizado en este capítulo es en sí una continuación al aplicado en el capítulo anterior, las fórmulas involucradas son:

Condensador

$$A_{1i} = \frac{L_{U,i}}{D_{LU} + D_{VU} K_{U,1,i}} \quad (\text{IV.1})$$

$$- (1 + A_{1i}) d_{U,i} + v_{U,2,i} = -F_{VN_{U,2,i}} \quad (\text{IV.2})$$

$$Q_{cU} = (L_{U,i} + D_{LU}) \sum_{i=1}^c (H_{U,2,i} - h_{U,1,i}) x_{U,1,i} +$$

$$D_{VU} \sum_{i=1}^c (H_{U,2,i} - H_{U,1,i}) y_{D_{U,i}} \quad (\text{IV.3})$$

plato "j".

$$A_{j-1,i} v_{U,u-1,i} - \left[1 + \frac{S_{VUj}}{V_{U,j}} + A_{ji} \left(1 + \frac{S_{LUj}}{L_{U,j}} \right) \right] v_{U,j,i}$$

$$+ v_{U,j+1,i} = - \left[F_{VN_{U,j+1,i}} + F_{LN_{U,j,i}} \right]$$

$$j = 2, 3, \dots (N-1)$$

(IV.4)

$$A_{ji} = \frac{L_{Uj}}{K_{U,j,i} V_{U,j}} \quad (IV.5)$$

$$V_{U,j+1} = S_{V_{U,j}} + S_{L_{U,j}} + L_{U,j} + V_{U,j} - F_{VN_{U,j+1}} - F_{LN_{U,j}} - L_{U,j-1}$$

$$j = 2, 3, \dots (N-1) \quad (IV.6)$$

$$L_{Uj} = \frac{1}{\sum_{i=1}^c (H_{U,j+1,i} - h_{Uji})} X_{Uji}$$

$$\left[(V_{U,j} + S_{V_{U,j}}) \sum_{i=1}^c Y_{U,j,i} (H_{U,j+1,i} - H_{Uji}) + \right.$$

$$S_{L_{Uj}} \sum_{i=1}^c (H_{U,j+1,i} - h_{Uji}) X_{Uji} + F_{VN_{Uj+1}} \sum_{i=1}^c$$

$$Y_{FNU,j+1,i} (H_{FNU,j+1,i} - H_{U,j+1,i}) + F_{LN_{Uj}} \sum_{i=1}^c$$

$$(h_{FNUji} - H_{U,j+1,i}) X_{FNUji} + L_{Uj-1} \sum_{i=1}^c$$

$$(h_{U,j-1,i} - H_{U,j+1,i}) X_{U,j-1,i} + QP + S_{VE_{Uj}} \sum_{i=1}^c$$

$$(H_{SE_{Uji}} - H_{U,j+1,i}) Y_{SE_{Uji}} + S_{LE_{Uj}} \sum_{i=1}^c$$

$$(h_{SE_{Uji}} - H_{U,j+1,i}) X_{SE_{Uji}} \left. \right] j = 2, 3, \dots (N-1) \quad (IV.7)$$

Donde:

- FVN_{uj} = FV_{uj} + vapor de otra columna recirculado al plato "j".
- FLN_{uj} = FL_{uj} + líquido de otra columna recirculado al plato "j".
- SVE_{uj} = extracciones vapor de otras columnas que son alimentadas al plato "j".
- SLE_{uj} = extracciones líquidas de otras columnas que son alimentadas al plato "j".

Estas definiciones serán conocidas como ecuaciones (IV.9) y están referidas a la columna "U".

Rehervidor.

$$A_{Ni} = \frac{B_U}{V_{UN} K_{UNi}}$$

(IV.10)

$$A_{N-1i} V_{UN-1i} - (1 + A_{Ni}) V_{UNi} = 0$$

(IV.11)

$$Q_{R_U} = B_U \sum_{i=1}^c (h_{UN-1i} - h_{UNi}) x_{UNi} - v_{UN} \sum_{i=1}^c (h_{UN-1i} - h_{UNi}) y_{UNi}$$

(IV.12)

Las fórmulas de recurrencia utilizadas para la resolución de la matriz tridiagonal quedan de la siguiente manera:

$$F_1 = \frac{1}{-(1 + A_{1i})}$$

$$g_1 = F_{V_{U2i}} F_1$$

$$F_j = \frac{1}{- \left[1 + \frac{SV_{Uj}}{L_{Uj}} + A_{ji} \left(1 + \frac{SL_{Uj}}{L_{Uj}} \right) \right]} - A_{Uj-1i} F_{j-1}$$

$$j = 2, 3, \dots (N-1)$$

$$g_j = - \left[FVN_{Uj+1i} + FLN_{Uji} + A_{j-1i} g_{j-1} \right] F_j$$

$$j = 2, 3, \dots (N-1)$$

$$r_{UN} = g_N$$

$$r_{Uji} = g_j - F_j r_{Uj+1i} \quad j = (N-1) \dots (N-2) \dots 2, 1$$

(IV.13)

Por último para el cálculo de los flujos líquidos por componente se tiene:

$$l_{Uij} = r_{U2i} - d_{Uj} \quad (IV.14)$$

$$d_{l_{Uj}} = \left(\frac{DL_{Uj}}{L_{Uj}} \right) l_{Uj} \quad (IV.15)$$

$$d_{V_{Uj}} = d_{Uj} - d_{l_{Uj}} \quad (IV.16)$$

$$l_{Uj+1i} = \frac{1}{\left(1 + \frac{SL_{Uj}}{L_{Uj}} \right)} \left[FVN_{Uj+1i} + FLN_{Uji} + l_{Uj-1i} + r_{Uj+1i} - r_{Uji} \left(1 + \frac{SV_{Uj}}{V_{Uj}} \right) \right] \quad j = 2, 3, \dots (N-1) \quad (IV.7)$$

$$b_{Uj} = l_{UN-1i} - r_{UNi} \quad (IV.18)$$

**DESARROLLO DEL METODO THETA DE CONVERGENCIA
PARA UN SISTEMA DE "N" COLUMNAS DE
DESTILACION INTERCONECTADAS.**

El balance general de cada columna por componente viene dado por:

$$\sum_{M=1}^{NFU} F_{UM} Z_{F_{UM}i} + \sum_{\substack{L=1 \\ L \neq U}}^{NT} F_{A_{LU}} Z_{F_{LU}i} =$$

$$d_{V_i}^{co} + \sum_{j=1}^{NSV_U} (SV_{ULU_{j,i}})_{co} + \sum_{k=1}^{NSL_U} (SL_{ULL_{k,i}})_{co} + b_{U_i}^{co}$$

Donde:

- NT = Número de columnas.
- $F_{A_{LU}}$ = Flujo de la columna "L" alimentado a la columna "U". (puede ser Dv, DI, fondo o alguna extracción líquida o vapor).
- $Z_{F_{LU}i}$ = Composición del componente i en el flujo de la columna "L" que es alimentado a la columna "U".
- NF_U = Número de alimentaciones de la columna "U" que son externas al sistema.

La demás simbología tiene el mismo significado que en el capítulo tres, sólo se le adiciona el sufijo "U" para indicar de que columna se trata.

Por definición los flujos corregidos para la columna "U" son obtenidos por medio de:

$$\left(\frac{b_{U_i}^{co}}{d_{U_i}^{co}} \right) = \theta_{U_0} \left(\frac{b_{U_i}^{ca}}{d_{U_i}^{ca}} \right)$$

$$\left(\frac{SV_{U,LV_{j,i}}^{co}}{d_{i}^{co}} \right) = \theta_{U_j} \left(\frac{SV_{U,LV_{j,i}}^{ca}}{d_{i}^{ca}} \right) \quad j = 1, 2, \dots, NSV_U$$

$$\left(\frac{SL_{U,LL_{k,i}}^{co}}{d_{i}^{co}} \right) = \theta_{U_{K+NSV_U}} \left(\frac{SL_{U,LL_{k,i}}^{ca}}{d_{i}^{ca}} \right)$$

$$K = 1, 2, \dots, NSL_U$$

Combinando el balance de masa con las relaciones anteriores se obtiene:

$$P_{Ui} = \frac{\sum_{M=1}^{NFU} F_{UM} Z_{FUMi} + \sum_{\substack{L=1 \\ L \neq i}}^{NT} F_{AL_U} Z_{FL_Ui}}{NSV_U} \\ \frac{d_{Uica} + \theta_{U0} b_{Uica} + \sum_{j=1}^{NSV_U} (\theta_{Uj} (SV_{ULV_{ji}}))_{ca} + \sum_{K=1}^{NSL_U} (\theta_U (NSV_U + K) (SL_{ULL_{ki}}))_{ca}}{NSV_U} \quad (IV.19)$$

$$d_{Uico} = d_{Uica} P_{Ui} \quad (IV.20)$$

$$b_{Uico} = b_{Uica} \theta_{U0} P_{oi} \quad (IV.21)$$

$$(SV_{U,LU_{ji}})_{co} = \theta_{Uj} (SV_{U,LV_{ji}}) P_{Ui}$$

$$j = 1, 2, \dots, NSV_U \quad (IV.22)$$

$$(SL_{ULL_{ki}})_{co} = \theta_U (K + NSV_U) (SL_{ULL_{ki}})_{ca} P_{Ui}$$

$$K = 1, 2, \dots, NSL_U \quad (IV.23)$$

Y por último, los flujos corregidos deben satisfacer las siguientes funciones error:

$$F_0 (\theta_{U0}, \theta_{U1} \dots \theta_{UNST_U}) = \left[\sum_{i=1}^c d_{Uico} \right] - D_U$$

$$F_j (\theta_{U0}, \theta_{U1} \dots \theta_{UNST_U}) = \left[\sum_{i=1}^c (SV_{ULV_{ji}})_{co} \right] - SV_{ULV_j}$$

$$j = 1, 2, \dots, NSV_U$$

$$F_K (\theta_{U0}, \theta_{U1}, \dots, \theta_{UNST_U}) = \left[\sum_{i=1}^c (SL_{ULL_{ki}})_{co} \right] - SL_{LL_K}$$

$$K = 1, 2, \dots, NSL_U \quad (IV.24)$$

Hasta el momento, todo lo aquí expuesto es para la columna "U" y se puede observar que la única diferencia en el planteamiento analítico entre una columna compleja II y una columna perteneciente a un sistema de columnas interconectadas es el multiplicador P_i , el cual es para el primer caso dependiente de la materia recirculada y para el segundo caso es dependiente de la materia proveniente de otras columnas del sistema, por lo tanto, en cada iteración hay que tomar en cuenta los flujos corregidos que provienen de las otras columnas.

Una vez tomada en cuenta esta consideración, se calculan los valores de los multiplicadores theta que satisfagan las ecuaciones (IV.24), de igual forma, cuando estas ecuaciones se cumplan, se corrigen las composiciones mediante:

$$X_{Uji} = \frac{\theta_{Uji} P_{Ui}}{\sum_{K=1}^c \theta_{UKi} P_{Ui}} \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (IV.25)$$

$$Y_{Uji} = \frac{U_{Uji} P_{Ui}}{\sum_{K=1}^c U_{UKi} P_{Ui}} \quad j = 1, 2, \dots, N \quad ((IV.26)$$

Así con estas composiciones corregidas, es continuada la secuencia de cálculo hasta llegar a la convergencia.

SECUENCIA DE CALCULO PARA UN SISTEMA DE "N" COLUMNAS DE DESTILACION INTERCONECTADAS.

I) INICIALIZACION.

Se piden los siguientes datos:

- Número de componentes y sus datos termodinámicos,
- Número de columnas.
- Columna con mayor número de platos (Cuantos son).
- Columna con mayor número de extracciones (Cuantas son).

** Para cada columna:

- Número de platos.
- Relación $L1/D$.
- Relación Dv/D .
- Destilado total y fondo.
- Presión en cada plato.
- Transferencia de calor en cada plato.
- Número de alimentaciones (Composición, flujo, localización y su relación V/F o TF).
- Número de extracciones
- Número de extracciones que entran a otra columna (flujo, localización, tipo de extracción, columna a donde recircula y plato a donde recircula.

**

II) SUPONER UN PERFIL DE TEMPERATURAS Y FLUJOS DE VAPOR O V_j/L_j .

*** Desde $U =$ columna 1, Hasta $U =$ columna "N":

III) CALCULAR LOS FACTORES DE ABSORCIÓN.

- Ecuaciones (IV.1), (IV.5) y (IV.6).

IV) CALCULAR LAS ALIMENTACIONES CORREGIDAS.

- O sea, tomando en cuenta los valores corregidos de la última iteración, aplicar las ecuaciones (IV.9) para los flujos provenientes de otras columnas.

V) RESOLVER LA MATRIZ TRIDIAGONAL Y CALCULAR LOS FLUJOS $V_{j,i}$.

- Ecuaciones (IV.9) y (IV.13).

VI) CALCULAR LOS FLUJOS LIQUIDOS POR COMPONENTE.

- Ecuaciones (IV.14) a (IV.18).

VII) APLICAR EL METODO THETA DE CONVERGENCIA.

- Ecuaciones (IV.19) a (IV.24).

VIII) CALCULAR LAS COMPOSICIONES CORREGIDAS EN EL LIQUIDO Y EN EL VAPOR.

- Ecuaciones (IV.24) y (IV.26).

IX) CALCULAR NUEVOS PERFILES DE TEMPERATURAS.

- Por medio de puntos de rocío, utilizando las composiciones obtenidas del inciso anterior.

X) CALCULAR LOS NUEVOS PERFILES DE FLUJOS DE LIQUIDOS Y FLUJOS DE VAPOR.

- Ecuaciones (IV.3), (IV.6), (IV.7) y (IV.12).

XI) CHECAR LA CONVERGENCIA.

- Se utilizará la siguiente norma Euclidiana:

$$Q = \text{Log} \left(\frac{1}{M} \cdot \sum_{U=1}^{NT} \frac{1}{(NST_{U+1})} \left[\sum_{K=0}^{NST_U} \theta_{UK}^2 \right] \right)$$

- Si se cumple imprimir resultados, si no, ir al paso (***) para realizar otra iteración.

CAPITULO V

CONCLUSIONES.

El método theta de convergencia, junto con las modificaciones realizadas en esta tesis demostraron que pueden ser utilizadas para resolver satisfactoriamente problemas relacionados con columnas de destilación convencionales y complejas, así como también sistemas de columnas de destilación interconectadas; los cuatro programas realizados, basados en el método theta de convergencia y sus modificaciones, pueden resolver la mayoría de los problemas que se presentan en la resolución de columnas de destilación, ya que se tienen muchas opciones como lo son el poder tener presiones distintas en el condensador y en el rehervidor o la transferencia de calor y pérdida de presión en cada plato, por otra parte, los programas están estructurados en forma tal que puedan ser incorporados a un simulador de procesos, además de contener algunas subrutinas como son la del cálculo de un "Flash" isotérmico o la del cálculo de puntos de rocío o puntos de burbuja, que pueden servir de base para la creación de otros simuladores (como por ejemplo destilación "flash").

En cuanto al alcance real de este simulador, se puede decir que puede ser utilizado para fines didácticos, ya que se tiene la opción de manipular la mayoría de las variables involucradas y con esto se puede conocer la influencia de dichas variables en el resultado final, por otra parte, los programas están limitados en cuanto a la capacidad de memoria de la computadora, aunque esta es suficiente para los fines descritos anteriormente, también es un hecho que la capacidad de memoria así como la velocidad de cálculo aumentará en modelos mas avanzados de computadoras y esto permitirá que estos programas puedan ser utilizados para cálculos mas extensos (esto es, para columnas o sistemas de columnas con un gran número de platos y/o un gran número de componentes). Aparte de eso, el lenguaje elegido (BASIC) además de ser sencillo y de fácil estructuración es tan utilizado en nuestros días que se prevé que seguirá siendolo

durante mucho tiempo más, con lo cual no es necesario cambiar a otro lenguaje si no se desea.

Una de las más grandes limitaciones de este simulador, es el hecho de que el usuario tiene que introducir sus ecuaciones de equilibrio y entalpías del líquido y del vapor, sin embargo, esto puede ser traducido a un beneficio, ya que debido a esto, no hay una limitación en cuanto a componentes y además, se pueden utilizar datos ideales o ecuaciones no ideales para obtener con esto problemas más realistas.

En general, se puede decir que los métodos desarrollados en esta tesis no son muy sensibles a las inicializaciones, aún así, el usuario tiene la opción de introducir sus propios perfiles de flujos y temperaturas con el fin de obtener una más rápida convergencia.

Este simulador podría ser utilizado en la industria si se le adapta un buen simulador de datos de equilibrio y de entalpías, aunque es claro que debería ser traducido a otro lenguaje como lo puede ser FORTRAN y en este caso el programa serviría para dar un perfil preliminar de flujos, temperaturas y composiciones los cuales podrían ser utilizados como base para un simulador especializado, ahorrando el tiempo de cálculo de este último al contar con una buena aproximación.

APENDICES

a) Descripción de los programas.

Se elaboró un menú principal, por medio del cual se pueden elegir cuatro tipos de programas, cada uno elaborado para un tipo de columna en particular, una vez elegido el programa deseado, este es llamado y a continuación el usuario deberá introducir los datos de equilibrio y las entalpías del líquido y del vapor en las líneas asignadas a ello, hecho esto, se puede proceder a correr el programa y al finalizar su utilización, este programa se puede guardar con los datos de equilibrio introducidos con el fin de poder ser utilizado en otra oportunidad.

Los programas están estructurados en subrutinas y siguen las secuencias de cálculo descritas en los capítulos anteriores.

Para el caso en que se deseen utilizar constantes de equilibrio no ideales, es conveniente hacer la primera iteración con constantes ideales, con el fin de obtener valores de composiciones en el líquido y en el vapor, todos los programas cuentan con un contador en la secuencia de cálculo con el fin de determinar el número de iteraciones, este contador está denominado por medio de la variable FG, para estos casos, se recomienda acomodar la subrutina de los datos de equilibrio de la siguiente forma:

DE LINEA

```
2001      IF FG < > 0 THEN XXXX
2002      REM CALCULO DE LAS CONSTANTES DE EQUILIBRIO IDEALES
.         .         .         .         .         .         .         .         .         .
.         .         .         .         .         .         .         .         .         .
.         .         .         .         .         .         .         .         .         .
XXXX-1   RETURN
XXXX     REM CALCULO DE LAS CONSTANTES DE EQ. NO IDEALES
.         .         .         .         .         .         .         .         .         .
.         .         .         .         .         .         .         .         .         .
.         .         .         .         .         .         .         .         .         .
3999     RETURN
```

Así se asegura que en la primera iteración sean utilizadas constantes ideales y para las demás se usen constantes de equilibrio reales.

b)

Manual del usuario.

Inicializaciones.

Caso I (columnas de destilación convencionales).

Primero se piden las variables de diseño, las cuales son aquellas pedidas en el primer inciso de la secuencia de cálculo en el capítulo dos.

Posteriormente se puede elegir entre pedir los perfiles iniciales de temperaturas, flujos de líquidos y flujos de vapor o que se supongan estos perfiles, si se elige la segunda opción, el programa procederá de la siguiente forma:

1. Flujo del líquido del plato $J =$ Flujo líquido del plato 1

$$J=2,3,\dots,(N-1)$$

Flujo del líquido del plato $N =$ flujo del fondo.

2. Flujo del vapor del plato $J =$ Flujo del vapor del plato 2

$$J=3,4,\dots,N$$

3. Si hay dos o más alimentaciones se busca la temperatura mayor y la temperatura menor y se calcula un perfil inicial lineal de temperaturas a través de la columna, donde la temperatura menor corresponde al domo y la mayor al fondo.

Si solo hay una alimentación:

Temperatura del plato $J =$ Temperatura de la alimentación.

$$J=1,2,\dots,N$$

Caso II. (Columnas de destilación complejas I)

Se piden las variables de diseño (Ver el primer inciso de la secuencia de cálculo para torres complejas tipo I).

Posteriormente se elige entre pedir los perfiles iniciales de temperaturas , flujos de líquidos y flujos de vapor o que el programa los suponga, si se elige la segunda opción se procederá de la siguiente manera:

1. Se suponen los perfiles de temperaturas, flujos de líquido y flujos de vapor, tal y como se supuso en el caso anterior.
2. Se hacen dos iteraciones como si fuese una columna convencional.

Caso III (Columnas de destilación complejas II)

De igual forma que en el caso anterior, se piden las variables de diseño, (para este caso ver el primer inciso de la secuencia de cálculo para las columnas complejasII).

Posteriormente se elige entre pedir los perfiles de temperaturas, flujos de líquidos y flujos de vapor o que el programa los suponga de la siguiente forma:

1. Se suponen los perfiles de temperaturas, flujos de líquidos y de vapor tal cual como en el caso-I.
2. Se realizan dos iteraciones como si fuese una columna convencional.
3. Se realizan dos iteraciones como si fuese una columna compleja I.

Caso IV (Sistema de columnas de destilación interconectadas).

Se piden las variables de diseño (Ver el primer inciso de la secuencia de cálculo para columnas interconectadas). Posteriormente se procede de la siguiente forma:

Para cada columna:

1. Flujo líquido del plato $J =$ flujo líquido del plato 1.
 $J=2,2,\dots,(N-1)$
Flujo líquido del plato $N =$ flujo líquido del fondo.
2. Flujo vapor del plato $J =$ Flujo vapor del plato 2
 $J=1,2,\dots,N$
3. Si hay dos o más alimentaciones en la columna (que sean externas al sistema) se buscan las temperaturas mayor y menor, una vez obtenidas se calcula un perfil lineal de temperaturas donde la menor corresponderá al domo y la mayor al fondo; si solo se encuentra una alimentación:

Temperatura del plato $J =$ Temperatura de la alimentación.

$$J=1,2,\dots,N$$

Si no hay alimentaciones externas en la columna, se le pide al usuario que introduzca una temperatura promedio a lo largo de la columna. Una vez terminado este proceso para cada columna se procede de la siguiente forma:

Desde $U =$ columna 1, hasta $U =$ columna N

- Calcular factores de absorción.
- Calcular los flujos que son introducidos a la columna, pero solo se toman en cuenta los flujos provenientes de columnas que preceden a U .
- Resolver la matriz tridiagonal y calcular los flujos de líquidos y de vapor por componente.
- Aplicar el método theta de convergencia para columnas interconectadas.
- Calcular las composiciones en el líquido y en el vapor.
- Calcular los perfiles de temperaturas.
- Calcular los flujos de líquidos y de vapor en la columna.

Terminado este proceso para cada columna se dá por terminada la inicialización y se prosigue con la secuencia de cálculo.

Formas de salida.

En todos los casos se imprimirán el (los) valor(es) de los multiplicadores theta en cada iteración; una vez alcanzada la convergencia se imprimirán los siguientes resultados:

- Perfiles de temperaturas, flujos de líquidos y flujos de vapor a través de la columna.
- Flujo del destilado (ya sea vapor, líquido o ambos) y su composición.
- Flujo del fondo y su composición.
- Cargas térmicas del condensador y del rehedidor.

Además, en el caso de las columnas complejas I se imprimirán:

- Flujo de cada extracción (ya sea líquida o vapor).
- Localización.
- Composición.

En el caso de columnas complejas II se imprimirán:

- Flujo de cada extracción (ya sea líquida o vapor).
- Localización.
- Composición.

Si esta extracción recircula se imprimirá:

- Tipo de recirculación (líquido o vapor).
- Relación de recirculación.
- Localización de entrada.
- Composiciones en cada fase (extracción y recirculación).

Para el caso de columnas interconectadas, se imprimirán los valores de los multiplicadores theta de cada columna en cada iteración; y una vez que se llegue a la convergencia se imprimirá para cada columna:

- Perfiles de temperaturas, flujos de líquidos y flujos de vapor.
- Flujo del destilado (ya sea vapor, líquido o ambos) y su composición.
- Flujo del fondo y su composición.
- Carga térmica del condensador y del rehervidor.
- Flujo de cada extracción y su localización y composición.

Ya sea que la extracción salga del sistema o entre a otra columna.

Alternativas.

Como se pudo constatar en el primer capítulo, en una columna de destilación existen una serie de variables que deben ser fijadas por el diseñador, con el fin de definir la columna; en los casos estudiados en esta tesis, algunas de las variables que fueron fijadas son:

- Flujo del destilado total.
- Relación L1/D.
- Relación Dv/D.

Se intentó modificar un poco el planteamiento analítico y matemático con el fin de tener la opción de poder cambiar dos de las últimas tres variables listadas por:

- Carga térmica del condensador.
- Carga térmica del rehevridor.

Pero desafortunadamente se constató que el método theta de convergencia no es muy estable en estos casos y en realidad en pocas ocasiones se llegaba a una buena convergencia, por lo cual se decidió omitir esta alternativa en los programas, aún así, el usuario tiene con estos cuatro programas muchas alternativas, ya que se pueden variar entre otras cosas:

- Presiones en cada etapa.
- Transferencia de calor en cada etapa.
- Extracciones y recirculaciones.
- Número de columnas.

Por sólo mencionar las más importantes, con lo cual, es posible comparar distintas configuraciones y elegir la más idónea de ellas para un proceso dado.

Listado de variables utilizadas.

TEMPLT#(U,J,I)	Temperatura.
PPLT#(U,J,I)	Presión.
XPLT#(U,J,I)	Composición en el líquido.
YPLT#(U,J,I)	Composición en el vapor.
LIQ#(U,J)	Flujo del líquido.
VAP#(U,J)	Flujo del vapor
DL#(U)	Flujo del destilado líquido.
DV#(U)	Flujo del destilado vapor.
AD#(J,I)	Factor de absorción.
KEQ#(I)	Constante de equilibrio.
F#(J)	Vector para almacenar datos de cálculos.
G#(I)	Vector para almacenar datos de cálculos.
DX#(I)	Vector para almacenar datos de cálculos.
FVN#(U,J)	Flujos nuevos de las alimentaciones de vap.
YFN#(U,J)	Comp. del vapor de los flujos nuevos
FLN#(U,J)	Flujos nuevos de las alimentaciones del líq
XFN#(U,J,I)	Comp. del líq. de los flujos nuevos.
SVAP#(U,J)	Flujo de las extracciones de vapor.
SLIQ#(U,J)	Flujo de las extracciones del líquido.
VAPC#(U,J,I)	Flujo del vapor por componente.
LIQC#(U,J,I)	Flujo del líquido por componente.
D#(U,I)	Flujo del destilado por componente.
B#(U,I)	Flujo del fondo por componente.
DLIQ#(U,I)	Flujo del destilado líq. por componente.
DVAP#(U,I)	Flujo del destilado vapor por componente.
FONDO#(U)	Flujo del fondo.
DEST#(U)	Flujo del destilado.
XDEST#(I)	Composición del destilado líquido.
YDEST#(I)	Composición del destilado vapor.
XB#(I)	Composición del fondo.
X#(I)	Composición en el líquido.
Y#(I)	Composición en el vapor.
Z#(I)	Composición global.
THETA#(U,I)	Θ_i .
P#(I)	P_i .

ALICOMP#(I)	FZfi.
REALICOMP#(I)	Recirculaciones o flujos de otras columnas.
NPLATOS(U)	Número de platos.
NST(U)	Número de salidas totales.
NSV(U)	Número de salidas vapor.
NSL(U)	Número de salidas líquidas.
LV(U,J)	Localizaciones de las extracciones de vapor.
LL(U,J)	Localizaciones de las extracciones de líquido.
NF(U)	Número de alimentaciones.
LF(U,J)	Localización de las alimentaciones.
FUN#(J)	Funciones error.
JAC#(J,I)	Matriz del jacobiano.
QC(U)	Carga térmica del condensador.
QR(U)	Carga térmica del rehedidor.
QP(U,J)	Transferencia de calor.
HLIQC#(U,J,I)	Entalpias por componente del líquido.
HVAPC#(U,J,I)	Entalpias por componente del vapor.
HL#(I)	Entalpias por componente del líquido
HG#(I)	Entalpias por componente del vapor.
FEED#(U,J)	Flujo de las alimentaciones.
ZF#(U,J,I)	Composición global de las alimentaciones.
TF#(U,J)	Temperatura de las alimentaciones.
FV#(U,J)	Flujo vapor de las alimentaciones.
FL#(U,J)	Flujo líquido de las alimentaciones.
XF#(U,J,I)	Composición de las alimentaciones líquidas.
YF#(U,J,I)	Composición de las alimentaciones vapor.
HGF#(U,J,I)	Entalpia del vapor de las alimentaciones.
HLF#(U,J,I)	Entalpia del líquido de las alimentaciones.

Donde:

U= Número de columna.

J= Número de plato.

I= Número de componente.

Estas variables se utilizaron sólo para sistemas de columnas interconectadas, para los demás casos se omitió la U; por lo tanto:

$X\#(U,J,I) = X\#(J,I)$; $QC(U) = QC$; etc.

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

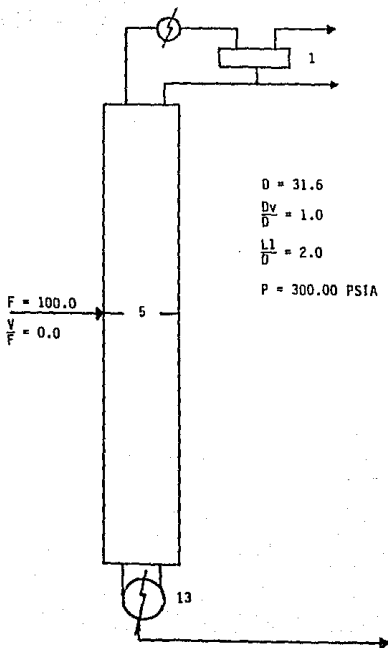
Ejemplos.

Con el fin de ilustrar el alcance de los programas desarrollados en esta tesis, se eligieron nueve ejemplos, de los cuales el primero de ellos se tomó de la primera referencia bibliográfica (Capítulo II, página 71); los ejemplos 2,3,4 y 5 fueron tomados de la segunda referencia bibliográfica (Capítulo 15, páginas 614 y 615) y los ejemplos 6,7,8 y 9 fueron creados por el autor de la tesis, utilizando los datos termodinámicos de los ejemplos anteriores y tratando de involucrar la mayor parte de los casos que se pueden resolver con los programas.

Para mayor comodidad de las personas que deseen checar los ejemplos, se utilizó el sistema de unidades que aparecen en las referencias bibliográficas.

EJEMPLO 1

	ZF1
CH ₄	0.020
C ₂ H ₆	0.100
C ₃ H ₈	0.060
C ₃ H ₈	0.125
iC ₄ H ₁₀	0.035
nC ₄ H ₁₀	0.150
nC ₅ H ₁₂	0.152
nC ₆ H ₁₄	0.113
nC ₇ H ₁₆	0.090
nC ₈ H ₁₈	0.085
400	0.070



EJEMPLO I

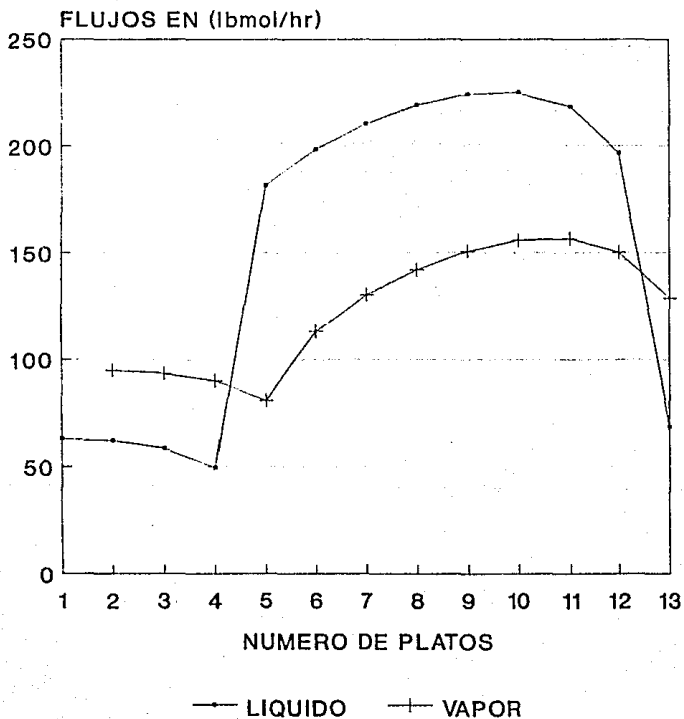
Resultados finales

Compuesto	composiciones	
	di	bi
1	6.34×10^{-2}	1.47×10^{-11}
2	0.3164	1.56×10^{-6}
3	0.1890	3.80×10^{-4}
4	0.3909	2.12×10^{-3}
5	2.35×10^{-2}	4.03×10^{-2}
6	1.66×10^{-2}	0.2116
7	6.09×10^{-5}	0.2222
8	2.83×10^{-7}	0.1652
9	1.90×10^{-9}	0.1316
10	1.32×10^{-11}	0.1242
11	1.95×10^{-14}	0.1023

Número de iteraciones= 13

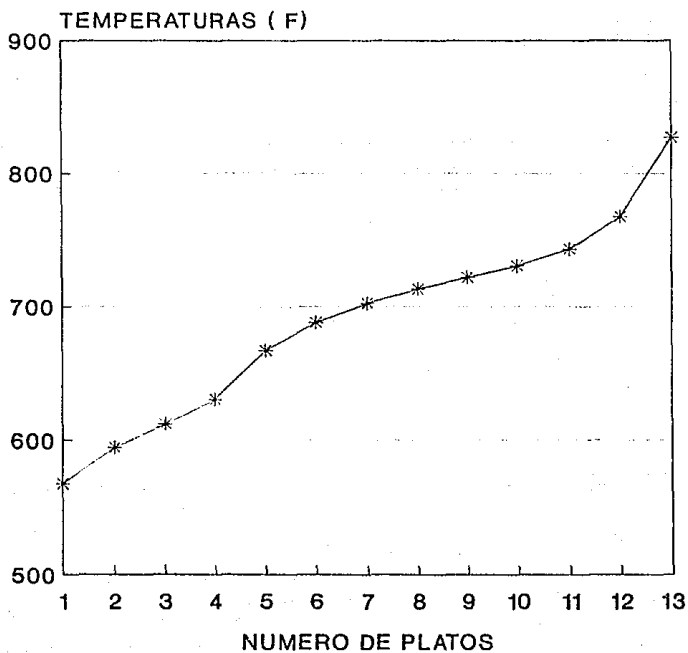
EJEMPLO I

PERFILES DE FLUJOS LIQ. Y VAP.



EJEMPLO I

PERFIL DE TEMPERATURAS.



EJEMPLO II

ZF1	
C ₂	0.03
C ₃	0.20
nC ₄	0.37
nC ₅	0.35
nC ₆	0.05

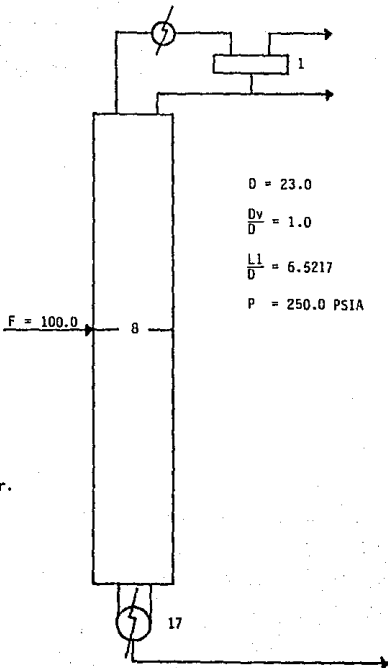
$$\frac{V}{F} = 0.0$$

Flujos en lbmol/hr.

Entalpias Btu/lbmol.

Cargas térmicas Btu/hr.

Temperaturas °F.



EJEMPLO II

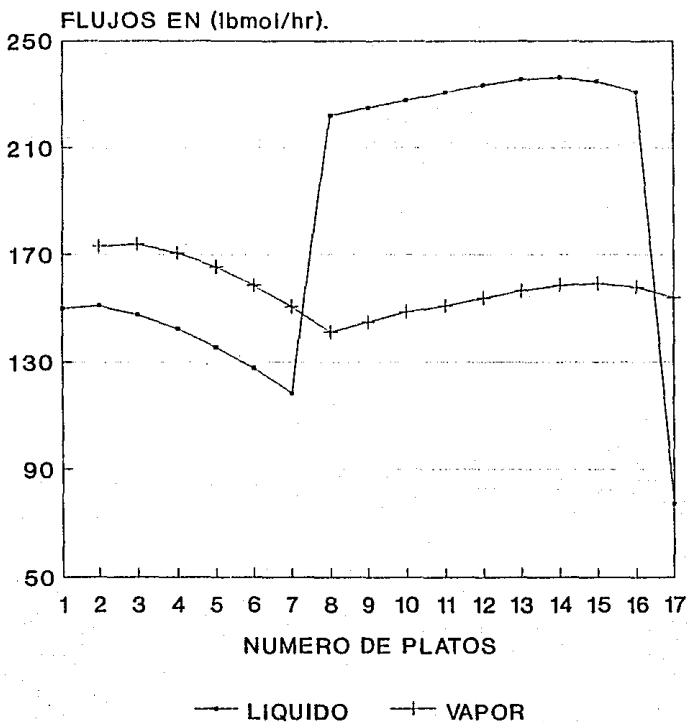
Resultados finales

Compuesto	composiciones	
	d_i	b_i
1	0.1304	3.79×10^{-8}
2	0.8530	4.94×10^{-3}
3	1.65×10^{-2}	0.4756
4	7.96×10^{-6}	0.4545
5	8.86×10^{-10}	6.49×10^{-2}

Número de iteraciones	Θ_i
1	767.36
2	0.0771
3	2.0398
4	0.8551
5	1.0257
6	0.9964
7	1.0003

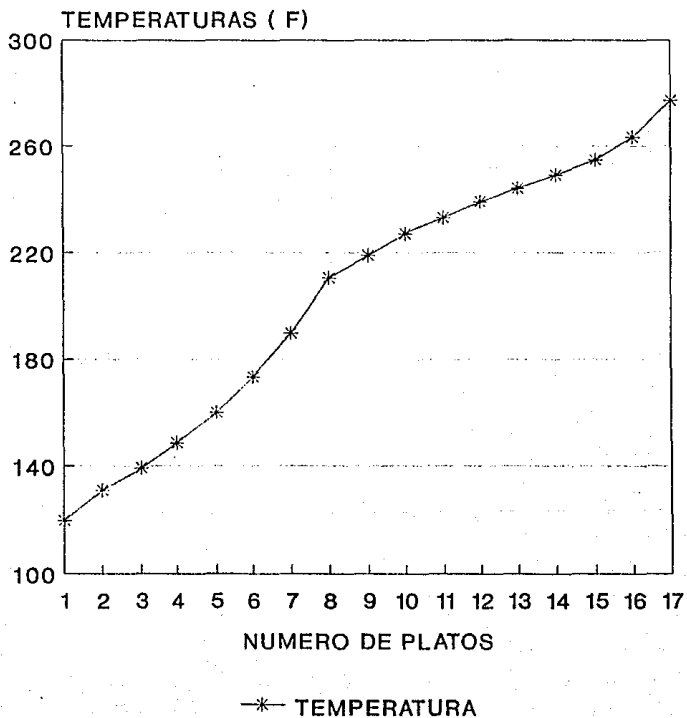
EJEMPLO II

PERFILES DE FLUJOS LIQ. Y VAP.



EJEMPLO II

PERFIL DE TEMPERATURAS.

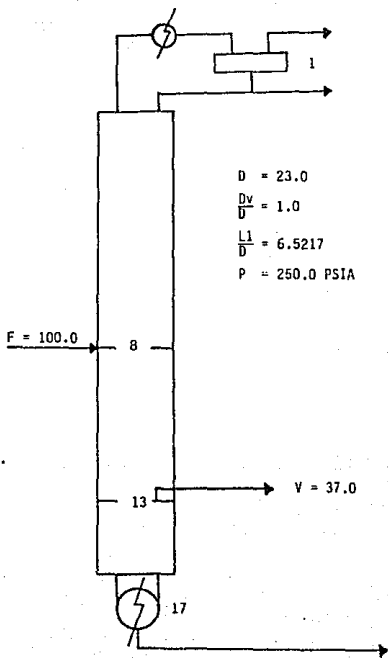


EJEMPLO III

ZF1	0.03
C_2	0.20
C_3	0.37
nC_4	0.35
nC_5	0.05
nC_6	

$$\frac{V}{F} = 0.0$$

Flujos en lbmol/hr.
 Entalpías Btu/lbmol.
 Cargas térmicas Btu/hr.
 Temperaturas °F.



EJEMPLO III

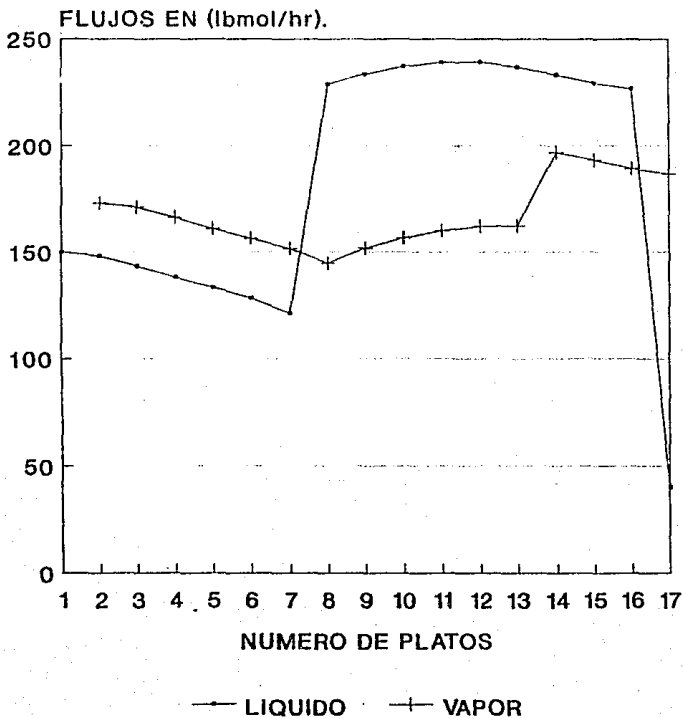
Resultados finales

Compuesto	composiciones		
	d_i	SL_i	b_i
1	0.1314	3.11×10^{-5}	4.28×10^{-9}
2	0.8158	3.29×10^{-2}	3.71×10^{-4}
3	5.37×10^{-2}	0.7403	0.2093
4	3.21×10^{-5}	0.2149	0.6762
5	5.68×10^{-9}	1.18×10^{-2}	0.1141

Número de iteraciones	θ_0	θ_1
1	0.3559	0.8811
2	1.8482	1.8377
3	0.8879	0.8932
4	1.0110	1.0110
5	0.9988	0.9990
6	1.0000	1.0000

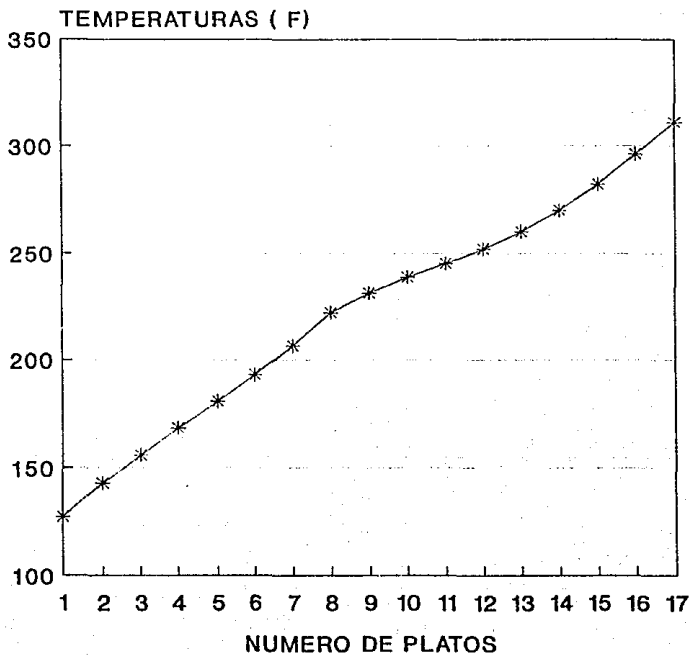
EJEMPLO III

PERFILES DE FLUJOS LIQ. Y VAP.



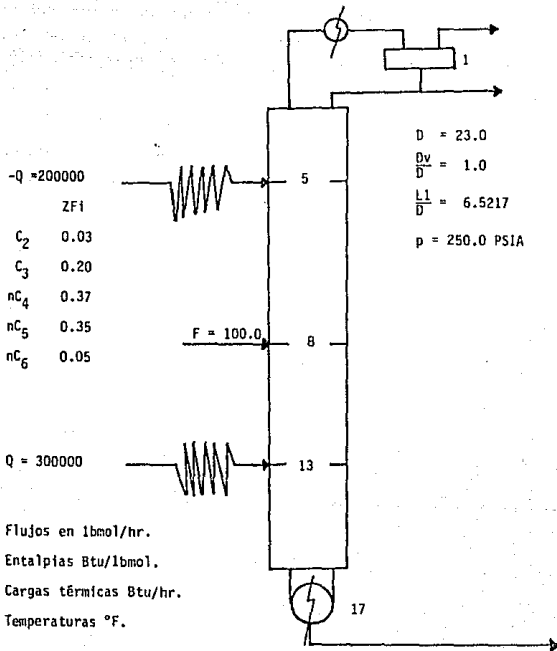
EJEMPLO III

PERFIL DE TEMPERATURAS.



—*— TEMPERATURA

EJEMPLO IV



EJEMPLO IV

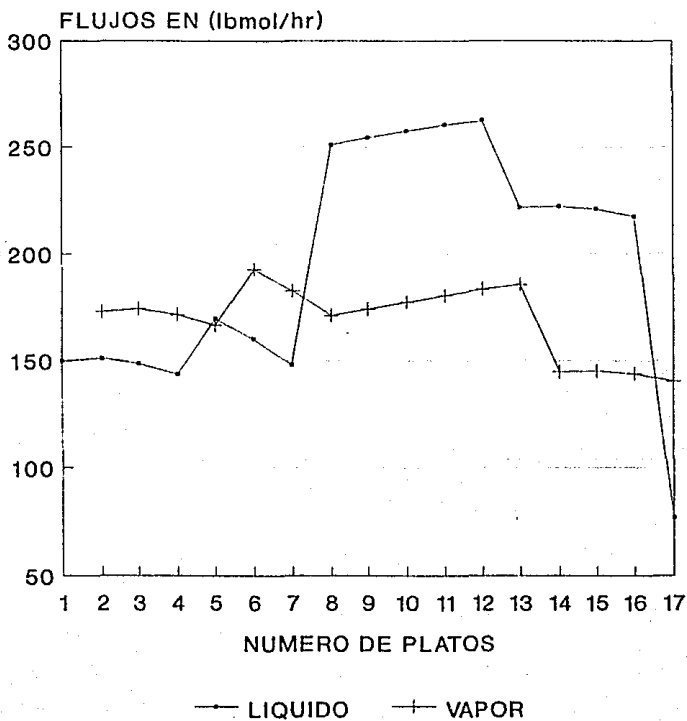
Resultados finales

Compuesto	composiciones	
	d_i	b_i
1	0.1304	2.56×10^{-8}
2	0.8564	3.94×10^{-3}
3	1.32×10^{-2}	0.4766
4	5.27×10^{-6}	0.4545
5	5.35×10^{-10}	6.49×10^{-2}

Número de iteraciones	θ_i
1	767.36
2	0.0789
3	2.0191
4	0.8737
5	1.0201
6	0.9975
7	1.0001

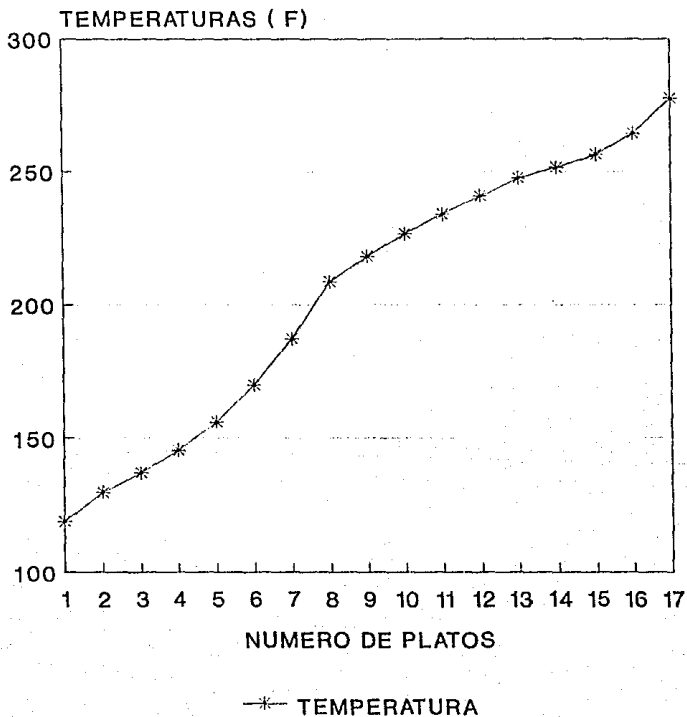
EJEMPLO IV

PERFILES DE FLUJOS LIQ. Y VAP.



EJEMPLO IV

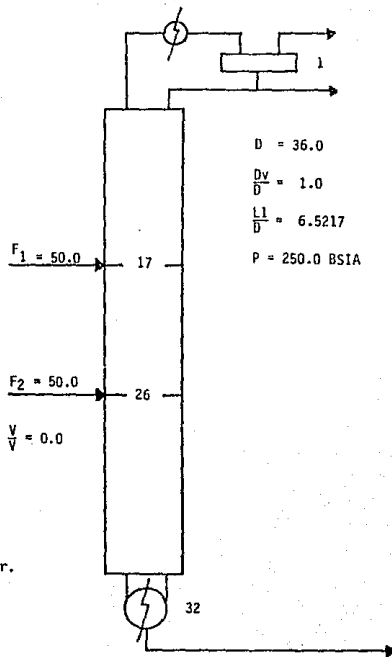
PERFIL DE TEMPERATURAS.



EJEMPLO V

	ZFi	
F ₁	C ₂	0.03
	C ₃	0.48
	nC ₄	0.33
	nC ₅	0.15
	nC ₆	0.01
	C ₂	0.01
F ₂	C ₃	0.20
	nC ₄	0.44
	nC ₅	0.29
	nC ₆	0.06

Flujos en lbmol/hr.
 Entalpías Btu/lbmol
 Cargas térmicas Btu/hr.
 Temperaturas °F



EJEMPLO V

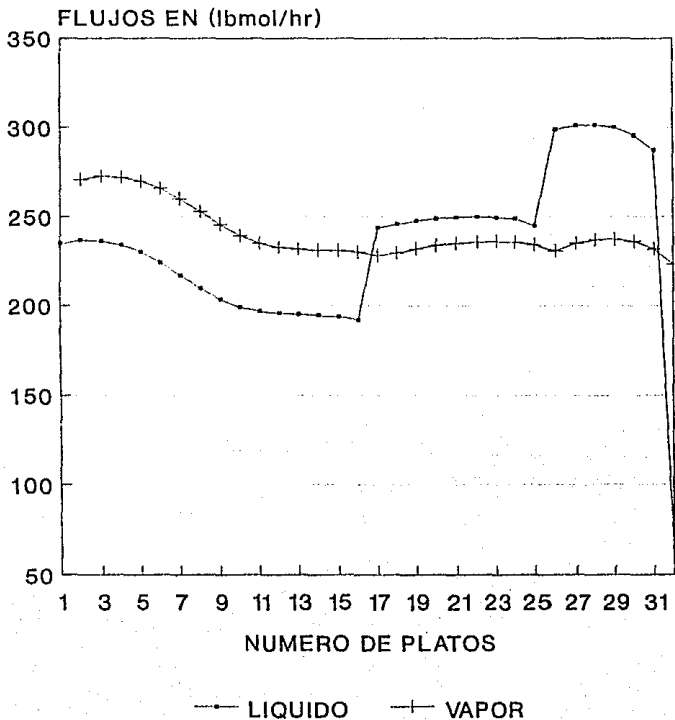
Resultados finales

Compuesto	composiciones	
	d_i	b_i
1	0.0555	6.56×10^{-8}
2	0.9422	1.25×10^{-3}
3	2.23×10^{-13}	0.6003
4	8.56×10^{-11}	0.3437
5	2.43×10^{-18}	5.46×10^{-2}

Número de iteraciones	Θ_i
1	134.61
2	0.0770
3	0.7604
4	1.3019
5	1.2563
6	0.9652
7	0.8899
8	0.9666
9	1.0350
10	1.0283
11	0.9967
12	0.9867
13	0.9961
14	1.0039

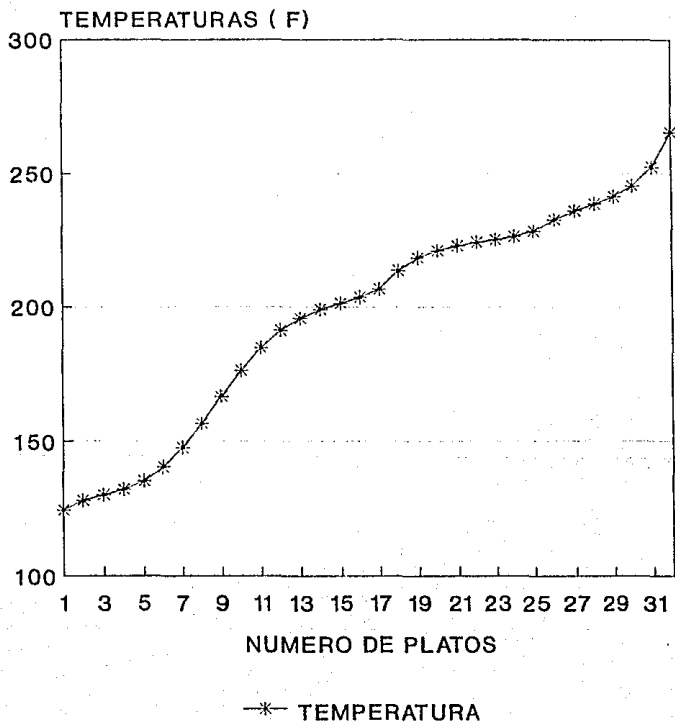
EJEMPLO V

PERFILES DE FLUJOS LIQ. Y VAP.



EJEMPLO V

PERFIL DE TEMPERATURAS.



EJEMPLO VI

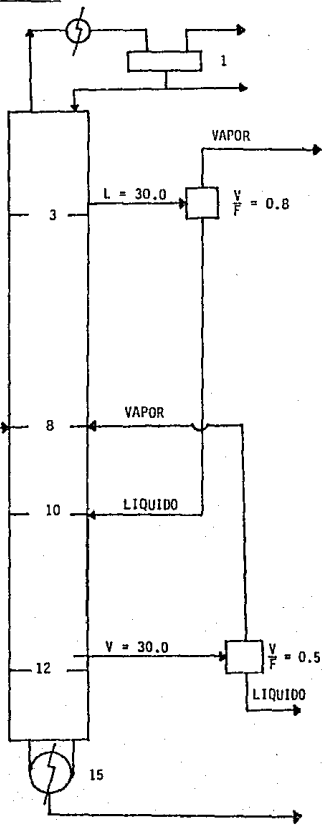
$D = 20.0$
 $\frac{L_1}{D} = 6.0$
 $\frac{D_V}{D} = 0.8$
 $P = 250.0 \text{ PSIA}$

ZF1

C_2	0.03
C_3	0.48
nC_4	0.33
nC_5	0.15
nC_6	0.01

$F = 100.0$
 $\frac{V}{F} = 0.0$

Flujos en lbmol/hr.
 Entalpias Btu/lbmol.
 Cargas térmicas Btu/hr.
 Temperaturas °F.



EJEMPLO VI

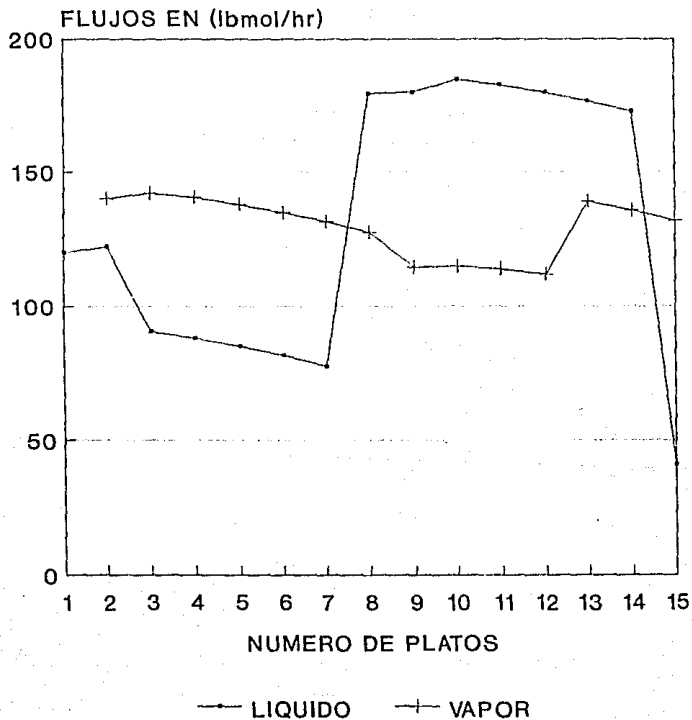
Resultados finales

Compuesto	composiciones		
	dvi	dli	bi
1	0.1492	5.76×10^{-2}	2.47×10^{-6}
2	0.8417	0.9183	7.08×10^{-2}
3	9.05×10^{-3}	2.41×10^{-2}	0.5660
4	3.33×10^{-6}	2.37×10^{-5}	0.3395
5	1.24×10^{-10}	2.42×10^{-9}	2.36×10^{-2}

Número de iteraciones	θ_0	θ_1	θ_2
1	3.8576	1.6806	1.0673
2	0.8914	0.7749	1.0001
3	1.0626	1.0050	0.9976
4	1.0153	0.9965	1.0011
5	1.0052	0.9991	1.0008
6	1.0006	1.0000	1.0001

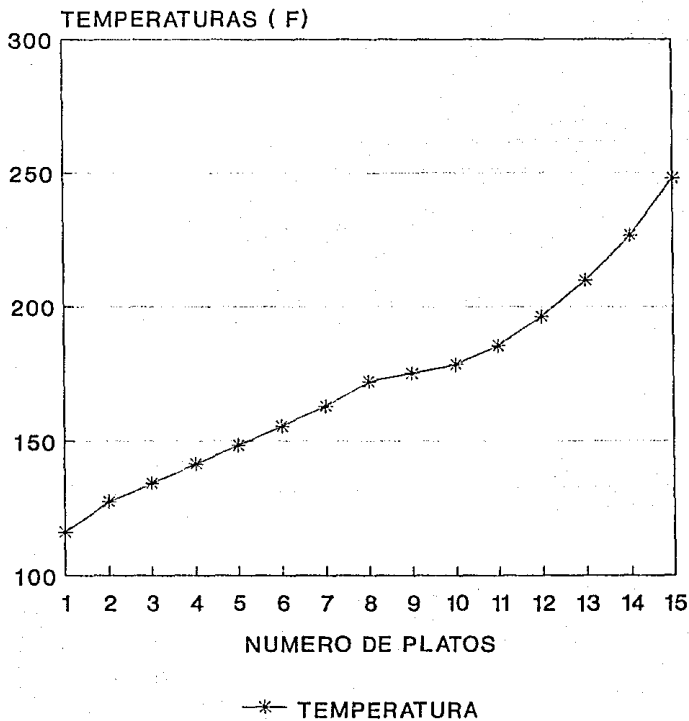
EJEMPLO VI

PERFILES DE FLUJOS LIQ. Y VAP.

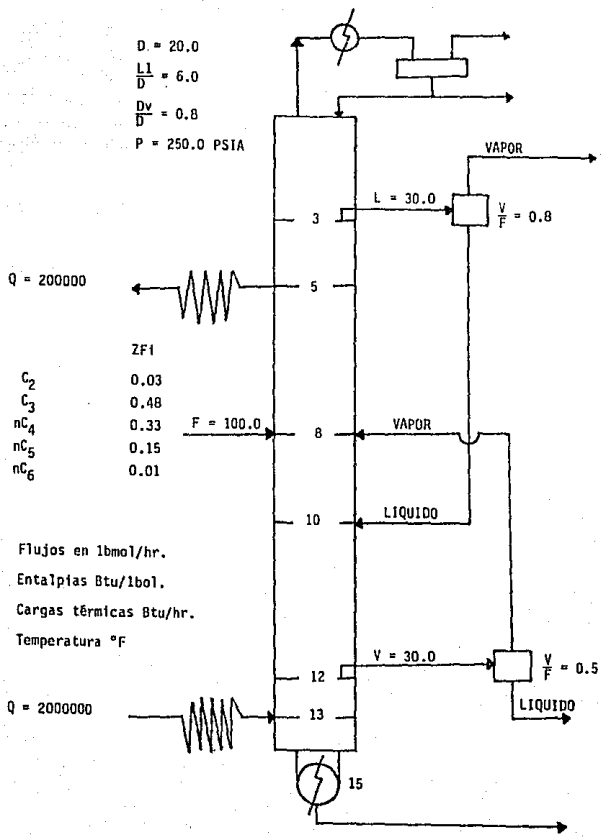


EJEMPLO VI

PERFIL DE TEMPERATURAS.



EJEMPLO VII



EJEMPLO VII

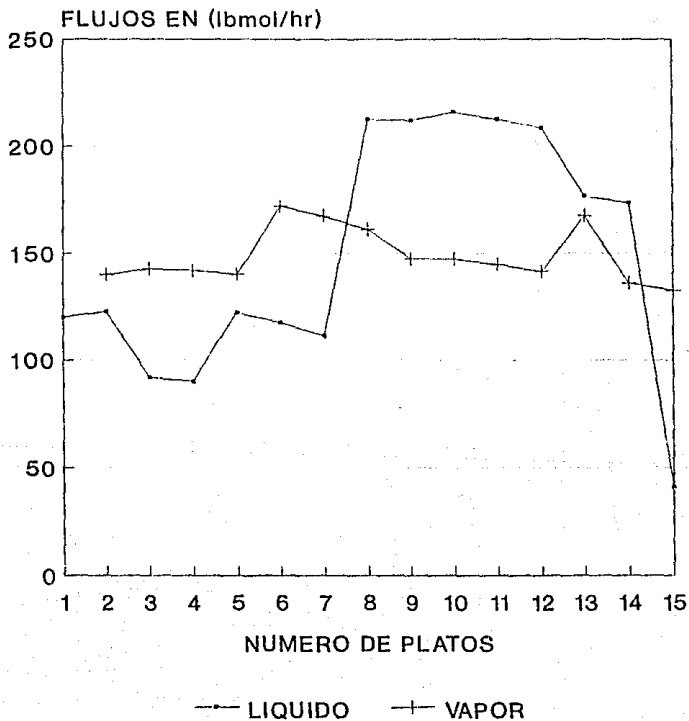
Resultados finales

Compuesto	composiciones		
	dvi	dli	bi
1	0.1487	5.77×10^{-2}	1.48×10^{-6}
2	0.8460	0.9282	6.02×10^{-2}
3	5.21×10^{-3}	1.40×10^{-2}	0.5757
4	1.35×10^{-6}	9.77×10^{-6}	0.3403
5	4.34×10^{-11}	8.55×10^{-10}	2.37×10^{-2}

Número de iteraciones	θ_0	θ_1	θ_2
1	3.5611	1.5030	1.0798
2	0.9975	0.9553	1.0740
3	1.0453	1.0235	1.0113
4	1.0127	1.0024	1.0018
5	1.0040	1.0003	1.0004
6	1.0016	1.0002	1.0001

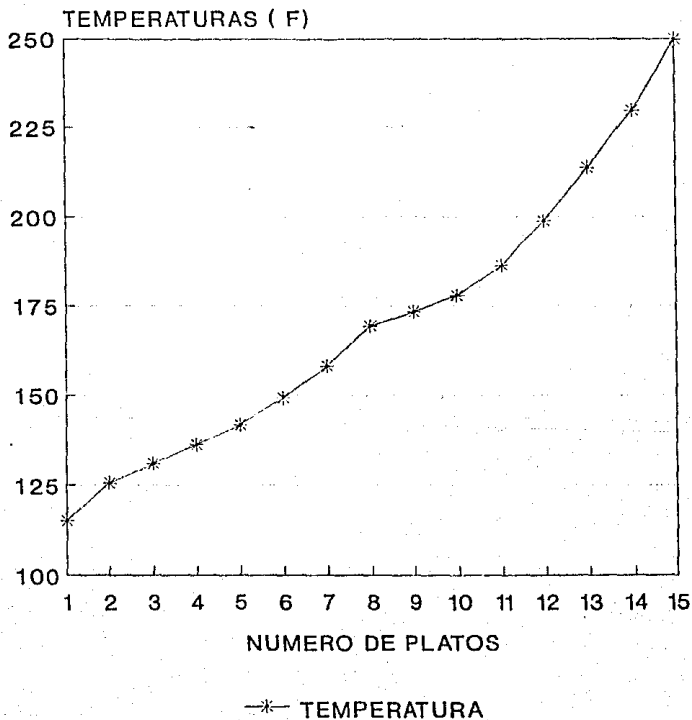
EJEMPLO VII

PERFILES DE FLUJOS LIQ. Y VAP.

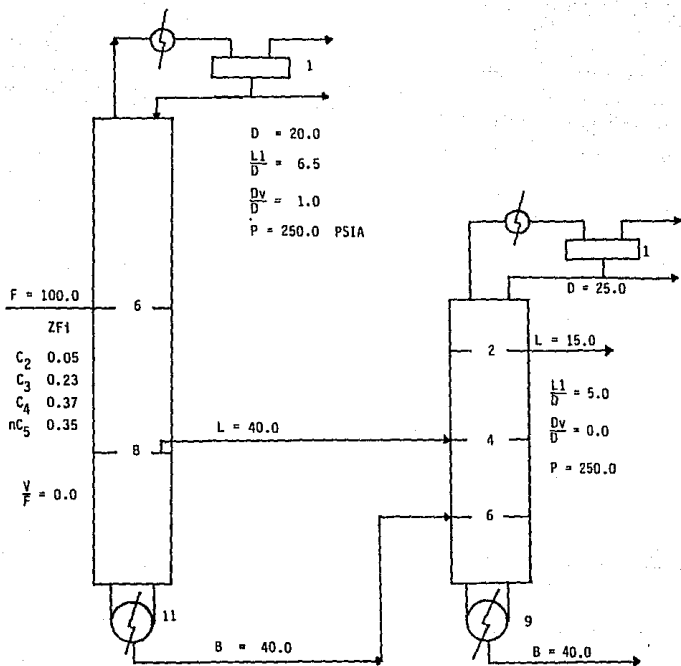


EJEMPLO VII

PERFIL DE TEMPERATURAS.



EJEMPLO VIII



Flujos en lbmol/hr.
 Entalpías Btu/lbmol.
 Cargas térmicas Btu/hr.
 Temperaturas °F.

EJEMPLO VIII

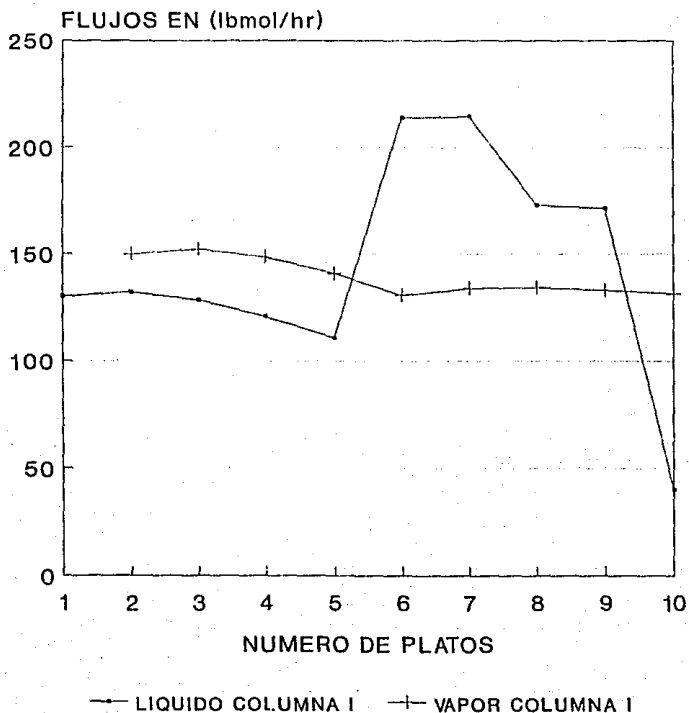
Resultados finales

Comp.	Columna I composiciones		Columna II composiciones	
	di	bi	di	bi
1	0.2475	1.15×10^{-5}	1.74×10^{-3}	1.33×10^{-8}
2	0.7333	2.38×10^{-2}	0.2510	7.92×10^{-4}
3	0.1903	0.3805	0.6949	0.2010
4	5.03×10^{-5}	0.5956	5.22×10^{-2}	0.7982

Número de Iteraciones	Columna I		Columna II	
	θ_0	θ_1	θ_0	θ_1
1	0.8669	0.8860	0.9440	0.9809
2	0.9809	0.9887	0.9661	0.9910
3	1.0119	1.0083	1.0281	1.0079
4	0.9976	0.9987	0.9883	0.9968
5	0.9994	0.9991	1.0045	1.0011
6	1.0007	1.0008	0.9982	0.9996

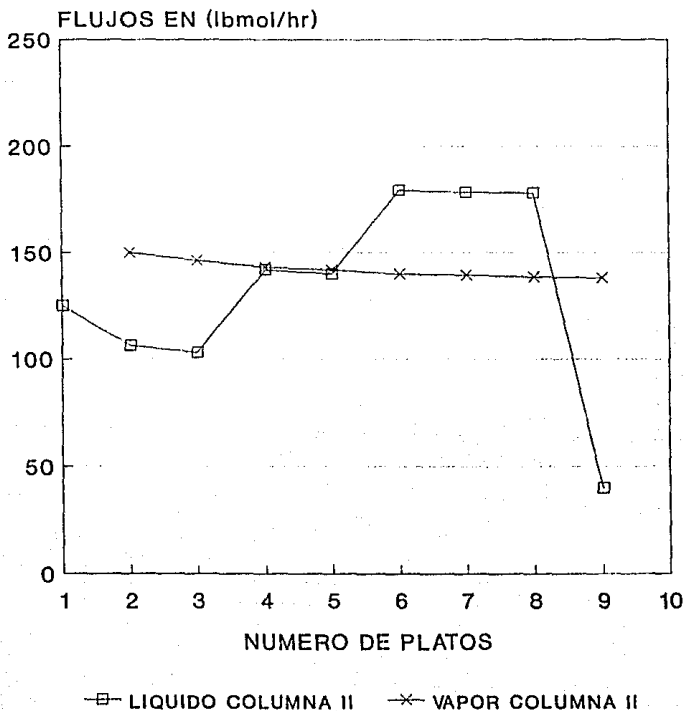
EJEMPLO VIII

PERFIL DE FLUJOS LIQ. Y VAP.



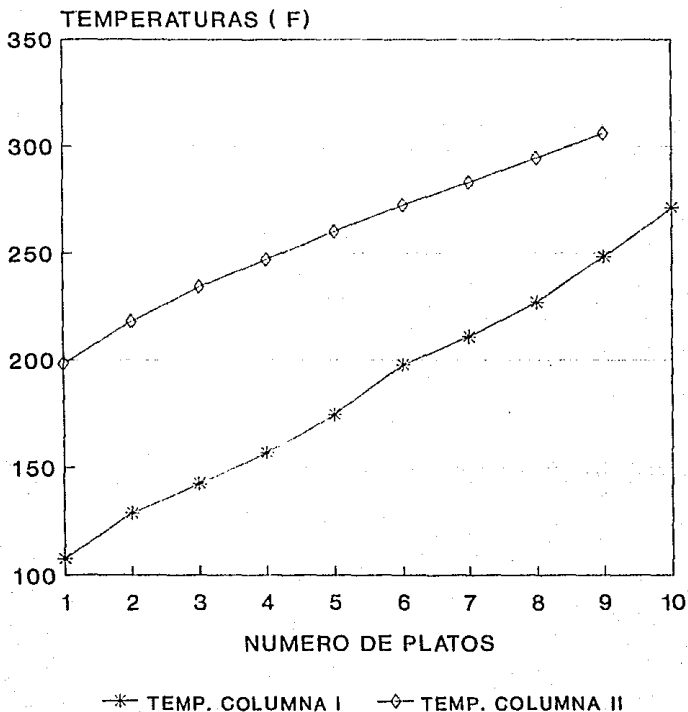
EJEMPLO VIII

PERFIL DE FLUJOS LIQ. Y VAP.

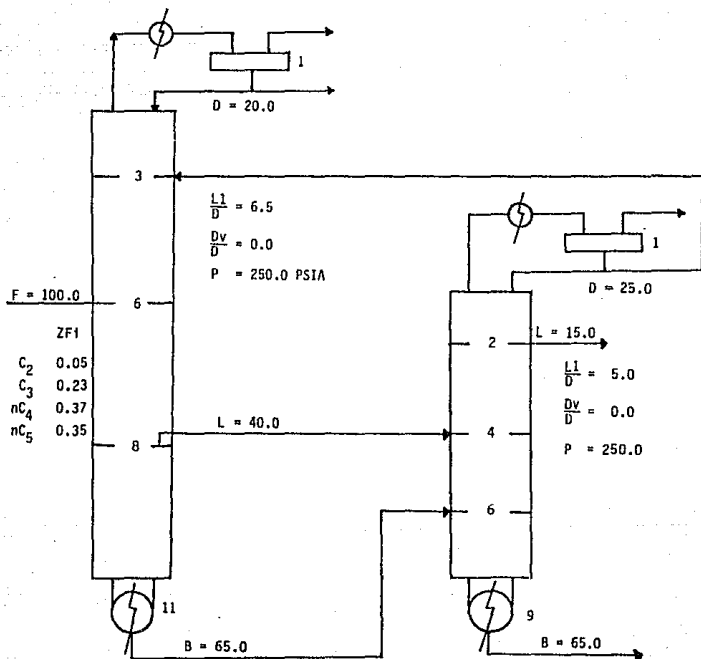


EJEMPLO VIII

PERFIL DE TEMPERATURAS.



EJEMPLO IX



Flujos en lbmol/hr.
 Entalpías btu/lbmol.
 Cargas térmicas Btu/hr.
 Temperaturas °F.

EJEMPLO IX

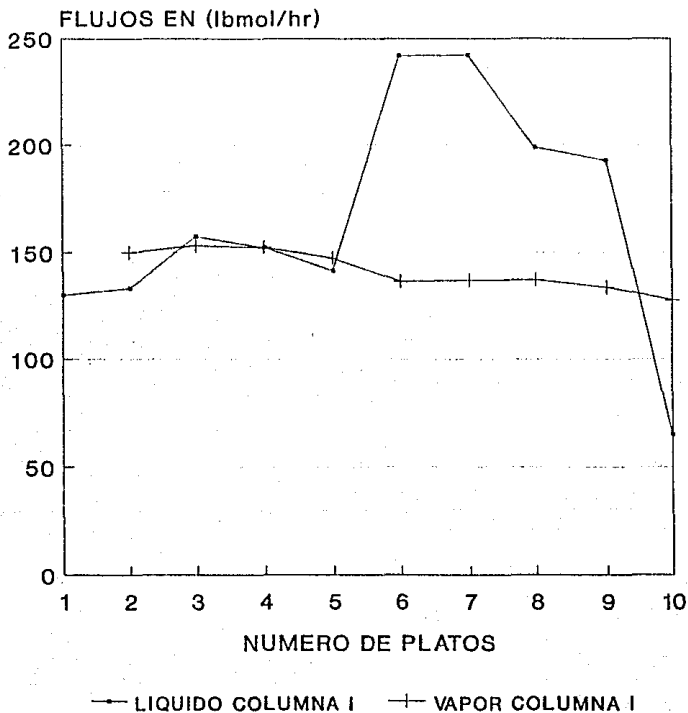
Resultados finales

Comp.	Columna I composiciones		Columna II composiciones	
	di	bi	di	bi
1	0.2493	6.16×10^{-5}	3.49×10^{-3}	2.02×10^{-7}
2	0.7385	0.1279	0.6548	1.63×10^{-2}
3	0.0122	0.4495	0.3324	0.4523
4	1.97×10^{-5}	0.4225	9.37×10^{-7}	0.5312

Número de Iteraciones	Columna I		Columna II	
	θ_0	θ_1	θ_0	θ_1
1	1.4424	1.2583	2.5743	1.6186
2	1.2744	1.2135	0.9779	0.9967
3	1.0278	1.0150	1.0256	1.0094
4	0.9801	0.9848	0.9832	0.9933
5	1.0023	1.0017	1.0059	1.0023
6	1.0003	1.0002	1.0000	1.0000

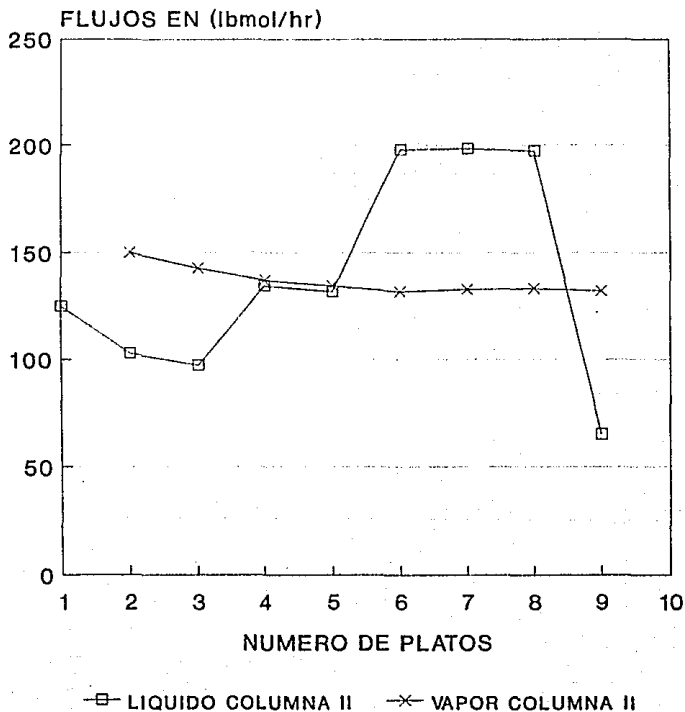
EJEMPLO IX

PERFIL DE FLUJOS LIQ. Y VAP.



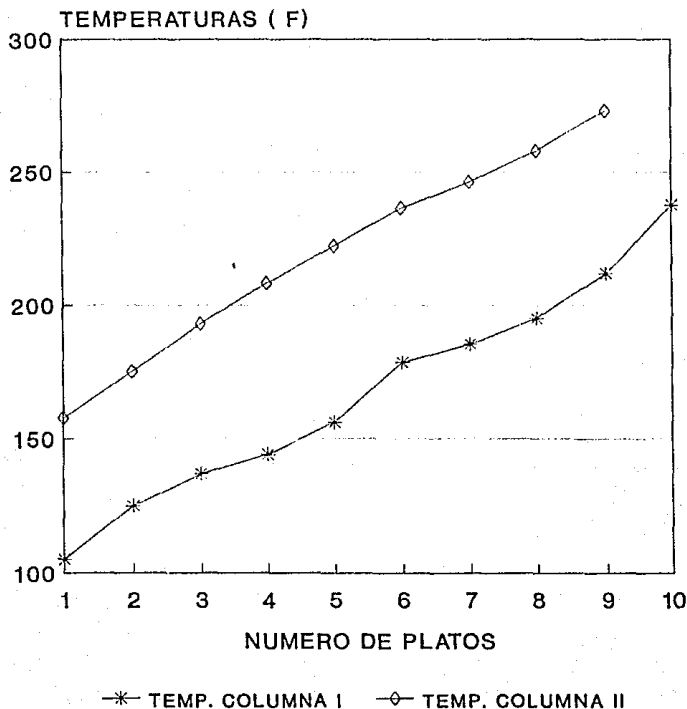
EJEMPLO IX

PERFIL DE FLUJOS LIQ. Y VAP.



EJEMPLO IX

PERFIL DE TEMPERATURAS.



Bibliografia.

- HOLLAND, J. CH. D., "FUNDAMENTALS OF MULTICOMPONENT DESTILLATION" MC GRAW HILL, NEW YORK, 1981.
- HENLEY, J., SEADER, J. D., "EQUILIBRIUM-STAGE SEPARATIONS OPERATIONS IN CHEMICAL ENGINEERING" FIRST EDITION, JOHN WILEY AND SONS, NEW YORK, 1981.
- SMITH, "DESIGN OF EQUILIBRIUM STAGE PROCESSES" CHEMICAL ENGINEERING SERIES, MC GRAW HILL, NEW YORK.
- KING, C. J "SEPARATIONS PROCESSES" 2ND. EDITION, MC GRAW HILL NEW YORK, 1980.
- C. D. HOLLAND AND P. T. EUBANK, "SOLVE MORE DESTILLATION PROBLEMS: PART II PARTIAL MOLAR ENTHALPIES CALCULATED" HYDROCARBON PROCESS, 58:196 (1974).
- J. F. BOSTON AND S. L. SULLIVAN, "AN IMPROVED ALGORITHM FOR SOLVING MASS BALANCE EQUATIONS IN MULTISTAGE-SEPARATION PROCESSES" CAN. J. CHEM. ENG. 50:663 (1972).