



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES ZARAGOZA
INGENIERIA QUIMICA

Simulación de la absorción de mezclas de hidrocarburos multicomponentes basada en el modelo de Wang-Henke.

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
INGENIERO QUÍMICO

P R E S E N T A :

Christian Axel Rosales Medina

JURADO DE EXAMEN

DIRECTOR: DR. PÉREZ CAMACHO MARIANO.

ASESORA: DRA. GARCIA ROJAS BLANCA ESTELA

ASESORA: DRA. VIÑAS REYES ELISA BLANCA

SINODAL: DR. HERRERA TOLEDO RODOLFO ALBERTO

SINODAL: DR. ALMAZAN RUIZ FRANCISCO JAVIER

CDMX 2024





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.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES ZARAGOZA
INGENIERIA QUIMICA

Simulación de la absorción de mezclas de hidrocarburos multicomponentes basada en el modelo de Wang-Henke.

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
INGENIERO QUÍMICO

P R E S E N T A :
Christian Axel Rosales Medina

CDMX 2024



AGRADECIMIENTO.

No fue fácil el camino para llegar hasta donde estoy, pero gracias a su apoyo, a su amor incondicional, a su enorme amabilidad y acompañamiento, lo difícil se hizo más fácil y llevar a finalizar este proyecto se hizo una realidad feliz. Les agradezco, y hago eco de mi enorme aprecio hacia ustedes, mi hermosa familia, amigos y a mi asesor el Dr. Marano Pérez Camacho por haberme brindado ese respaldo incondicional para culminar una etapa más en mi vida.

Gracias a todos a los que amo y me aman por ser mi apoyo en todo momento y por haber creído en mí.

DEDICATORIA.

A mis padres y hermano, quienes siempre han creído en mí.

A mis amigos por las risas y el estudio. Por las conversaciones estimulantes, y los momentos que compartimos juntos.

A mis profesores y mentores, por su dedicación y pasión por la enseñanza y por guiarme en mi camino.

Gracias por su amor, por su sacrificio y por enseñarme a nunca rendirme ante los obstáculos de la vida.

Este logro también es suyo.

MOTIVACIÓN.

La motivación para realizar este trabajo viene desde mi etapa estudiantil en la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza, ya que durante mi estancia en dicha institución, aprendí a realizar cálculos para entender como es la operación de trabajo en torres de destilación y posteriormente también tuve la oportunidad de aprender conocimientos para entender cómo operan las columnas de absorción pero esta última solo constaba de dos componentes, entonces bajo ese concepto de tener una columna de absorción con dos componentes, me intereso el seguir aprendiendo el cómo sería la operación para una torre de absorción que contenga más de dos elementos y a su vez aprender nuevas metodologías para calcular todos los parámetros que describen a dicha torre.

OBJETIVO.

Mostrar el desarrollo de las ecuaciones MESH para el caso de una absorción de mezcla de hidrocarburos en una columna de absorción de platos basados en el equilibrio.

Probar expresiones recientes para estimar las condiciones de equilibrio y compararlas con los resultados propuestos en la bibliografía.

HIPOTESIS.

Si se tiene un conjunto de ecuaciones que describen el balance de materia, las relaciones de equilibrio, las sumatorias de fracciones molares y el balance de energía (entalpía) , entonces su solución simultanea permitirá describir el fenómeno de absorción de un sistema multicomponentes en una columna de platos, lo que permitirá identificar cual de todos los componentes considerados se absorbe en mayor o menor proporción.

Contenido

Capítulo 1. Absorción multicomponente	5
1.1 Absorción.	5
1.2 Solubilidad	5
1.3 Equilibrio	6
Introducción al capítulo 2.	10
Capítulo 2: La constante de equilibrio.	10
2.1 valor de K o relación de distribución gas-liquido.	10
2.2 Ley de Raoult y Dalton para el cálculo de la constante de equilibrio (K).	11
2.3 Ecuación de Wilson.	12
2.4 Modificación de Torp a la ecuación de Wilson.	13
2.5 Aporte de Ahmed a la ecuación de Torp.	14
2.6 Implementación de Priester para la lectura de las K.	14
2.7 Polinomio de McWilliams	16
2.8 Otras propuestas para la constante de equilibrio.	17
2.9 Otros modelos matemáticos útiles.	18
Introducción al capítulo 3:	19
Capítulo 3: Resolución del problema.	19
3.1 Ecuaciones M.E.S.H	19
3.2 Matriz tridiagonal.	21
3.3 Presentación del problema.	25
3.4 Método de resolución	27
3.5 Método de suma de flujos (SR o Sume Rate de Burningham y Otto)	27
Resultados	37
Discusión	46
Conclusión.	47
Nomenclatura	47
Nomenclatura de figuras e imágenes.	49
Nomenclatura de Tablas.	50
Nomenclatura de gráficas.	50
Bibliografía.	51
Apéndice.	52

Capítulo 1. Absorción multicomponente

1.1 Absorción.

La absorción es una operación que consiste en el intercambio de materia entre una fase gaseosa y una fase líquida. Es decir, hay un paso de materia desde la fase gaseosa a la líquida y dicha operación puede llevarse a cabo en columnas por etapa (o platos) o en columnas de relleno.

Durante el desarrollo de la absorción, se verifica que la circulación entre el gas y el líquido se encuentren en contracorriente esto con el fin de que la sustancia a absorber (soluta) quede atrapado en el agente absorbedor (disolvente). Cabe mencionar que existen 2 tipos de absorción.

Absorción física: No existe reacción química entre el absorbente y sucede cuando se utiliza agua o hidrocarburos como disolventes. Este proceso es reversible en naturaleza, lo que significa que puede haber un equilibrio entre la cantidad de soluto absorbido y la cantidad desorbida (operación contraria a la absorción). El equilibrio se establece de manera relativamente sencilla. Las fuerzas impulsoras detrás de la absorción física son las fuerzas de van der Waals, que son fuerzas intermoleculares que atraen a las moléculas del soluto hacia el absorbente.

Debido a esta atracción débil, la absorción física suele requerir menos energía en forma de calor para que ocurra. La cantidad de absorción física disminuye a medida que aumenta la temperatura; esto se debe a que el aumento de la temperatura proporciona a las moléculas del soluto más energía cinética, lo que contrarresta las fuerzas atractivas de van der Waals. A medida que la presión aumenta, se favorece la adsorción, es decir, la cantidad de soluto que se adhiere a la superficie del absorbente.

Absorción química: Se da cuando existe una reacción química en la fase líquida, lo que ayuda a que aumente la velocidad de la absorción. Es muy útil para transformar los componentes nocivos o peligrosos presentes en el gas de entrada en productos inocuos.

Una vez entendido lo anterior, la absorción física puede estar gobernado por diferentes criterios, no obstante, para el diseño de las columnas de absorción, se utilizan principalmente 2 principios. La solubilidad y/o el equilibrio.

1.2 Solubilidad

La solubilidad es una medida de la capacidad de disolverse una determinada sustancia (soluta) en un determinado medio (disolvente).

La solubilidad de una sustancia en otra está determinada por el equilibrio de fuerzas intermoleculares entre el disolvente y el soluto, y la variación de entropía que acompaña a la solvatación. Factores como la temperatura y la presión influyen en este equilibrio, cambiando así la solubilidad. La solubilidad también depende en gran medida de la presencia de otras sustancias disueltas en el disolvente.

La solubilidad es dependiente de dos variables las cuales son la presión y la temperatura. En caso de la presión, la solubilidad aumenta conforme también se aumente la presión, esto se debe a que se ejerce una fuerza que provoca que las moléculas choquen con mayor fuerza en el área de contacto. Caso contrario a lo que sucede con la temperatura, es decir, a mayor temperatura la solubilidad se ve desfavorecida y por lo tanto disminuye.

También recordemos que este fenómeno está conformado por una fase gas la cual se encuentra a una cierta concentración y a una cierta presión y por una fase líquida la cual también se encuentra a una concentración y presión distinta a la del gas.

Lo antes mencionado son definiciones que ayudan a comprender el fenómeno de solubilidad. Para tener una mejor idea de que es la solubilidad, se puede definir como el equilibrio al que se llega cuando la concentración de la fase líquida es la misma a la concentración a la que se encuentra la fase gaseosa y por lo tanto llegan a una convergencia en la temperatura y presión. En otras palabras, es el límite en el que un gas se puede disolver en un líquido.

Realizando un esquema de cómo se lleva a cabo la absorción gobernada por la solubilidad.

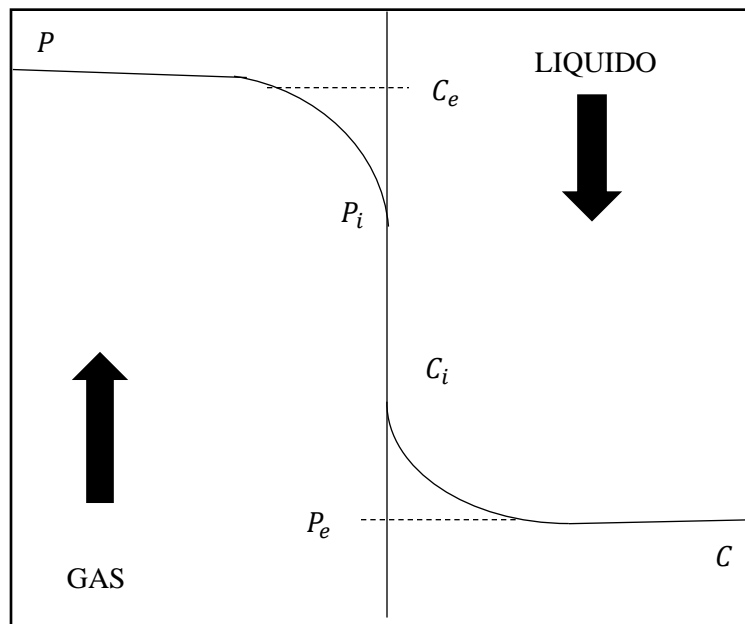


Figura 1: Mecanismo de absorción en cada etapa de la torre de absorción

Describiendo a la figura 1 de acuerdo a las definiciones ya mencionados, se entiende que el gas se encuentra con una pared (llamada interfase) en la cual el líquido está haciendo exactamente lo mismo (está llegando a la interfase) y ambas al estar en contacto y con ayuda de las fuerzas intermoleculares llegan a un equilibrio.

No obstante, este trabajo la absorción no se encuentra gobernada por el principio de la solubilidad, sino que está gobernada por otro principio llamado “equilibrio”, el cual será abordado a continuación.

1.3 Equilibrio

El equilibrio se cumple gracias a las fuerzas de Van der Waals, ya que dicha fuerza se puede dar entre cualquier átomo o molécula sin importar su estructura o composición, esto provoca que las moléculas o átomos de una especie se adhieran por una fuerza débil que provoca con otra molécula o átomo.

Para entender cómo funciona el equilibrio en dichas torres, es necesario imaginar una etapa ideal como se muestra a continuación (figura 2).

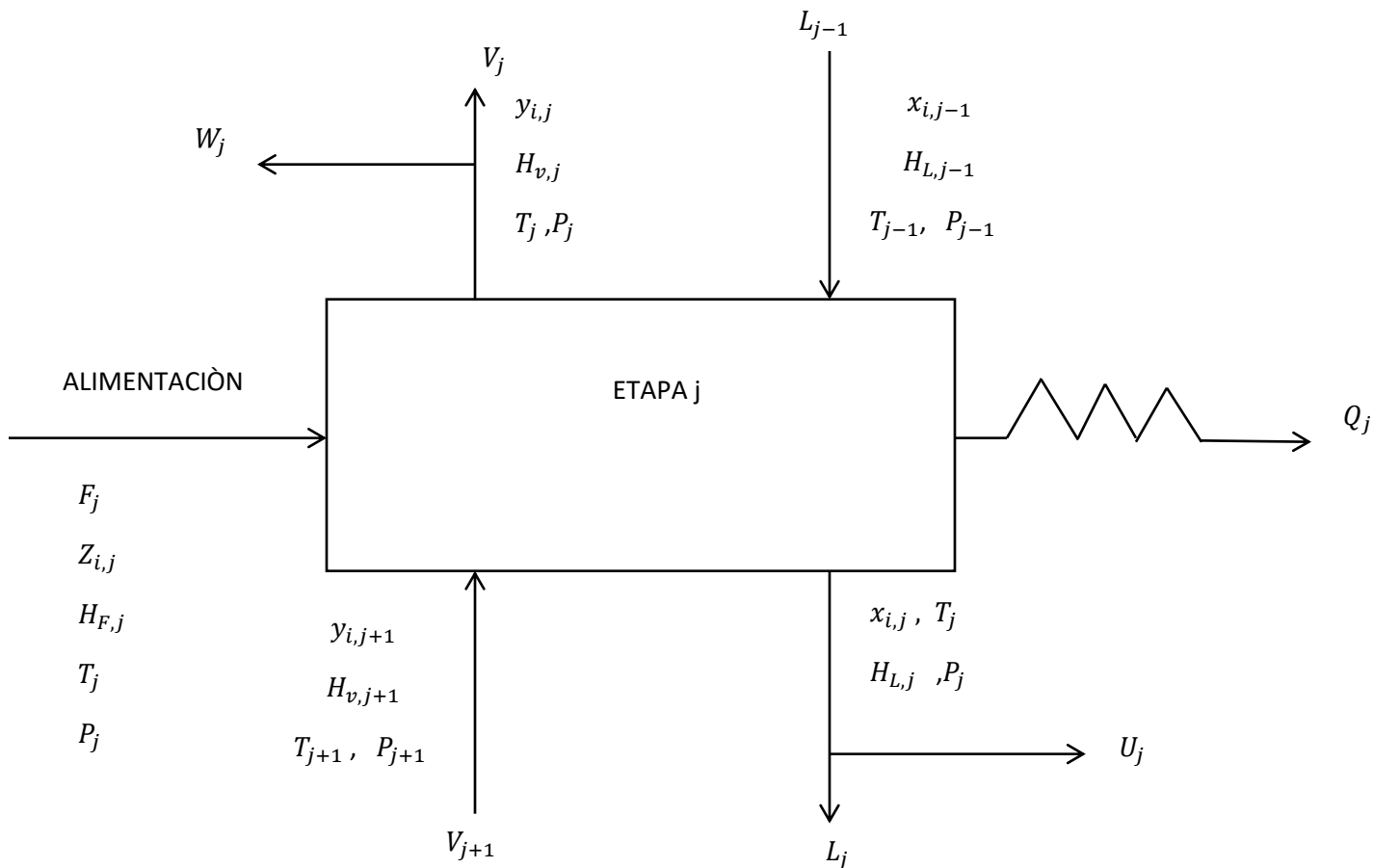


Figura 2: Representación de una etapa "j" de una torre de absorción multicomponente.

Dónde:

i = componente.

j = etapa.

w_j = Extracción de un componente "i" de la corriente del gas.

V_j = Salida del gas en la etapa "j".

V_{j+1} = Entrada del gas en la etapa "j".

U_j = Extracción de un componente "i" de la corriente del líquido.

L_j = Salida del líquido en la etapa "j".

L_{j-1} = entrada del liquido en la etapa "j".

w_j = Extracción de un componente "i" de la corriente del gas.

F_j = entrada de alimentación lateral a la etapa "j".

Q_j = Suministro/Desprendimiento de calor en la etapa "j".

$Z_{i,j}$ = Composición del componente "i" en la etapa "j".

$x_{i,j}$ = Composición de salida del componente "i" en la etapa "j" para el liquido.

$y_{i,j}$ = Composición de salida del componente "i" en la etapa "j" para el gas.

$x_{i,j-1}$ = Composición de entrada del componente "i" en la etapa "j" para el liquido.

$y_{i,j+1}$ = Composición de entrada del componente "i" en la etapa "j" para el gas.

$Z_{i,j}$ = Composición del componente "i" en la etapa "j".

Hv_j = Entalpia de vapor en la salida de la etapa "j".

Hv_{j+1} = Entalpia de vapor en la entrada de la etapa "j".

$H_{L,j-1}$ = Entalpia del liquido en la entrada de la etapa "j".

$H_{L,j}$ = Entalpia del liquido en la salida de la etapa "j".

T_j = Temperatura a la que se encuentra la etapa "j".

T_{j-1} = Temperatura a la que entra el liquido en la etapa "j".

T_{j+1} = Temperatura a la que entra el gas en la etapa "j".

P_j = Presión a la que se encuentra la etapa "j".

P_{j-1} = Presión a la que entra el liquido en la etapa "j".

P_{j+1} = Presión a la que entra el gas en la etapa "j".

La etapa ideal para una columna de absorción es como la que se mostró en la figura 2.

En ella podemos observar todos los elementos que la conforman y aunque la figura 2 es solo una representación muy básica de como luce una etapa de una torre de absorción, podemos esquematizar todos esos elementos en una columna de absorción.

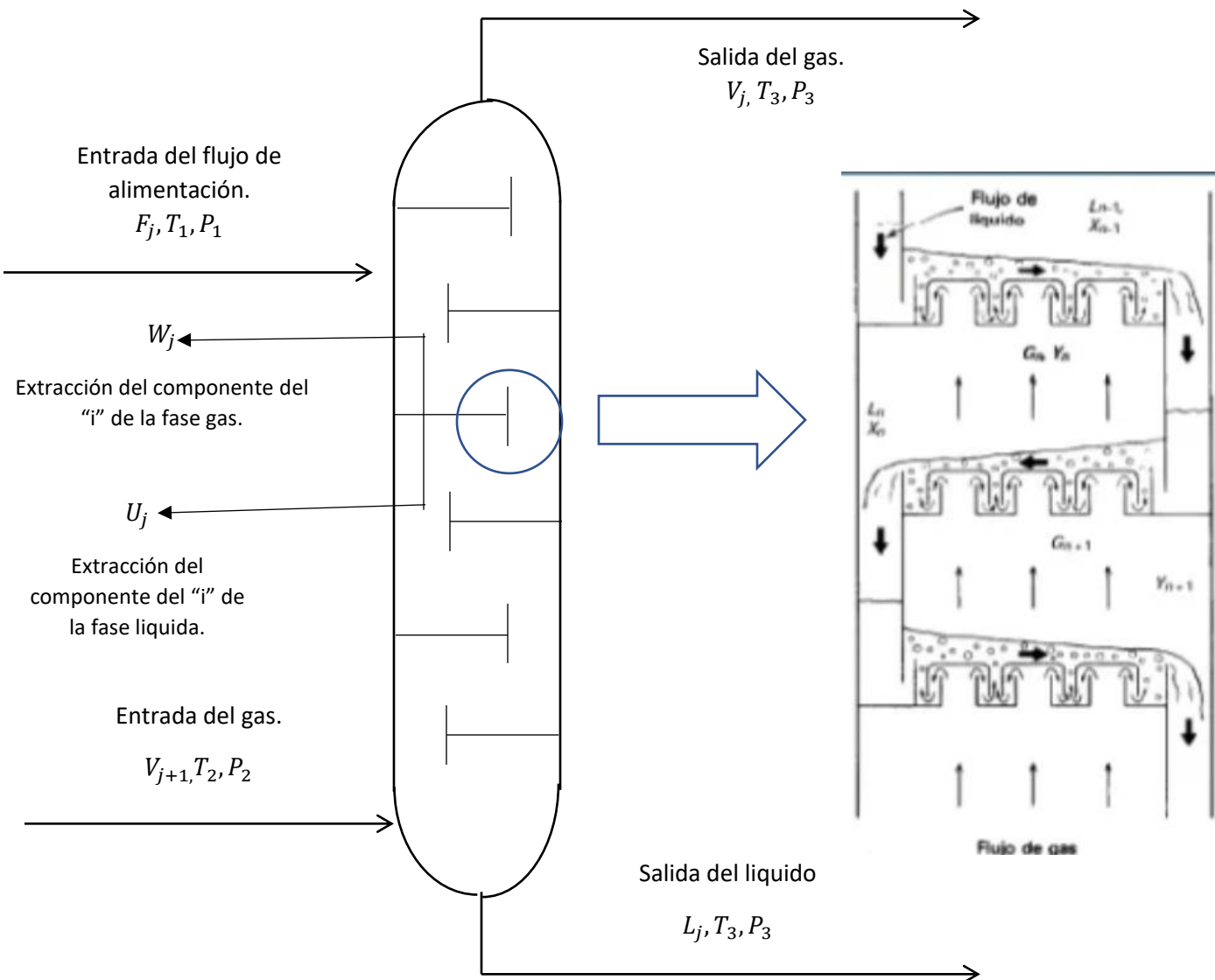


figura 3: Representación de la figura 2 en una columna de absorción multicomponentes.

Al analizar la figura 3, podemos observar que es una columna de absorción conformada por seis etapas, entradas y salidas para la fase líquida y para la fase gas, así como también podemos observar que en la etapa tres se encuentra una extracción de un componente "i" tanto en fase líquida como también en fase gas. También se observa que en la etapa tres hay un análisis sobre el plato, es decir, como es que se presenta el equilibrio en el plato.

Se observa como el gas se desprende de abajo hacia arriba encontrándose con el plato, es importante mencionar que estos platos tienen perforaciones las cuales permiten el paso del gas. De la misma manera se observa como el líquido fluye de forma descendente por gravedad pasando por el plato provocando que algunos componentes del gas queden atrapados en el líquido.

Dicho de otra manera, en las columnas de absorción de platos o de etapas son cilindros verticales en donde el líquido y el gas se ponen en contacto en forma de paso sobre el plato. El líquido entra en la parte superior y fluye en forma descendente por gravedad. En el camino fluye a través de un conducto, al plato inferior mientras el gas pasa hacia arriba, a través de los orificios de un tipo u otro en el plato; entonces burbujea a través del líquido para formar una espuma para ser separado de dicha espuma y pasar al plato superior. Cada plato en la columna es una etapa, puesto a que en los platos se ponen los fluidos en contacto íntimo.

El número de platos o de etapa que tiene cada torre de absorción corresponde a la complejidad de la mezcla a separar. En otras palabras, entre más platos tenga una columna de absorción, es más difícil separar el componente de interés de la mezcla.

Como se observa en el equilibrio en el plato tres, ya no existe una frontera que separe a la fase líquida, de la fase gaseosa, ya que ahora se encuentran en equilibrio, es decir ahora conforman un sistema gas-líquido. También podemos notar que ya no existen dos presiones ni dos temperaturas. Si no que ahora solo existe una temperatura a una sola presión, esto es el resultado del equilibrio. Ambas propiedades (presión y temperatura) llegaron a una convergencia las cuales ahora son las que describen al sistema.

Así como se analizó el plato tres, es como sucede a lo largo de todos los platos o etapas que conforman a una columna de absorción siempre y cuando estén gobernados por el equilibrio.

Introducción al capítulo 2.

Este capítulo abarca de donde proviene la constante de equilibrio o bien la distribución gas-líquido, también se aborda la importancia que tiene la constante de equilibrio gas-líquido (K), así como también se muestran las primeras ecuaciones y gráficas propuestas para el cálculo o lectura de la ya mencionada constante de equilibrio (K) por diferentes autores y asimismo como fueron modificadas para tener mayor certeza de sus valores.

El capítulo formalmente presenta las distintas maneras de obtener la constante de equilibrio desde la ecuación más básica hasta ecuaciones que involucren más parámetros para evitar la incertidumbre de los resultados de la constante de equilibrio.

Capítulo 2: La constante de equilibrio.

2.1 valor de K o relación de distribución gas-líquido.

La constante de equilibrio gas-líquido (K) es representado por un valor numérico el cual indica la distribución existente entre el gas y el líquido en cada etapa que conforma a la torre de absorción. Es decir, indica que fase está predominando dentro de la etapa de interés.

Anteriormente estas constantes de equilibrio no se calculaban de manera matemática, sino que sus datos eran recopilados de manera experimental. Esto solía ser muy tardado y costoso, ya que como se mencionó, ninguna columna de absorción cumple con todas las características de las etapas de manera ideal (Figura 3). Además de que difícilmente se podían conocer todas las constantes para un

infinito número de mezclas. Sin embargo, ahora se sabe que el valor de la constante de equilibrio (K) depende de la temperatura a la que se encuentra el sistema, por ello es importante especificar dicha variable.

Es de interés conocer dicho valor, ya que más adelante será útil para conocer la composición del líquido en la etapa "j" ($x_{i,j}$) y la composición del gas en la etapa "j" ($y_{i,j}$). Esto se puede saber con ayuda de la ecuación de suma de fracciones molares de las ecuaciones M.E.S.H.

Dichas ecuaciones se verán más adelante de forma detallada. Una vez explicado porque la constante de equilibrio del sistema gas-líquido es importante y que nos indica, es importante mencionar algunas ecuaciones que fueron propuestas para el cálculo de las constantes de equilibrio de manera matemática.

2.2 Ley de Raoult y Dalton para el cálculo de la constante de equilibrio (K).

La ley de Raoult establece que la presión parcial de vapor de cada componente de una mezcla ideal de líquido es igual a la presión de vapor del componente dentro de la mezcla.

$$P_i = P v_i x_i$$

Donde:

P_i = Presión parcial del componente "i".

$P v_i$ = Presión de vapor del componente "i".

x_i = Fracción molar del componente "i".

Esta ecuación ayuda a predecir el valor numérico que tendrá la presión parcial de un componente e incluso puede ser útil para conocer la composición molar de dicho componente si se realiza un despeje. El detalle que presenta esta ecuación es que solo describe a la fase del líquido. No obstante, existe también la conocida ley de Dalton.

Dicha ley describe la presión parcial de un componente en una mezcla de gases.

$$P_i = y_i P$$

Donde:

P_i = Presión parcial del componente "i".

y_i = Fracción molar del componente "i".

P = Presión total del sistema.

Ambas leyes describen a una fase, Raoult describe la fase del líquido, mientras que Dalton describe la fase del gas. Entonces si se tiene un sistema gas-líquido, ambas ecuaciones se ven involucradas en dicho sistema y son utilizadas ya sea para describir la fase del líquido o bien la fase del gas. Lo interesante es que si se juntan ambas leyes se obtiene la siguiente ecuación.

$$\frac{y_i}{x_i} = \frac{Pv_i}{P} = K_i \quad (2.0)$$

Donde:

K_i = Constante de equilibrio en un sistema gas – liquido.

x_i = Fracción molar del componente "i".

y_i = Fracción molar del componente "i".

Pv_i = Presión de vapor del componente "i".

P = Presión total del sistema.

Como se observa la ecuación (2.0) puede estar en términos de composiciones molares o en términos de presiones. Esto es muy útil ya que es el modelo matemático más utilizado para calcular de manera rápida la constante de equilibrio en un sistema gas-liquido.

2.3 Ecuación de Wilson.

Para diseñar una torre absorción para 2 o más componentes, se necesita primeramente una mezcla de 2 o más hidrocarburos, así como también un agente absorbedor que permita separar los componentes de la mezcla. Para ello se necesita conocer algunas variables como lo son:

1. La composición del gas y del líquido.
2. La presión a la que se encuentra dicho gas.
3. La temperatura a que es inyectado el gas y agente absorbedor.

Estas variables se pueden observar de igual manera en la figura 3.

Durante el diseño de dicha columna de absorción se desarrollan las ecuaciones M.E.S.H (balance de masa, la relación de constante de equilibrio, suma de fracciones molares y el balance de energía o bien de entalpia). Sin embargo, en dichas ecuaciones encontramos la variable "K" (constante de equilibrio entre el gas y el líquido).

Dicha constante en una mezcla de 2 o más componentes es totalmente dependiente de las otras variables ya mencionadas (composición, presión y temperatura).

La ecuación más general para calcular esta constante es:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} \quad (2.1)$$

Como se mencionó anteriormente se necesitan conocer las composiciones tanto en el gas como en el líquido. Esto resulta ser complicado, pues recordemos que en una columna de absorción existen platos o etapas que manejan una presión y temperatura diferente. Es decir, la constante de equilibrio para cada componente es totalmente diferente en cada etapa o plato.

Por ello se han desarrollado ecuaciones matemáticas que permitan predecir el valor de la constante de equilibrio, la mayoría de dichas ecuaciones están en función de la presión y temperatura.

La ecuación de Wilson fue modelada en 1968 bajo el desarrollo de experimentos. Esta propuesta resulto ser muy útil para cuando se manejan presiones relativamente “bajas” (el intervalo de presiones fue propuesto por McWilliams más adelante).

Esta ecuación está fundamentada con la Ley de Raoult.

$$K_i = \frac{P_{ci}}{P_t} \exp \left[5.37(1 + \omega_i) \left(1 - \frac{T_{ci}}{T} \right) \right] \quad (2.2)$$

Donde:

P_{ci} = Presión crítica del componente [PSIA]

P_t = Presión total del sistema [PSIA]

T_{ci} = Temperatura crítica del componente [°R]

T = Temperatura del sistema [°R]

ω = factor acentrico

2.4 Modificación de Torp a la ecuación de Wilson.

Posteriormente la ecuación de Wilson tuvo un análisis más profundo por Torp y este último fue quien añadió la variable de la presión de convergencia (P_k). Dicha presión se encuentra en unidades PSIA.

Implementando dicha variable a la ecuación de Wilson, se obtuvo el siguiente modelo.

$$K_i = \left(\frac{P_{ci}}{P_k} \right)^{A-1} \left(\frac{P_{ci}}{P_t} \right) \exp \left[5.37(1 + \omega_i) \left(1 - \frac{T_{ci}}{T} \right) \right] \quad (2.3)$$

Donde:

$$A = 1 - \left(\frac{P_t - 14.7}{P_k - 14.7} \right)^{0.6}$$

P_t = Presión total del sistema [PSIA].

P_k = Presión de convergencia [PSIA].

ω_i = factor acentrico.

Cabe mencionar que el concepto de presión de convergencia (P_k) se refiere a que, si se observa una mezcla de hidrocarburos con cierta composición, a una temperatura constante mientras que la presión va aumentando, entonces esta presión llegará a una convergencia (es equivalente a la presión de operación del sistema o en este caso, a la presión a la que opera la columna de absorción).

Para obtener este valor de presión de convergencia (P_k) era necesario tener una columna de absorción en funcionamiento, por lo cual no era lo más ideal. Sin embargo, Torp no fue el único que realizó aportes a la ecuación de Wilson.

2.5 Aporte de Ahmed a la ecuación de Torp.

Debido a que la ecuación de Torp requería conocer la presión de convergencia del sistema (P_k) de manera experimental, se buscó la manera de encontrar dicha presión de manera teórica, ya que esto ayudaría a tener un mejor control para las columnas de absorción, así como también ayudaría a tener un ahorro económico a la hora de construir dichas torres absorción, por ello Ahmed se dedicó a buscar una ecuación que mediante métodos numéricos ayudara a predecir de manera más precisa el valor de la presión de convergencia (P_k).

La ecuación que modelo para encontrar la presión de convergencia (P_k) fue la siguiente:

$$P_k = -2381.8542 + 46.341487(M_w\gamma) + \sum_{i=1}^3 a_i \left[\frac{(M_w\gamma)}{T-460} \right]^i \quad (2.4)$$

Donde:

M_w = masa molecular promedio de la mezcla.

γ = densidad relativa (densidad del vapor de agua).

T = temperatura en °R.

a_i = constante para el componente "i".

2.6 Implementación de Priester para la lectura de las K.

Sin embargo y como ya se mencionó, lo que se hacía era realizar experimentos para conocer valores numéricos ya sea para la presión de convergencia (P_k) o incluso el valor de las constantes de equilibrio (K). No obstante, ya se conocía la ecuación propuesta por Torp la cual ayudaba a predecir el valor de K y fue gracias a esta ecuación que Delaware Priester pudo desarrollar una serie de gráficos en donde se podría leer el valor de la constante de equilibrio gas-líquido para hidrocarburos ligeros a diferentes presiones y temperaturas. Fue así como se empezó a tener un valor preciso para la constante de equilibrio, ya que, si bien se podía calcular con la ecuación de Torp, también se podía obtener de manera experimental. Es decir, se conocían 2 maneras de obtener dicha constante de equilibrio. A continuación, se presenta un ejemplo de dichos gráficos realizados por Delaware Priester.

Si se desea conocer más gráficos de Priester, se recomienda revisar la bibliografía 1.

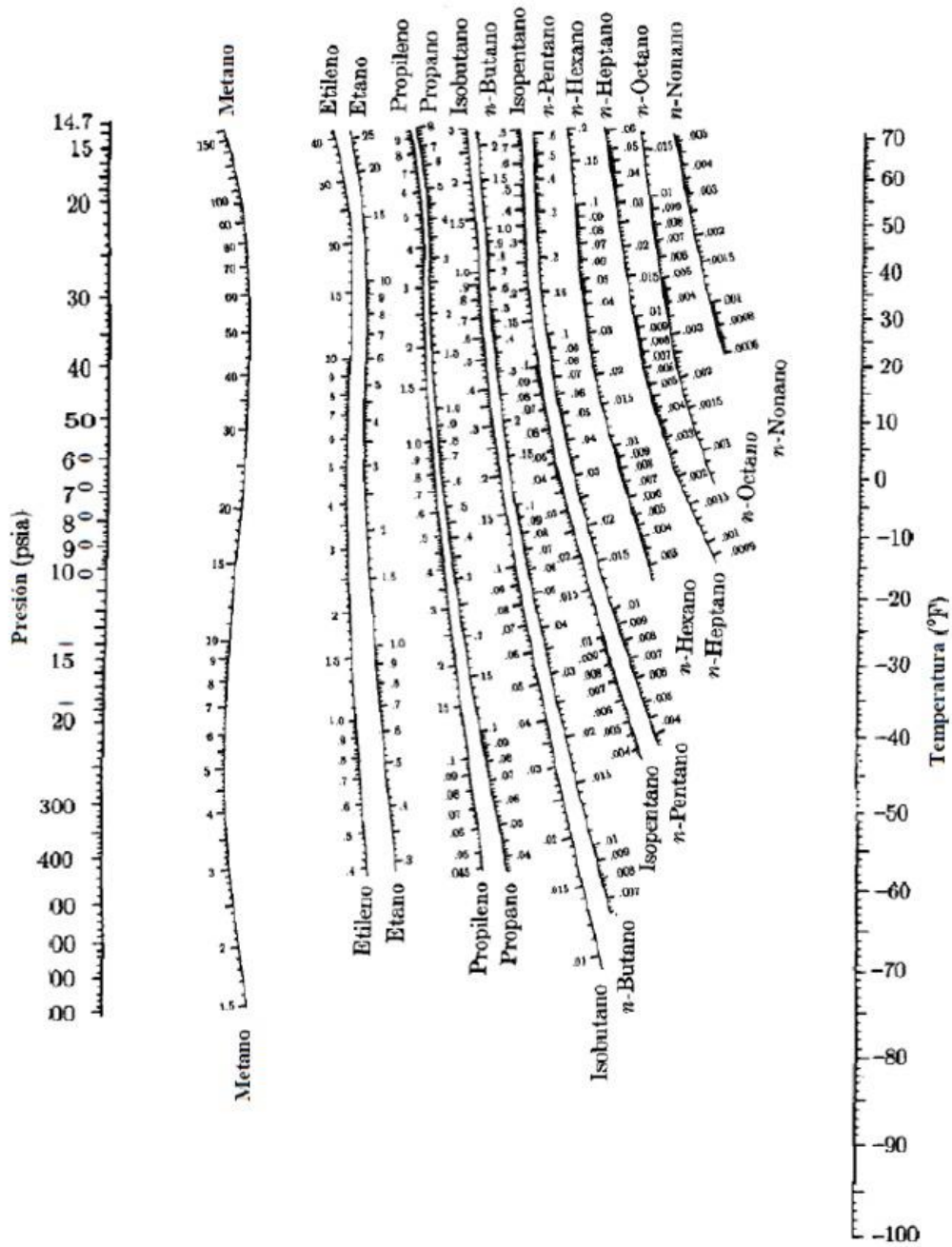


Imagen 1: Grafico De Priester para diferentes compuestos a diferentes presiones y temperaturas.

2.7 Polinomio de McWilliams

Cabe mencionar que la ecuación de Torp, tenía un pequeño porcentaje de error con respecto al valor de la constante de equilibrio que se obtenía de manera experimental por ello McWilliams ajusto un polinomio que ayudará a predecir los valores de dichas constantes de equilibrio gas-liquido tomando como referencia los gráficos de Priester, sin embargo, la limitación que tiene el polinomio propuesto por McWilliams está en que solo es útil para un cierto rango de temperaturas y presiones.

El polinomio que se obtuvo se utiliza solo en el intervalo de temperatura de 365.7 °R a 851.7 °R (-93.7°F a 392.03°F) y con presiones que se encuentren entre 14.69 PSIA y 870.7 PSIA.

$$\ln(K_i^*) = a_{T1} \left(\frac{1}{T^2} \right) + a_{T2} \left(\frac{1}{T} \right) + a_{T3} (\ln T) + a_{T4} T + a_{T5} T^2 + a_{T6} + a_{p1} [\ln P] + a_{p2} \left(\frac{1}{P^2} \right) + a_{p3} \left(\frac{1}{P} \right) + a_{p4} (\ln P)^2 + a_{p5} (\ln P)^3 + a_{p5} (P) \quad (2.6)$$

Donde:

K^* = Constante de equilibrio de McWilliams.

T = Temperatura [°R].

P = Presión a la que opera el sistema [PSIA].

a_{Ti} = Constante para el componente "i".

a_{pi} = Constante para el componente "i".

Como se mencionó, Priester grafico los datos recopilados de manera experimental de las constantes de equilibrio a diferentes temperaturas y presiones, es decir, para Priester la manera de obtener las constantes de equilibrio, son mediante lectura de sus gráficos.

En cambio, para McWilliams la manera de obtenerlo es mediante su polinomio, el cual describe el comportamiento de los gráficos de Priester. Es decir, dichas constantes de equilibrio se pueden conocer mediante las gráficas de Priester o bien mediante el polinomio de McWilliams.

Debido a que el polinomio propuesto por McWilliams es el más utilizado debido a que existen tablas de donde se pueden obtener las constantes de los componentes. Sin embargo, también se puede utilizar una modificación de la ecuación de Torp, la que involucra la constante de equilibrio de McWilliams.

Dicha ecuación modificada de Torp, es la siguiente:

$$K_i = \left(\frac{P_{ci}}{P_k} \right)^{A-1} \left(\frac{P_{ci}}{P_t} \right) \exp[(A)(K_i^*)] \quad (2.7)$$

Donde:

$$A = 1 - \left(\frac{P_t - 14.7}{P_k - 14.7} \right)^{0.6}$$

K_i = Constante de equilibrio de Torp.

K_i^* = Constante de equilibrio de McWilliams.

P_{ci} = Presión crítica del compuesto "i".

P_k = Presión de convergencia.

P_t = Presión de operación del sistema.

2.8 Otras propuestas para la constante de equilibrio.

Como se mencionó anteriormente existen ecuaciones que permiten calcular la constante de equilibrio en los sistemas gas-liquido.

Una vez presentadas las ecuaciones que permiten el cálculo de dicha constante para un intervalo de presiones. Surge un nuevo problema, el polinomio de McWilliams al estar basado en los gráficos elaborados por Priester, solo son útiles para esos intervalos. Sin embargo, para predecir valores para dichas constantes de equilibrio gas-líquido que vayan más allá del intervalo establecido, pues dejan de ser precisas. En la actualidad se han modelado nuevas ecuaciones que permitan el cálculo de las constantes de equilibrio a presiones y temperaturas superiores a las que utilizó Priester.

Por lo tanto, se ha modificado la ecuación de Wilson y Torp para mejorar la precisión de los valores de la constante de equilibrio para presiones inferiores y superiores.

Dicha propuesta de ecuación modificada es la siguiente:

$$K_i = \left(\frac{P_{ci}}{P_k}\right)^{1+2\beta} \left(\frac{P_{ci}}{P_t}\right) \exp \left[5.37\beta(1 + \omega_i) \left(1 - \frac{T_{ci}}{T}\right) \right] \quad (2.8)$$

Donde:

$$\beta = \left(\frac{T_{bmix}}{T}\right)^{\left(\frac{T}{T_{cmix}}\right)} \quad (2.9)$$

$$T_{bmix} = \sum_{i=1}^n Z_i T_{bi} \quad (2.10)$$

$$T_{cmix} = \sum_{i=1}^n Z_i T_{ci} \quad (2.11)$$

β = factor de corrección.

T_{bmix} = Temperatura de ebullición de la mezcla [°R]

T_{cmix} = Temperatura crítica de la mezcla [°R]

$T = \text{Temperatura } [^{\circ}\text{R}].$

$P = \text{Presión [PSIA].}$

$P_{ci} = \text{Presión crítica del componente "i".}$

$P_k = \text{Presión de convergencia del sistema [PSIA]}$

$Z_i = \text{Factor de compresibilidad del componente "i".}$

$T_{ci} = \text{Temperatura crítica del componente "i" } [^{\circ}\text{R}].$

$T_{bi} = \text{Temperatura de ebullición del componente "i"} [^{\circ}\text{R}].$

$\omega_i = \text{factor acentrico del componente "i".}$

2.9 Otros modelos matemáticos útiles.

Recordemos que la constante de equilibrio también se ve influenciada por la temperatura a la que se esté operando el sistema a analizar (en este caso, la columna de absorción), por lo que no solo cambia la constante de equilibrio, sino que también las entalpías que se tienen en la etapa (figura 3), por lo tanto, es importante tener algún modelo matemático que ayude a calcular dichas entalpías.

Es importante considerar que la entalpia está en función del calor específico y a su vez, este es función de la temperatura por lo que se requiere del conocimiento de ecuaciones matemáticas que permitan predecir el valor de las entalpías del líquido para el agente absorbedor (en este caso del n-hexano). Para ello con ayuda de datos de literatura (Yaws, 1999) se realizó una curva que representará el comportamiento del n-hexano a diferentes temperaturas.

Para el cálculo de la entalpia del líquido se utilizó la siguiente ecuación propuesta por el libro Yaws 1999.

$$C_p = A + BT + CT^2 + DT^3 = \left[\frac{J}{mol K} \right] \quad 2.12$$

$$H_l = \int C_p dT = \int (A + BT + CT^2 + DT^3) dT = \left[\frac{J}{mol} \right] \quad 2.13$$

Una vez identificadas estas ecuaciones, se buscó en el mismo libro los datos del agente absorbedor utilizado. En este caso el agente absorbedor propuesto es el n-hexano.

De igual manera en la bibliografía 8 se encuentra el libro Yaws de 1999, se le recomienda al lector que lo consulte para que pueda realizar cálculos con diferente constante de diferentes compuestos.

Tabla 1. Datos obtenidos por el libro Yaws 1999 para el n-hexano

CONSTANTES (n-Hexano) #598 pag.67			
A	B	C	D
78.848	0.88729	-0.0029482	4.1999E-06

Cabe mencionar que el agente absorbedor n-hexano fue escogido arbitrariamente, por lo cual el lector también puede realizar su propuesta y obtener de igual manera una ecuación matemática que describa su comportamiento a diferentes rangos de temperatura y así realizar una nueva comparación de resultados.

A lo largo del desarrollo de este trabajo, se manejaron las mismas unidades que nos proporciona el problema (Sistema de unidades ingles). Por lo tanto, se realizaron las conversiones correspondientes para las ecuaciones (2.12) y (2.13).

Es importante mencionar que los modelos matemáticos de las ecuaciones (2.12) y (2.13) tendrán su uso más adelante en el capítulo 3. Esto debido a que todavía faltan conceptos por definir y entender.

Por otra parte, se le invita al lector a buscar diferentes modelos matemáticos que ayuden a calcular el calor específico y las entalpías de vapor y líquido. Esto con el fin de tener más ecuaciones que puedan ayudar a tener mejores resultados para el estudio de la columna de absorción multicomponente.

De igual manera también se le invita al lector a utilizar diferentes agentes absorbedores para comparar los diferentes resultados calculados, esto con el fin de verificar cual es el agente absorbedor más adecuado a utilizar en la columna de absorción.

Introducción al capítulo 3:

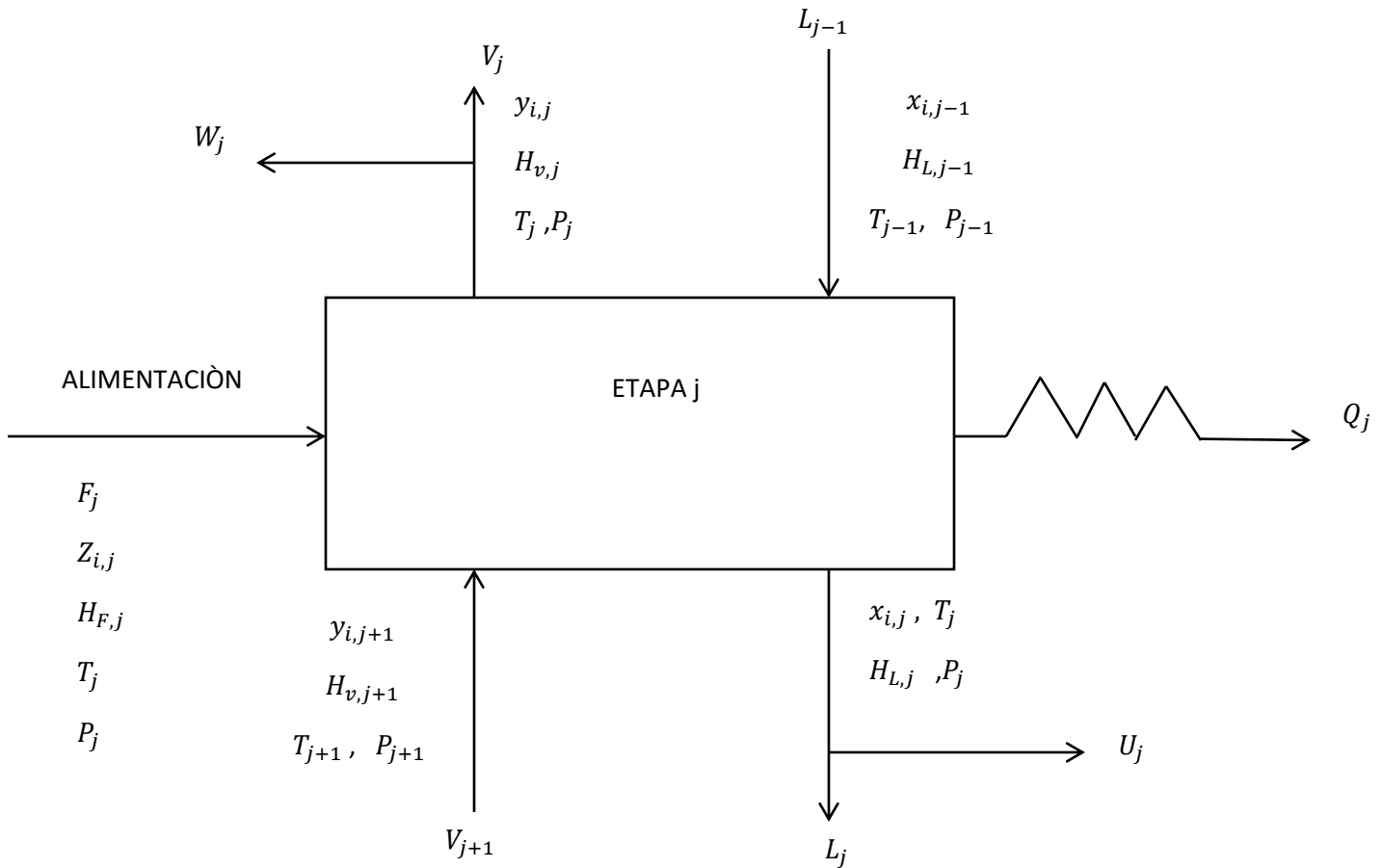
Durante este capítulo se explica que son las ecuaciones M.E.S.H y como es que son aplicadas para el diseño de las torres de absorción, así como también se presenta un problema teórico para el estudio de una columna de absorción tomado del libro “Seader, J.D y Henley, E.J 2000” y resuelto por el autor Henley y también se expone el método utilizado para el cálculo de las variables que se ven involucradas en el problema teórico de la columna de absorción y cuáles son sus limitantes del método, también se muestran los resultados obtenidos al utilizar el método de resolución y las ecuaciones propuestas por el autor Henley y se presenta una comparación entre los resultados que se obtienen con 2 diferentes modelos matemáticos (los modelos matemáticos propuestos por el autor y el propuesto en este trabajo) y 2 agentes absorbedores distintos (el aceite absorbedor propuestos por el autor del problema y el propuesto en este trabajo, siendo el n-hexano).

Capítulo 3: Resolución del problema.

3.1 Ecuaciones M.E.S.H

Para entender a las ecuaciones M.E.S.H es importante mencionar que surgieron con el fin de facilitar la simulación de las columnas de absorción de mezclas multicomponentes. Estas ecuaciones ayudan a verificar si los balances de materia y energía son correctos o si se requiere modificar alguna variable en la torre de absorción antes de su construcción.

Para un equipo de separación liquido-vapor con etapas de equilibrio en arreglo con cascada operando en estado estable, cada etapa puede ser descrita como se muestra en la figura 2.



Dónde:

i =componente.

j =número de plato de la torre de absorción.

figura 2: Representación de una etapa "j" de una torre de absorción multicomponente.

Como se mencionó anteriormente, para el análisis de una columna de absorción se utiliza el conjunto de ecuaciones denominadas M.E.S.H. Esto con el fin de predecir algunas variables que se desconocen en la torre de absorción. Dichas ecuaciones corresponden al balance de materia (M), relación de equilibrio (E), sumatoria de fracciones molares (S) y el balance de energía (H).

Para la solución de dichas ecuaciones se deben tenerse ecuaciones “M” modificadas, las cuales se obtienen a partir de tomar T_j y V_j como variables de corte. Obteniéndose la siguiente forma:

$$A_j x_{i,j-1} + B_j x_{i,j} + C_j x_{i,j} = D_j$$

Esta forma es para cada etapa que se tenga en la torre de absorción, incluso dicha ecuación puede ser acomodada de forma matricial teniendo la forma de una matriz tridiagonal.

3.2 Matriz tridiagonal.

Al tener la forma de la figura 6, se facilita el cálculo de las variables de las ecuaciones M.E.S.H. Es muy útil esta matriz ya que con ella se puede calcular todas las variables en toda la torre absorción de manera simultánea.

La matriz tridiagonal es una matriz en la cual sus elementos son solo distintos de cero en la diagonal principal y las diagonales adyacentes (las diagonales que están por debajo y encima de la principal).

También la matriz tridiagonal es una modificación de la eliminación Gaussiana tradicional. Con este procedimiento se aísla la variable de interés (principalmente la variable “ $x_{i,j}$ ” la cual representa la composición del componente “i” en la etapa “j”, de tal manera que después se obtengan los demás valores por sustitución, empezando de $x_{i,j-1}$ hacia atrás.

Estas matrices pueden ser resueltas principalmente por el método de Thomas, sin embargo, también pueden ser resueltas por cualquier método conocido.

Un ejemplo de ella es la figura 5.

$$M = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ 0 & 0 & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix}$$

Figura 4: Matriz tridiagonal de 4x4

Cabe mencionar que, durante el desarrollo de este capítulo, solo se emplearán las formas finales de cada ecuación. Sin embargo, si se desea observar y analizar el desglose de deducción de cada ecuación es recomendable ir al apartado de apéndice.

$$\text{Entrada} = \text{Salidas} \tag{3.1}$$

La ecuación (3.1) es una descripción muy general para la torre de absorción, por lo que a partir de la siguiente ecuación (3.2) se utilizaran las variables que están establecidas para la columna de absorción para tener la ecuación más detallada.

$$(L_{j-1})(x_{i,j-1}) + (V_{j+1})(y_{i,j+1}) + (F_j)(Z_{i,j}) - (V_j + W_j)(y_{i,j}) - (L_j + U_j)(x_{i,j}) = 0 \quad (3.2)$$

Una vez deducida la ecuación de balance de materia (M) para la columna de absorción, sigue la ecuación que relaciona el equilibrio de la torre. En este caso al ser una torre de absorción, la relación tiene que ser gas-liquido (E).

$$y_{i,j} = (K_{i,j})(x_{i,j}) \quad (3.3)$$

No obstante, la variable $x_{i,j}$ puede ser conocida mediante la siguiente ecuación, la cual representa la suma de fracciones molares (S).

$$\sum_{i=1}^j x_{i,j} = 1 \quad (3.4)$$

$$\sum_{i=1}^j y_{i,j} = 1 \quad (3.5)$$

$$\sum_{i=1}^j Z_{i,j} = 1 \quad (3.6)$$

Finalmente se llega a la ecuación que describe el balance de entalpías (H). Dicho balance sigue la misma analogía que el balance de materia, llegando a la siguiente ecuación.

$$(L_{j-1})(H_{L,j-1}) + (V_{j+1})(H_{v,j+1}) + (F_j)(H_{F,j}) - (V_j + W_j)(H_{v,j}) - (L_j + U_j)(H_{L,j}) - Q_j = 0 \quad (3.7)$$

Las ecuaciones anteriores si bien, son correctas tienen el limitante que solo describen a una sola etapa de la torre de absorción por lo que hay que hacer nuevos arreglos. Para que dichas ecuaciones describan a todas las etapas de la columna de absorción, se representan de la siguiente manera:

$$\sum_{j=1}^j (L_{j-1}) + \sum_{j=1}^j (V_{j+1}) + \sum_{j=1}^j (F_j) - \sum_{j=1}^j (V_j + W_j) - \sum_{j=1}^j (L_j + U_j) = 0 \quad (3.8)$$

No obstante, la ecuación (3.8) puede seguir desglosándose para obtener una nueva ecuación. La cual llamaremos Ecuación. (3.9 o auxiliar)

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \quad (3.9 \text{ o auxiliar})$$

Si observamos nuevamente las ecuaciones (3.2) y (3.7) , se aprecia que se requiere L_{j-1} por lo que a la ecuación (3.9 o auxiliar) se le debe de hacer una modificación, quedando de la siguiente manera:

$$L_{j-1} = V_j + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \quad (3.10)$$

Ahora que se conoce la ecuación para calcular L_{j-1} se puede reacomodar la ecuación (3.2) quedando de la siguiente manera.

$$\left[V_j + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] (x_{i,j-1}) + (V_{j+1})[(K_{i,j+1})(x_{i,j+1})] + (F_j)(Z_{i,j}) - (V_j + W_j)[(K_{i,j})(x_{i,j})] - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] + U_j \right\} (x_{i,j}) = 0 \quad (3.11)$$

Modificando la ecuación (3.11) queda:

$$\left[V_j + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] (x_{i,j-1}) - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] + U_j + (V_j + W_j)K_{i,j} \right\} (x_{i,j}) + (V_{j+1}K_{i,j+1}) x_{i,j+1} = - (F_j)(Z_{i,j}) \quad (3.12)$$

Recordemos qué $x_{i,j-1}$, $x_{i,j}$ y $x_{i,j+1}$ son composiciones que no conocemos y por lo tanto son una variable que se puede calcular. Por lo que la ecuación (3.12) también puede representarse de la siguiente manera.

$$Ax_{i,j-1} + Bx_{i,j} + Cx_{i,j+1} = Dx_{i,j} \quad (3.13)$$

Dónde:

$$A_j = \left[V_j + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right]$$

$$B_j = - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] + U_j + (V_j + W_j)K_{i,j} \right\}$$

$$C_j = (V_{j+1}K_{i,j+1})$$

$$D_j = -(F_j)(Z_{i,j})$$

Recordemos que la columna de absorción no consta de una sola etapa si no que está conformada por “j” etapas, por eso cada constante (A_j, B_j, C_j y D_j) tienen esa “j”, para indicar en que etapa de la torre estamos haciendo el cálculo.

Entonces si se desea hacer un cálculo para toda la columna de absorción. La ecuación (3.13) también puede representarse en forma matricial, siendo esta su forma:

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & A_j & B_j & C_j & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{N-1} & B_{N-1} & C_{N-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & B_N & C_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{i,1} \\ x_{i,2} \\ x_{i,3} \\ \vdots \\ x_{i,j} \\ x_{i,N-1} \\ x_{i,N} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ \vdots \\ D_j \\ D_{N-1} \\ D_N \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

Si se desea observar cómo se calcula cada constante, se recomienda revisar el apéndice.

Como ya se mencionó anteriormente, las composiciones (x) son una variable que podemos calcular a partir de dicha matriz. Por lo que se propone el siguiente despeje:

$$x = \frac{D}{A} = D * A^{-1} \quad (3.15)$$

Si se quiere conocer la metodología empleada para el cálculo de las composiciones (x) se recomienda revisar el apéndice nuevamente.

3.3 Presentación del problema.

Es importante mencionar que un objetivo particular de este trabajo es demostrar de manera desglosada el cómo es que se resuelve un problema de mezclas de hidrocarburos multicomponente, esto con el fin de que el lector sea capaz no solo de resolver este mismo problema presentado. Sino que también sea capaz de resolver cualquier tipo de problemas que involucren mezclas multicomponentes en una columna de absorción de “i” componentes y “N” etapas, así como también pueda tener en la etapa “j” diferentes características de acuerdo a la representación utilizada anteriormente (figura 3.)

El problema a resolver fue sacado del libro Seader, J.D y Henley, E.J 2000. Del capítulo 15 “métodos para separaciones en múltiple etapa de sistemas multicomponentes” Citando al texto:

“Ejemplo 12.8 Tal como se muestra en la fig. 12.9, los componentes más pesados en una mezcla ligeramente sobrecalentada de hidrocarburos gaseosos han de separarse por absorción a 400 PSIA (2.76MPa) con un aceite de peso molecular relativamente elevado. Estímese los flujos y composiciones del vapor y el líquido a la salida, por el método de grupo, si la velocidad de flujo de absorbente que entra es 165 Lb-mol/h y se utilizan 6 etapas teóricas. Supóngase que el absorbente se recircula desde un desorbedor y que tiene una temperatura y composición conocidas”.

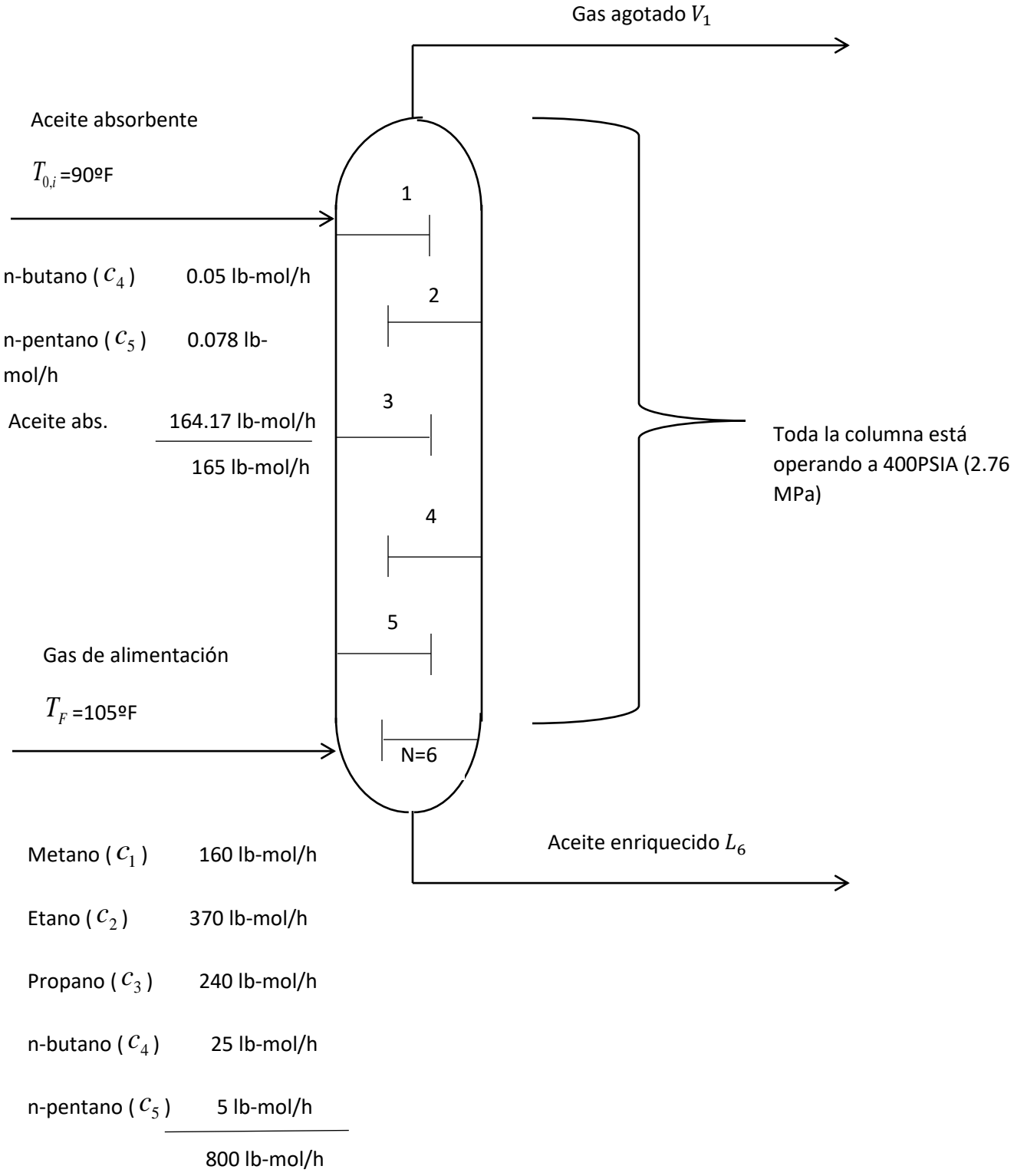


Figura 5: Representación del ejemplo 12.8 del libro Seader, J.D y Henley, E.J 2000.
Columna de absorción con 6 componentes y 6 etapas teóricas.

3.4 Método de resolución

Se empleo el método de Burningham-Otto o también llamado como la suma de los flujos (Sume Rate, por sus siglas en inglés), cabe mencionar que este método ya fue utilizado en su momento por Henley y es un algoritmo que requiere resolver matrices tridiagonales.

Durante este desarrollo también interviene el método de Newton Raphson (derivadas parciales). A continuación, se presenta el algoritmo de Burningham-Otto utilizado.

3.5 Método de suma de flujos (SR o Sume Rate de Burningham y Otto)

Dicho método fue presentado por Sujata y McNesse, pero tenía el problema que solo era aplicable a una sola etapa de la torre de absorción. Sin embargo, fue hasta 1967 donde Burningham y Otto publicaron dicho método, pero añadieron al mismo el uso de la matriz tridiagonal la cual permitió resolver los balances de masa y energía simultáneamente para toda la torre de absorción.

En el método SR, las temperaturas son las variables dominantes y se encuentran mediante una solución de Newton-Raphson de los balances de energía de las etapas que conforman a la columna de absorción.

Las composiciones no tienen tanta influencia en el cálculo de las temperaturas como los efectos del calor o los calores latentes de vaporización. Los caudales de los componentes se encuentran mediante el método de matriz tridiagonal.

El método SR es adecuado para modelar absorbentes y desorbedores (Strippings). Para algunos sistemas de ebullición extremadamente amplios, especialmente aquellos con no condensables, este es el mejor método. Se ha descubierto que funciona muy bien para los extractores laterales de un fraccionador de refinería. Los absorbentes normalmente tienen una alimentación de etapa inferior de gas rico y una alimentación de etapa superior de aceite pobre.

Otra ventaja que tiene este método es que es bastante efectivo para el diseño de torres de absorción que este manejando hidrocarburos. No obstante, también el método SR no permiten su uso directo para absorbentes rehervidos, absorbentes con condensadores o columnas de destilación.

Dicho método es confiable debido a que cuenta con un valor de convergencia, el cual se cumple cuando el error es menor a la tolerancia, en dicho valor de convergencia se encuentra un factor de amortiguación el cual en la mayoría de los casos toma el valor de 1. Dicho factor de amortiguación puede ser calculado para cada etapa de tal manera que minimice la suma de los cuadrados de las funciones.

$$\tau = \sum_{j=1}^N (T_j^B - T_j^{B-1})^2 \leq 0.01N$$

Donde:

τ = *factor de amortiguacion.*

N = *numero de etapas que conforman a la torre de absorción.*

T_j^B = Temperatura calculada en la matriz tridiagonal de cada etapa.

T_j^{B-1} = Temperatura propuesta en cada etapa.

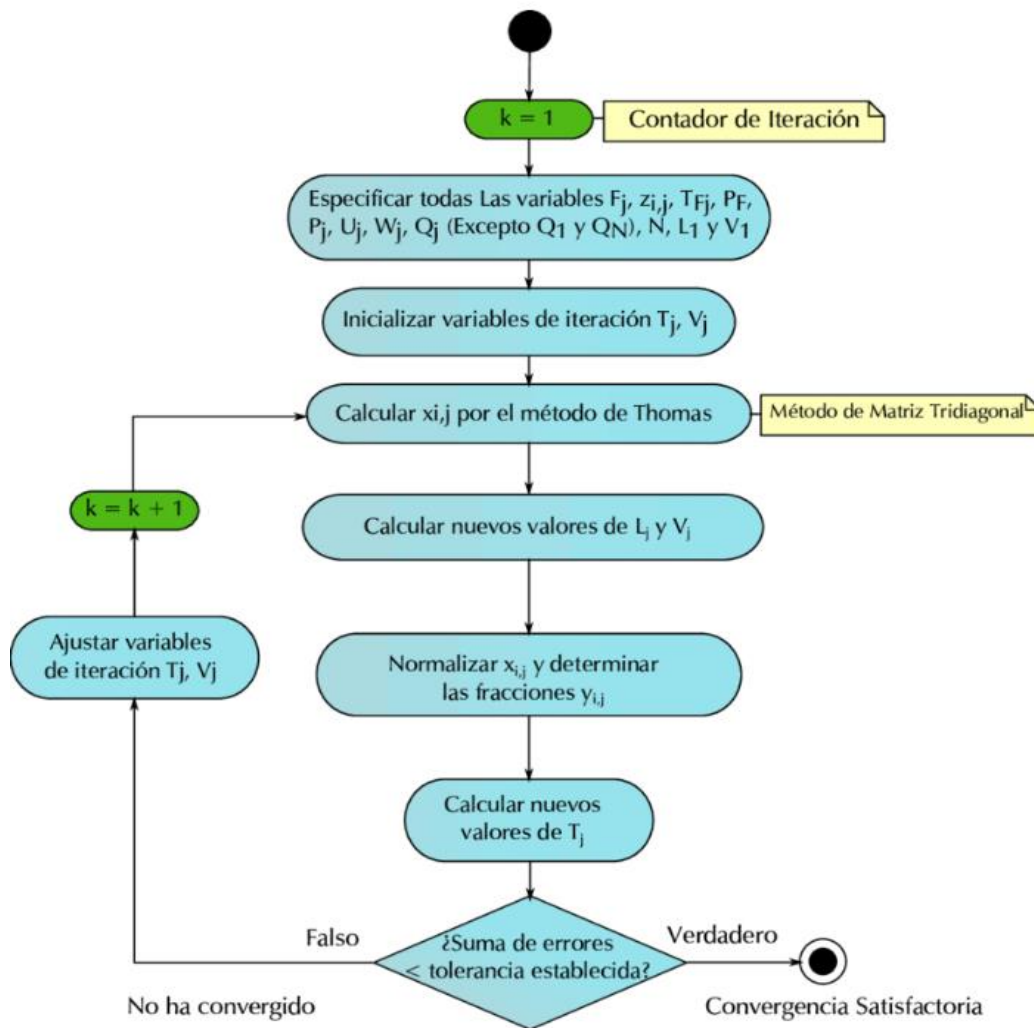


Imagen 2: Algoritmo de Burningham-Otto utilizado por Henley (https://www.researchgate.net/figure/Figura-25- Algoritmo-del-metodo-SR-de-Burningham-Otto-Seader-et-al-2011_fig6_323254600)

Cabe mencionar que el método es efectivo principalmente para mezclas de hidrocarburos multicomponentes que contengan hidrocarburos. También es importante recalcar que al ser un método riguroso es recomendable realizar los cálculos correspondientes en programas de cómputo especializados para facilitar el cálculo de todas las ecuaciones.

La resolución de este problema fue elaborada mediante el programa MathCad.

Para iniciar los cálculos se debe suponer un conjunto inicial de variables de tanteo (T_j, V_j) . Para la mayoría de los problemas es suficiente asumir valores de V_j constantes, operando desde el fondo de la torre de absorción, utilizando los flujos de alimentaciones y corrientes laterales en fase gas especificadas. Generalmente puede obtenerse un conjunto adecuado de valores T_j iniciales a partir de los valores supuestos de las etapas de fondo y de domos, suponiendo una variación lineal.

Posteriormente se utiliza la ecuación propuesta por Burnigham-Otto que lleva por nombre “Ecuación de suma de flujos” o SR (Sume Rate). Esta ecuación es la siguiente:

$$L_j^{B+1} = L_j^B \sum_{i=1}^c X_{i,j} \quad (3.16)$$

Cabe mencionar que las composiciones calculadas no están normalizadas, esto realmente no representa un mayor problema debido a que el método de Burnigham-Otto aplicado por Henley es un método iterativo por lo cual las composiciones se aproximan al valor total de “1” como lo establece la ecuación de suma de fracciones molares.

Sin embargo, si se desean normalizar para tener un mejor calculo, se utilizan las siguientes ecuaciones.

$$x_{i,j,normalizada} = \frac{x_{i,j}}{\sum_{i=1}^c x_{i,j}} \quad (3.17)$$

$$y_{i,j,normalizada} = \frac{y_{i,j}}{\sum_{i=1}^c y_{i,j}} \quad (3.18)$$

En otras palabras, es el cociente de las composiciones calculadas entre la sumatoria de todas ellas en cada plato.

Ahora si se resuelven de manera simultánea los balances de energía para la Ec. (3.7) para las N etapas o platos, se obtiene un nuevo valor para T_j de temperatura para cada etapa.

Dichas temperaturas se encuentran incluidas en las entalpías especificadas correspondientes a los flujos de líquido y de los gases no especificadas. En general estas entalpías no son lineales respecto a las temperaturas y por lo tanto se requiere un promedio de resolución iterativo como lo es el método de Newton-Raphson.

Recordemos que el método de Newton-Raphson es utilizado para linealizar ecuaciones no lineales. Si se desea comprender de mejor manera este método se recomienda revisar el apéndice.

Una vez aclarado por qué se utiliza el método de Newton Raphson, se retomó la ecuación (3.7)

$$(L_{j-1})(H_{L,j-1}) + (V_{j+1})(H_{v,j+1}) + (F_j)(H_{F,j}) - (V_j + W_j)(H_{v,j}) - (L_j + U_j)(H_{L,j}) - Q_j = 0 \quad (3.7)$$

Para facilitar en mayor medida el uso del método Newton Raphson, se cambió la estructura a la ecuación (3.7) de la siguiente manera.

obtener un nuevo conjunto de valores de T es:

$$\left(\frac{dH_j}{dT_{j-1}}\right)^B \Delta T_{j-1}^B + \left(\frac{dH_j}{dT_j}\right)^B \Delta T_j^B + \left(\frac{dH_j}{dT_{j+1}}\right)^B \Delta T_{j+1}^B = -H_j^B \quad (3.7 \text{ modificada})$$

Dónde:

$$\Delta T_j^B = T^{B+1}_j - T^B_j$$

$$\left(\frac{dH_j}{dT_{j-1}}\right) = L_{j-1} \frac{dH_{L,j-1}}{dT_{j-1}}$$

$$\left(\frac{dH_j}{dT_j}\right) = -(V_j + W_j) \frac{dH_{v,j}}{dT_j} - (L_j + U_j) \frac{dH_{L,j}}{dT_j}$$

$$\left(\frac{dH_j}{dT_{j+1}}\right) = V_{j+1} \frac{dH_{v,j+1}}{dT_{j+1}}$$

Las derivadas parciales dependen de las correcciones de entalpia que se estén utilizando. Por ejemplo, si se usan ecuaciones polinómicas independientes de la composición en función de la temperatura quedan como:

$$H_{v,j} = \sum_{i=1}^c y_{i,j} (A_i + B_i T + C_i T^2) \quad (3.19)$$

$$H_{L,j} = \sum_{i=1}^c x_{i,j}(a_i + b_i T + c_i T^2) \quad (3.20)$$

Recordemos que para la entalpia del líquido para el agente absorbedor (n-hexano) se realizó una curva que representara su comportamiento y de esa misma curva se obtuvo un polinomio que tiene la misma forma que la ecuación (3.20)

Realizando las derivadas parciales respecto a la temperatura se obtuvo las siguientes ecuaciones.

$$\frac{dH_{V,j}}{dT} = \sum_{i=1}^c y_{i,j}(B_i + 2C_i T) \quad (3.21)$$

$$\frac{dH_{L,j}}{dT} = \sum_{i=1}^c x_{i,j}(b_i + 2c_i T) \quad (3.22)$$

Cabe mencionar que las constantes a_i, b_i y c_i son correspondientes a la ecuación (2.14) del agente absorbedor (n-hexano)

Algo que resulta útil al observar la estructura de la ecuación (3.7 modificada) es que es aplicada a cada una de las etapas que constituyen a la torre de absorción. Es decir, si se resuelven simultáneamente esta ecuación forma una matriz. Dicha matriz tiene la estructura de una matriz tridiagonal idéntica a la que producen las ecuaciones M.E.S.H.

Por lo tanto la ecuación (3.7 modificada) también puede ser representada de manera matricial de la siguiente manera.

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & A_j & B_j & C_j & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{N-1} & B_{N-1} & C_{N-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & B_N & C_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta T_1 \\ \Delta T_2 \\ \Delta T_3 \\ \vdots \\ \Delta T_j \\ \Delta T_{N-1} \\ \Delta T_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ \vdots \\ D_j \\ D_{N-1} \\ D_N \end{bmatrix} \quad (3.7 \text{ matriz})$$

Donde:

$$A_j = \left(\frac{dH_j}{dT_{j-1}} \right) = L_{j-1} \frac{dH_{L,j-1}}{dT_{j-1}} \quad (A)$$

$$B_j = \left(\frac{dH_j}{dT_j} \right) = -(V_j + W_j) \frac{dH_{V,j}}{dT_j} - (L_j + U_j) \frac{dH_{L,j}}{dT_j} \quad (B)$$

$$C_j = \left(\frac{dH_j}{dT_{j+1}} \right) = V_{j+1} \frac{dH_{V,j+1}}{dT_{j+1}} \quad (C)$$

$$D_j = -H_j = -[(L_{j-1})(H_{L,j-1}) + (V_{j+1})(H_{V,j+1}) + (F_j)(H_{F,j}) - (V_j + W_j)(H_{V,j}) - (L_j + U_j)(H_{L,j}) - Q_j] \quad (D)$$

Recordemos que cada uno de estos cálculos debe de hacerse para cada etapa de la columna de absorción.

Si se desea observar el desarrollo completo de la ecuación (3.7 matriz) para cada etapa de la columna de absorción se recomienda revisar el apéndice.

Si se sigue analógicamente al procedimiento que se utilizó para resolver el balance de materia de la ecuación (3.14), se conoce la manera de calcular las constantes A, B, C y D.

Pero lo que se desea conocer de este balance de energía es la temperatura a la que se encuentra cada etapa de la torre de absorción. Por lo tanto, se despejan estas variables de la ecuación (3.7 matriz) y se obtiene una nueva estructura de la matriz siendo esta la siguiente.

$$\begin{bmatrix} \Delta T_1 \\ \Delta T_2 \\ \Delta T_3 \\ \Delta T_4 \\ \Delta T_5 \\ \Delta T_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_4 & B_4 & C_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_5 & B_5 & C_5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_6 & B_6 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ D_4 \\ D_5 \\ D_6 \end{bmatrix} \quad (3.8)$$

Sin embargo, este balance de energía se le necesita hacer una corrección. Para ello se utiliza la siguiente ecuación.

$$\Delta T_j^{B+1} = T_j^B + \tau \Delta T_j^B \quad (3.23)$$

Calculando el factor de atenuación con la ecuación (3.23) queda:

$$\tau = \sum_{j=1}^N (T_j^B - T_j^{B-1})^2 \leq 0.01N$$

Dónde:

N=número de etapas.

$$\tau = \sum_{j=1}^N (T_j^B - T_j^{B-1})^2 \leq 0.06 \quad (3.24)$$

Cuando la ecuación (3.24) sea congruente, el cálculo para la columna de absorción habrá terminado.

No obstante, ya se ha desarrollado el método propuesto por Burningham-Otto y aplicado por Henley. Sin embargo, aún quedan tres variables a desarrollar las cuales son para el cálculo de la constante de equilibrio gas-líquido (K) y las entalpías del líquido y del gas.

Primeramente, se escogió el modelo matemático que se siguió para el cálculo de la constante de equilibrio gas-liquido de cada componente en cada etapa. Si bien ya se ha platicado en el capítulo 2 sobre las distintas maneras en las que se puede calcular esa constante de equilibrio, se escogió el modelo del polinomio de McWilliams. Esto debido a que se realizaron distintos cálculos a distintas temperaturas para el cálculo de la constante de equilibrio (estos cálculos en este trabajo son considerados como aproximaciones y no como valores reales) y se compararon con los valores de los gráficos de Priester (estos valores al ser de gráficos que se obtuvieron de manera experimental son considerados como los valores reales y correctos) y se observó un gran parecido en ambas.

$$\ln(K_i^*) = a_{T1} \left(\frac{1}{T^2}\right) + a_{T2} \left(\frac{1}{T}\right) + a_{T3}(\ln T) + a_{T4}T + a_{T5}T^2 + a_{T6} + a_{p1}[\ln P] + a_{p2} \left(\frac{1}{P^2}\right) + a_{p3} \left(\frac{1}{P}\right) + a_{p4}(\ln P)^2 + a_{p5}(\ln P)^3 + a_{p5}(P) \quad (3.25)$$

Donde:

K^* = constante de equilibrio gas – liquido de McWilliams.

T = temperatura [$^{\circ}R$].

P = presión [PSIA].

a_{Ti}, a_{pi} = constantes obtenidas de literatura.

Una vez establecida la ecuación utilizada para el cálculo de las constantes de equilibrio gas-liquido se analizaron los modelos matemáticos utilizados por Henley para el cálculo de las entalpias de vapor y del líquido.

Henley utilizo un polinomio cuadrático con la siguiente forma.

$$H_v = A + BT + CT^2 \quad (3.26)$$

$$H_l = a + bT + cT^2 \quad (3.27)$$

Donde:

$$H_v = \text{Entalpia de vapor} \left[\frac{\text{Btu}}{\text{lb} - \text{mol}} \right]$$

$$H_l = \text{Entalpia de liquido} \left[\frac{\text{Btu}}{\text{lb} - \text{mol}} \right]$$

T = Temperatura [$^{\circ}F$]

A, B, C, a, b, c = constantes para cada componente.

Tabla 2: Constantes para las propiedades termodinámicas de cada componente utilizadas por Henley.

Especie	A	B	C	a	b	c
c_1 (metano)	1604	9.357	1.782×10^{-3}	0	14.17	-1.782×10^{-3}
c_2 (etano)	4661	15.54	3.341×10^{-3}	0	16.54	3.341×10^{-3}
c_3 (propano)	5070	26.45	0	0	22.78	4.899×10^{-3}
nc_4 (n-butano)	5231	33.90	5.812×10^{-3}	0	31.97	5.812×10^{-3}
nc_5 (n-pentano)	5411	42.09	8.017×10^{-3}	0	39.68	8.017×10^{-3}
Aceite absorbido	8000	74.67	3.556×10^{-2}	0	69.33	3.556×10^{-2}

Recordando que Henley propuso un “aceite absorbedor” de características desconocidas, se realizó la propuesta arbitraria de utilizar como agente absorbedor el n-hexano.

Posteriormente con datos de literatura (YAWS 1999) se encontraron polinomios con los cuales se pueden obtener ecuaciones matemáticas similares a las que utilizó Henley para resolver el mismo problema que se está estudiando.

$$Cp_l = a + bT + cT^2 + dT^3 \quad (3.28)$$

$$Cp_v = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4 \quad (3.29)$$

$$H_l = \int Cp_l dT = \int (A + BT + CT^2 + DT^3) dT \quad (3.30)$$

$$H_v = \int Cp_v dT = \int (A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4) dT \quad (3.31)$$

Donde:

$$Cp_l = \text{calor específico del líquido} \left[\frac{J}{mol K} \right].$$

$$Cp_v = \text{calor específico del vapor} \left[\frac{J}{mol K} \right].$$

$$H_l = \text{entalpia del liquido} \left[\frac{J}{mol} \right].$$

$$H_v = \text{entalpia del vapor} \left[\frac{J}{mol} \right].$$

$$T = \text{temperatura} [K].$$

$A, B, C, a, b, c = \text{constantes para cada componente.}$

Recordando que se propuso al n-hexano como agente absorbedor, se utilizaron las siguientes constantes.

Tabla 3: Constantes para la propiedad termodinámica del calor específico de líquido.

Especie	a	B	c	d
Aceite absorbedor (n-hexano)	78.848	8.8729×10^{-1}	-2.9482×10^{-3}	4.1999×10^{-6}

Tabla 4: Constantes para la propiedad termodinámica del calor específico de vapor.

Especie	A	B	C	D	E
Aceite absorbedor (n-hexano)	25.924	4.1927×10^{-1}	-1.2491×10^{-5}	-1.5916×10^{-7}	5.8784×10^{-11}

Cabe mencionar que dichas constantes son obtenidas de literatura (Yaws 1999) y se realizaron cálculos a diferentes temperaturas de operación con el fin de obtener un polinomio más certero.

Dichos polinomios que se generaron fueron los siguientes de acuerdo a la estructura que siguió Henley.

$$H_l = 16348 + 37.218T + 0.0376T^2 \quad (3.32)$$

$$H_v = 8597.1 + 31.558T + 0.0231T^2 \quad (3.33)$$

Las ecuaciones (3.32) y (3.33) son polinomios de orden 2, pues recordemos que Henley utilizó de igual manera polinomios de grado 2 y fueron generadas después de realizar las conversiones correspondientes para seguir la uniformidad de unidades que utiliza el problema $\left[\frac{Btu}{lb-mol}\right]$.

Una vez que se conocieron las constantes, nuevamente se realizó la tabla de propiedades termodinámicas que se siguió para el desarrollo del problema.

Tabla 5: Constantes para las propiedades termodinámicas de cada componente utilizadas para resolver el problema.

Especie	A	B	C	a	b	c
c_1 (metano)	1604	9.357	1.782×10^{-3}	0	14.17	-1.782×10^{-3}
c_2 (etano)	4661	15.54	3.341×10^{-3}	0	16.54	3.341×10^{-3}
c_3 (propano)	5070	26.45	0	0	22.78	4.899×10^{-3}
nc_4 (n-butano)	5231	33.90	5.812×10^{-3}	0	31.97	5.812×10^{-3}
nc_5 (n-pentano)	5411	42.09	8.017×10^{-3}	0	39.68	8.017×10^{-3}
Aceite absorbido (n-hexano)	8597.1	31.558	2.31×10^{-2}	16348	37.218	3.76×10^{-2}

Resultados

Se realizó el problema con los datos de la tabla 2 y 5. Esto con el fin de observar las composiciones de líquido y gas, así como también los flujos de gas y líquido que se desprenden en cada etapa.

Tabla 6: Resultados obtenidos para el líquido con los datos de la tabla 2 (Henley).

N	L	X_{c1}	X_{c2}	X_{c3}	X_{c4}	X_{c5}	X_{aceite}	X_{total}
1	317.022	0.034	0.23	0.194	0.0022	0.0026	0.535	0.999796
2	332.664	0.028	0.22	0.232	0.0046	0.0025	0.51	1.000124
3	339.434	0.027	0.22	0.249	0.0084	0.0025	0.494	0.998953
4	348.5	0.027	0.22	0.262	0.015	0.0028	0.474	0.999812
5	366.276	0.027	0.23	0.281	0.027	0.0043	0.435	0.999319
6	435.136	0.027	0.24	0.323	0.057	0.013	0.339	1

Donde:

$N = \text{numero de etapa.}$

$L = \text{flujo de liquido desprendido } \left[\frac{\text{lb} - \text{mol}}{h} \right]$

$X_i = \text{composicion de cada componente.}$

Tabla 7: Resultados obtenidos para el gas con los datos de la tabla 2 (Henley).

N	G	Y_{C1}	Y_{C2}	Y_{C3}	Y_{C4}	Y_{C5}	Y_{aceite}	Y_{total}
1	529.864	0.279	0.501	0.188	0.0006	0.000333	0.031	0.999955
2	681.886	0.233	0.497	0.236	0.0014	0.000344	0.032	0.999755
3	697.528	0.226	0.487	0.253	0.0026	0.000345	0.031	0.999934
4	704.798	0.223	0.482	0.261	0.0045	0.000369	0.029	0.999823
5	713.364	0.221	0.479	0.268	0.0077	0.000528	0.024	1.000181
6	731.14	0.216	0.476	0.277	0.014	0.001338	0.016	1.000338

Donde:

$N = \text{numero de etapa.}$

$G = \text{flujo de gas desprendido } \left[\frac{\text{lb} - \text{mol}}{h} \right]$

$Y_i = \text{composicion de cada componente.}$

De igual manera se realizaron las siguientes tablas con el fin de conocer que cantidad de líquido y gas es perteneciente a cada componente de la mezcla.

Tabla 8: Resultados obtenidos para la cantidad de líquido para cada componente con los datos de la tabla 6 (Henley).

N	L_{C1}	L_{C2}	L_{C3}	L_{C4}	L_{C5}	L_{aceite}
1	10.77875	73.549104	61.5023	0.68223	0.83821	169.607
2	9.314592	74.184072	77.178	1.52593	0.84397	169.659
3	9.164718	73.996612	84.5191	2.85498	0.86284	167.68
4	9.4095	76.3215	91.307	5.2275	0.97998	165.189
5	9.889452	82.4121	102.924	9.88945	1.58195	159.33
6	11.74867	104.867776	140.549	24.8028	5.65677	147.511

Donde:

$N = \text{numero de etapa.}$

$L_{Ci} = \text{flujo de liquido desprendido para cada componente} \left[\frac{\text{lb} - \text{mol}}{\text{h}} \right]$

Tabla 9: Resultados obtenidos para la cantidad de gas para cada componente con los datos de la tabla 7 (Henley).

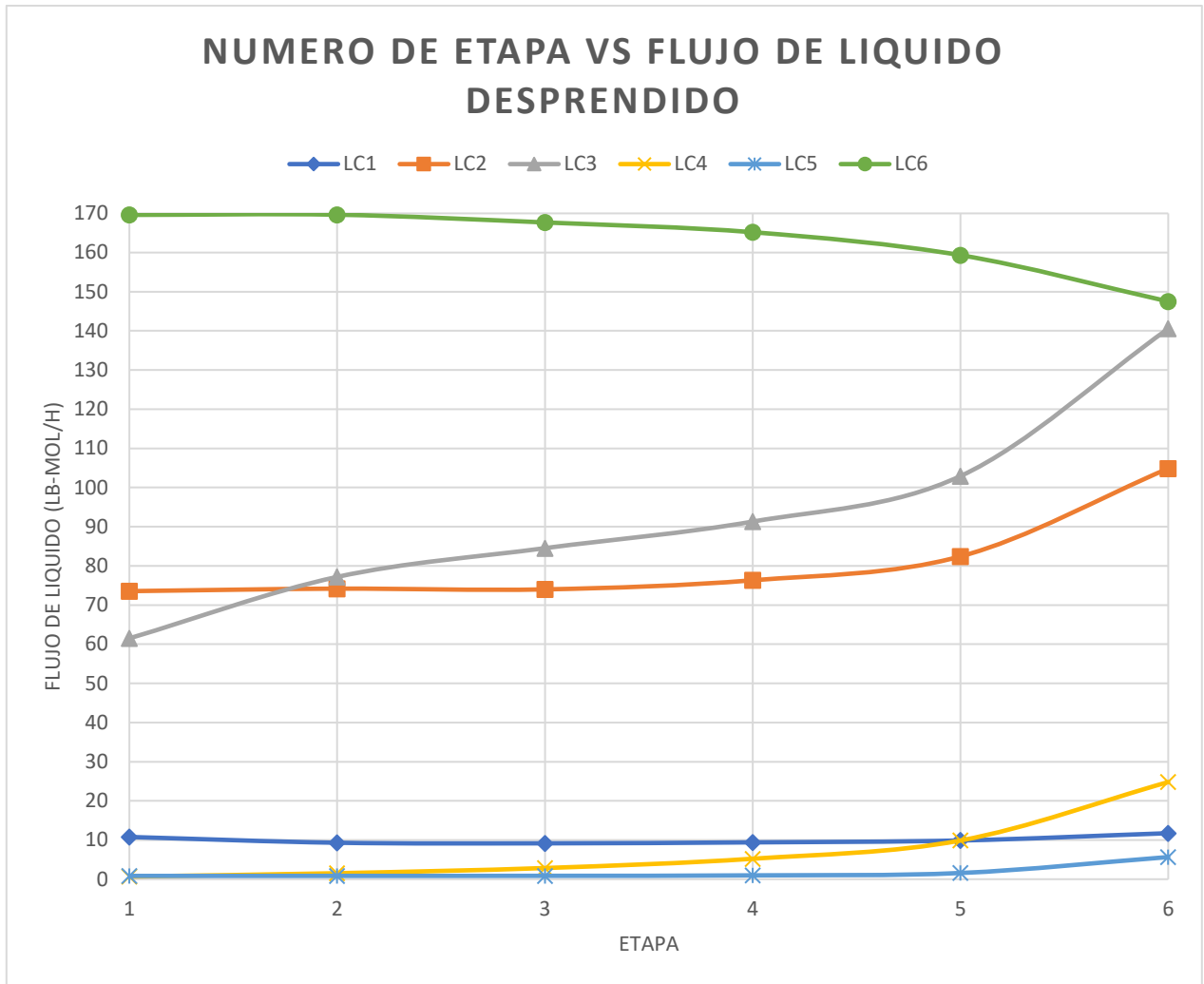
N	G_{C1}	G_{C2}	G_{C3}	G_{C4}	G_{C5}	G_{aceite}
1	147.8321	265.4619	99.6144	0.329734	0.17634	16.426
2	158.8794	338.8973	160.925	0.962141	0.23443	21.82
3	157.6413	339.6961	176.475	1.8059	0.24044	21.623
4	157.17	339.7126	183.952	3.13917	0.26035	20.439
5	157.6534	341.7014	191.182	5.459375	0.37644	17.121
6	157.9262	348.0226	202.526	10.23596	0.97827	11.698

Donde:

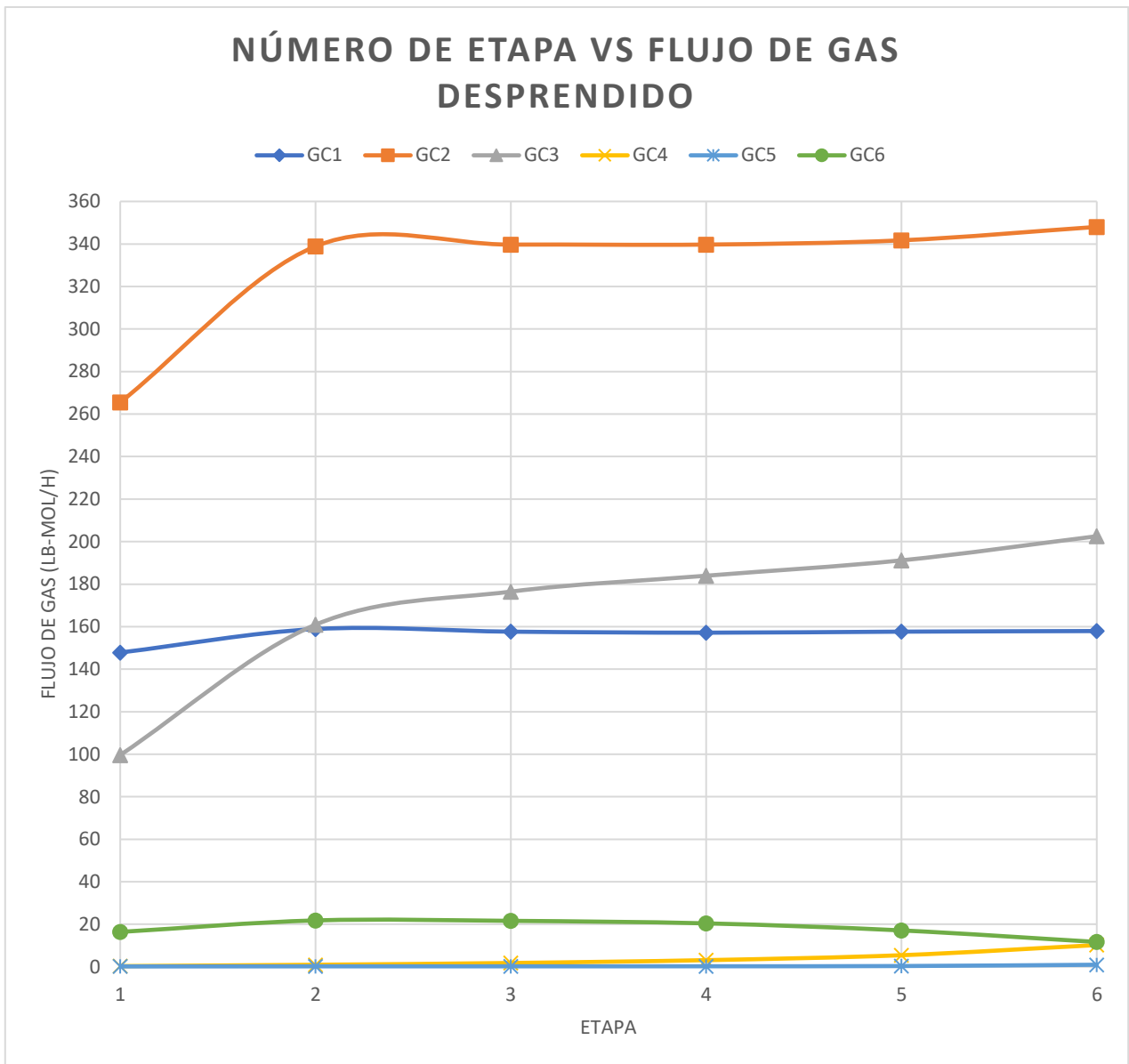
$N = \text{numero de etapa.}$

$G_{Ci} = \text{flujo de liquido desprendido para cada componente} \left[\frac{\text{lb} - \text{mol}}{\text{h}} \right]$

De la misma manera se realizaron graficas donde se observan los resultados de las tablas 8 y 9 respectivamente.



Gráfica 1: Desprendimiento del líquido de cada componente en cada etapa de la columna de absorción utilizando el aceite propuesto por Henley.



Gráfica 2: Desprendimiento del gas de cada componente en cada etapa de la columna de absorción utilizando el aceite propuesto por Henley..

No obstante, estos resultados son los que se obtuvieron de manera teórica de acuerdo a las propuestas y resolución de Henley.

Sin embargo, se realizó el mismo desarrollo del problema, pero utilizando los valores calculados bajo las características del agente absorbedor propuesto (n-hexano). Dichos resultados fueron los siguientes.

Tabla 10: Resultados obtenidos para el líquido con los datos de la tabla 5 (Propuesta del agente absorbedor como n-hexano).

N	L	X_{c1}	X_{c2}	X_{c3}	X_{c4}	X_{c5}	X_{aceite}	X_{total}
1	317.022	0.032	0.199	0.177	0.0056	0.0028	0.555	0.9714
2	332.664	0.026	0.182	0.191	0.0097	0.0027	0.525	0.936421
3	339.434	0.025	0.177	0.194	0.014	0.0028	0.5	0.912753
4	348.5	0.025	0.182	0.203	0.02	0.0031	0.467	0.900118
5	366.276	0.025	0.191	0.225	0.03	0.0047	0.412	0.887714
6	435.136	0.026	0.215	0.276	0.055	0.013	0.313	0.898

Donde:

$N = \text{numero de etapa.}$

$L = \text{flujo de liquido desprendido } \left[\frac{\text{lb} - \text{mol}}{h} \right]$

$X_i = \text{composicion de cada componente.}$

Tabla 11: Resultados obtenidos para el gas con los datos de la tabla 5 (Propuesta del agente absorbedor como n-hexano).

N	G	Y_{c1}	Y_{c2}	Y_{c3}	Y_{c4}	Y_{c5}	Y_{aceite}	Y_{total}
1	531	0.28	0.521	0.227	0.00237	0.0005	0.054	1.084911
2	680	0.233	0.499	0.259	0.0044	0.0006	0.057	1.052984
3	696	0.226	0.484	0.263	0.00636	0.0006	0.054	1.03395
4	703	0.223	0.479	0.264	0.0085	0.0063	0.047	1.027824
5	710	0.221	0.477	0.268	0.011	0.0008	0.035	1.012821
6	730	0.216	0.474	0.277	0.017	0.0017	0.019	1.004679

Donde:

$N = \text{numero de etapa.}$

$G = \text{flujo de gas desprendido } \left[\frac{\text{lb} - \text{mol}}{h} \right]$

$Y_i = \text{composicion de cada componente.}$

Con el fin de observar la cantidad de líquido y gas que son desprendidas de cada componente se construyeron las siguientes tablas.

Tabla 12: Resultados obtenidos para la cantidad de líquido para cada componente con los datos de la tabla 10 (Propuesta del agente absorbedor como n-hexano).

N	L_{C1}	L_{C2}	L_{C3}	L_{C4}	L_{C5}	L_{aceite}
1	10.048	62.486	55.578	1.7584	0.8792	174.27
2	8.58	60.06	63.03	3.201	0.89793	173.25
3	8.425	59.649	65.378	4.718	0.927761	168.5
4	8.6	62.608	69.832	6.88	1.072592	160.648
5	9.1	69.524	81.9	10.92	1.715896	149.968
6	11.284	93.31	119.784	23.87	5.642	135.842

Donde:

$N = \text{numero de etapa.}$

$L_{Ci} = \text{flujo de liquido desprendido para cada componente} \left[\frac{\text{lb} - \text{mol}}{h} \right]$

Tabla 13: Resultados obtenidos para la cantidad de gas para cada componente con los datos de la tabla 7 (Propuesta del agente absorbedor como n-hexano).

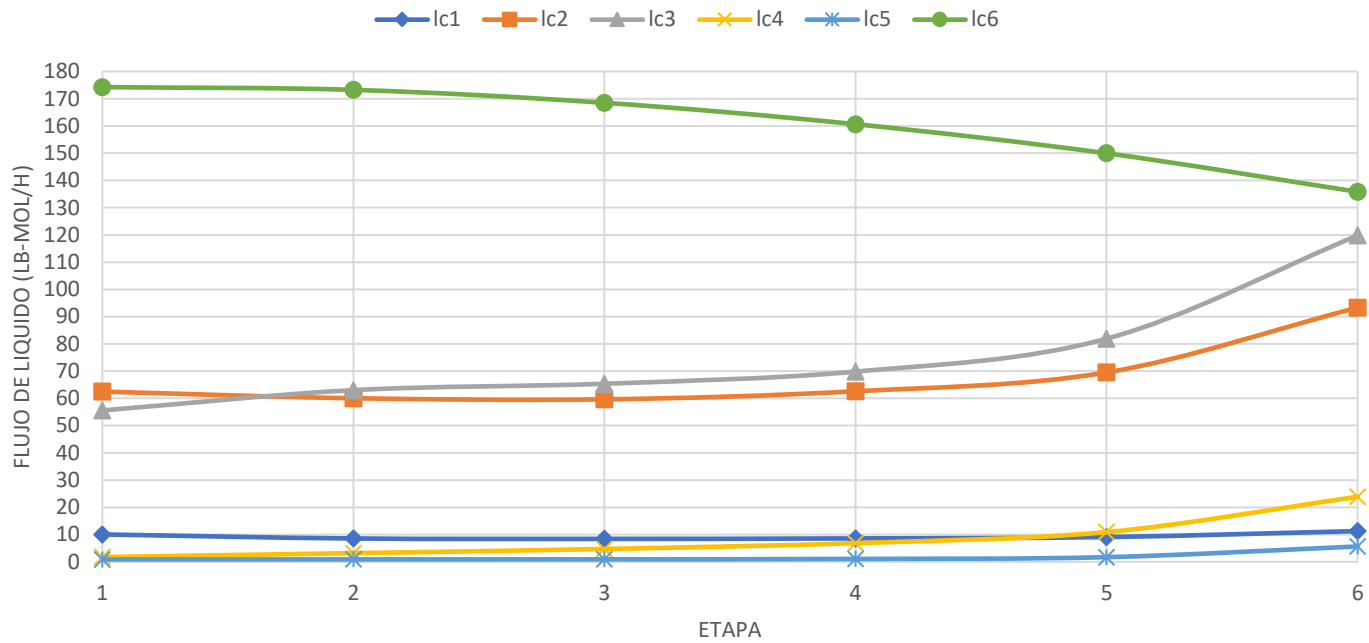
N	G_{C1}	G_{C2}	G_{C3}	G_{C4}	G_{C5}	G_{aceite}
1	148.68	276.651	120.537	1.255815	0.2901384	28.674
2	158.44	339.32	176.12	2.99404	0.395284	38.76
3	157.3	336.864	183.048	4.429344	0.4081344	37.584
4	156.77	336.737	185.592	5.976203	4.4451393	33.041
5	156.91	338.67	190.28	7.81	0.582839	24.85
6	157.68	346.02	202.21	12.41	1.22567	13.87

$N = \text{numero de etapa.}$

$G_{Ci} = \text{flujo de liquido desprendido para cada componente} \left[\frac{\text{lb} - \text{mol}}{h} \right]$

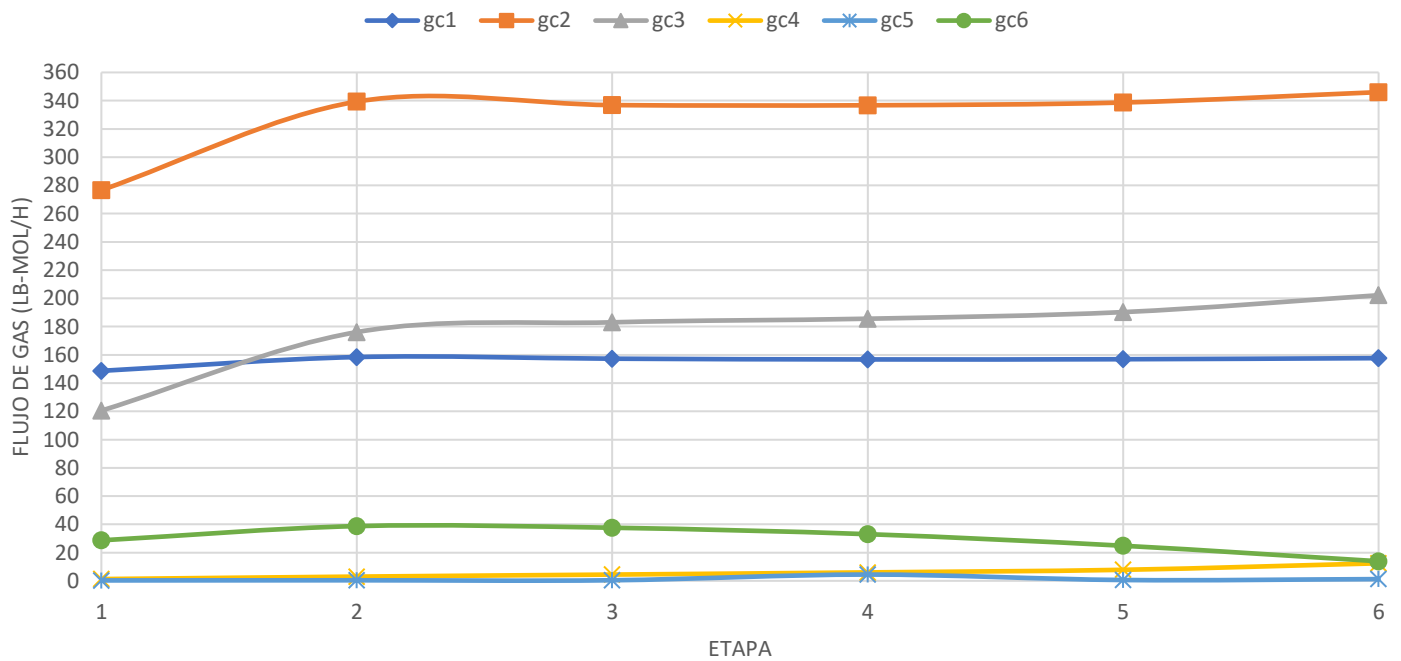
Igualmente se realizaron los gráficos correspondientes a las tablas 12 y 13.

NUMERO DE ETAPA VS FLUJO DE LIQUIDO DESPRENDIDO



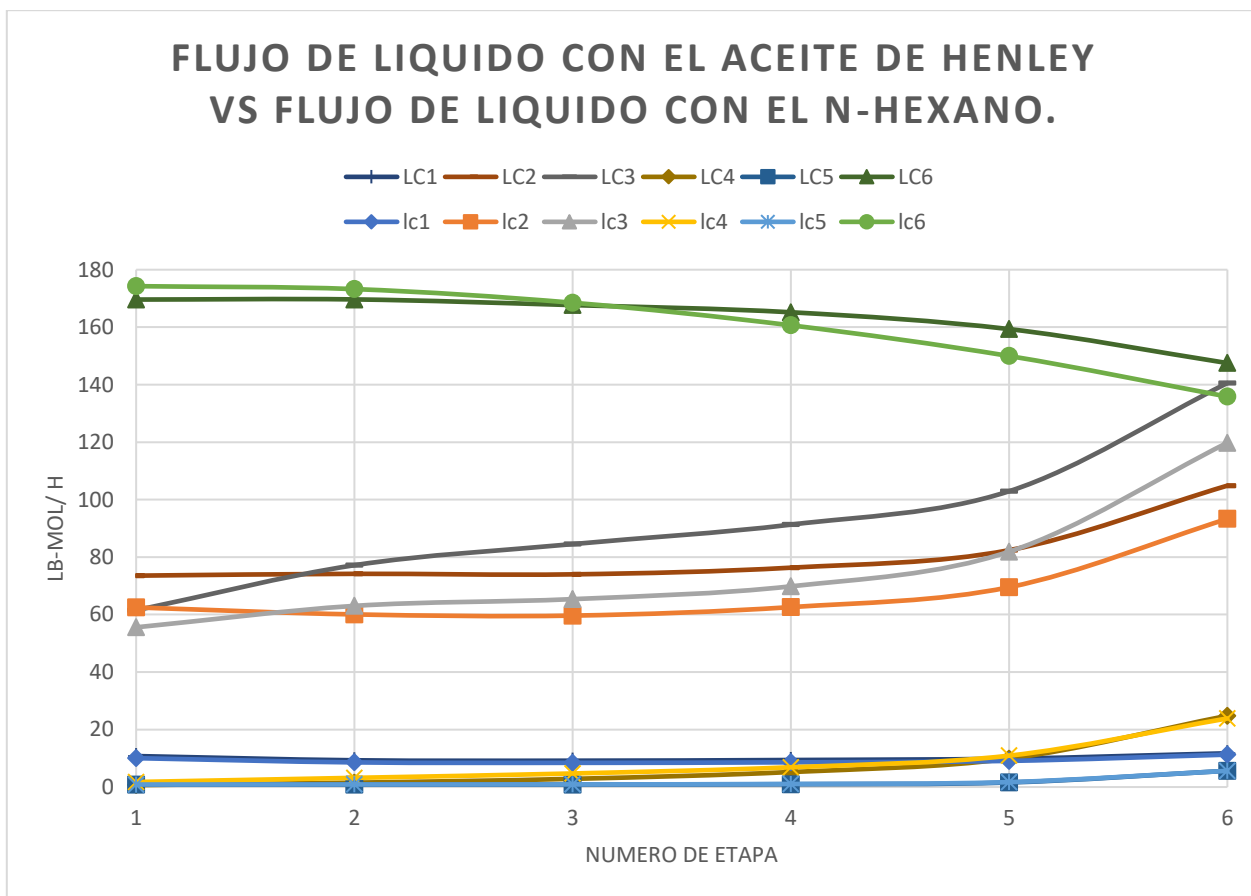
Gráfica 3: Desprendimiento del líquido de cada componente en cada etapa de la columna de absorción utilizando n-hexano como agente absorbedor.

NUMERO DE ETAPA VS FLUJO DE GAS DESPRENDIDO



Gráfica 4: Desprendimiento del gas de cada componente en cada etapa de la columna de absorción utilizando n-hexano como agente absorbedor.

Debido a que en este trabajo se buscó realizar una comparación entre el agente absorbedor propuesto (n-hexano) con el aceite propuesto por Henley, se realizaron las siguientes graficas donde se comparan los resultados obtenidos tanto con el aceite de Henley como los obtenidos con el n-hexano.



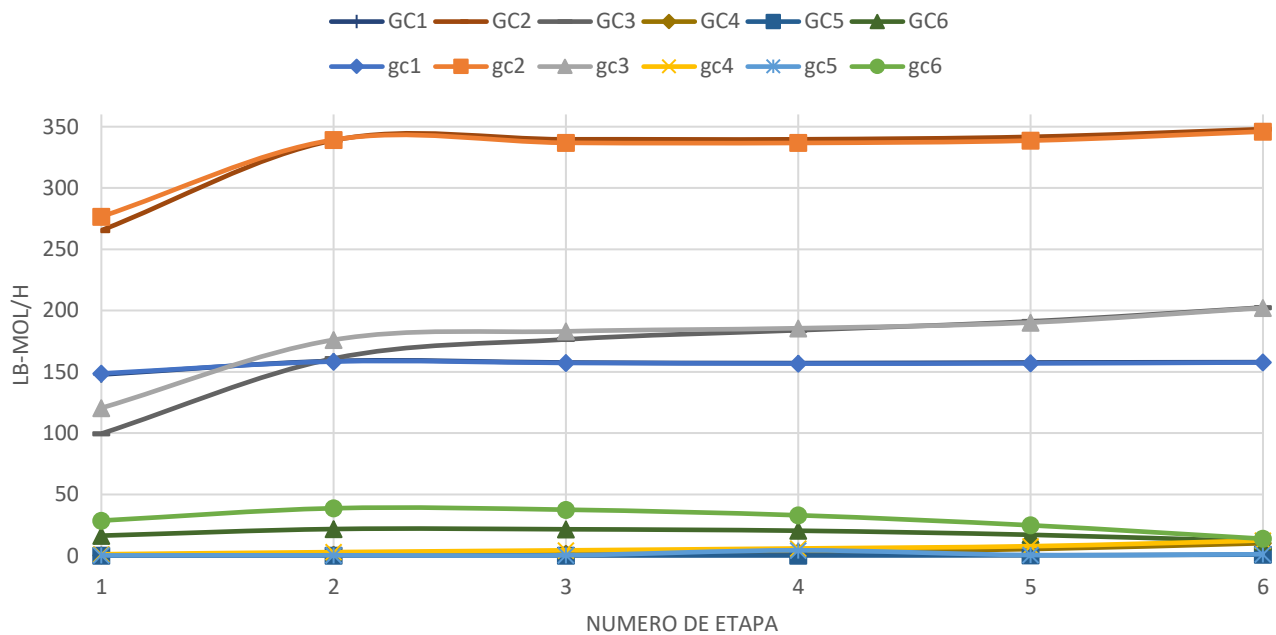
Gráfica 5: Comparación entre el flujo de líquido desprendido de cada componente con el aceite propuesto por Henley y el n-hexano.

Donde:

l_{ci} = flujo de liquido desprendido utilizando n – hexano como agente absorbedor

L_{ci} = flujo de liquido desprendido utilizando el aceite propuesto por Henley.

FLUJO DE GAS CON EL ACEITE DE HENLEY VS FLUJO DE GAS CON EL N-HEXANO.



Gráfica 6: Comparación entre el flujo de gas desprendido de cada componente con el aceite propuesto por Henley y el n-hexano.

Donde:

g_{ci} = flujo de gas desprendido utilizando n – hexano como agente absorbedor

G_{ci} = flujo de gas desprendido utilizando el aceite propuesto por Henley.

Discusión

Como se puede observar en las tablas 6 y 10 los flujos del líquido tienen resultados similares, por lo que se puede empezar a considerar que los agentes absorbentes son el mismo, pero al analizar las composiciones del líquido, específicamente la del propano (x_{C3}), se observó que la variación es alta a comparación de los otros componentes.

Realizando el mismo análisis para las tablas 7 y 11 que son los flujos del gas y composición en el gas, se observa algo muy parecido a lo que sucede en las tablas 6 y 10, es decir, los valores son parecidos, solo que al observar la composición del propano se puede notar que la variación es mínima y a partir de la etapa 5 hay una convergencia.

Es decir, para el análisis del líquido, el propano no sigue el comportamiento que se esperaría como los otros 5 componentes de la mezcla siguieron (metano, etano, n-butano, n-pentano y el agente

absorbedor). Caso contrario a lo que sucede en el gas, ya que los resultados si son semejantes e inclusive al ver la gráfica 6 podemos observar que el propano tiene un comportamiento muy parecido al ser comparado con el aceite de Henley utilizando el n-hexano.

Cabe mencionar que esto se puede visualizar en la comparación de los resultados que obtuvo Henley con los que se obtuvieron utilizando n-hexano (gráfica 5 y 6). Posiblemente esto se deba a que el propano no sea a fin de ser absorbido con el n-hexano en el líquido y por lo tanto exista esa variación de resultados, otro factor puede ser el polinomio utilizado para el cálculo de la entalpia del líquido.

Conclusión.

Se logro llegar a las expresiones matemáticas que permiten simular a la columna de absorción de platos basados en el equilibrio, mediante el desarrollo de las ecuaciones MESH y a su vez presentar por medio de la simulación las comparaciones de las condiciones de equilibrio obtenidas mediante modelos matemáticos propuestos por la bibliografía y las expresiones matemáticas para predecir el equilibrio en este trabajo.

De igual manera el equilibrio puede ser alcanzado de manera experimental pero, no es tan sencillo describirlo mediante modelos matemáticos, pues existen muchas más variables a consideradas como, puede ser el componente de interés, el agente absorbedor, el número de etapas que conforman a la columna de absorción, etc..

Nomenclatura

i = componente.

j = etapa.

w_j = Extracción de un componente "i" de la corriente del gas.

V_j = Salida del gas en la etapa "j".

V_{j+1} = Entrada del gas en la etapa "j".

U_j = Extracción de un componente "i" de la corriente del liquido.

L_j = Salida del liquido en la etapa "j".

L_{j-1} = entrada del liquido en la etapa "j".

w_j = Extracción de un componente "i" de la corriente del gas.

F_j = entrada de alimentación lateral a la etapa "j".

Q_j = Suministro / Desprendimiento de calor en la etapa "j".

$Z_{i,j}$ = Composición del componente "i" en la etapa "j".

$x_{i,j}$ = Composición de salida del componente "i" en la etapa "j" para el liquido.

$y_{i,j}$ = Composición de salida del componente "i" en la etapa "j" para el gas.

$x_{i,j-1}$ = Composición de entrada del componente "i" en la etapa "j" para el liquido.

$y_{i,j+1}$ = Composición de entrada del componente "i" en la etapa "j" para el gas.

$Z_{i,j}$ = Composición del componente "i" en la etapa "j".

Hv_j = Entalpía de vapor en la salida de la etapa "j".

Hv_{j+1} = Entalpía de vapor en la entrada de la etapa "j".

$H_{L,j-1}$ = Entalpía del liquido en la entrada de la etapa "j".

$H_{L,j}$ = Entalpía del liquido en la salida de la etapa "j".

T_j = Temperatura a la que se encuentra la etapa "j".

T_{j-1} = Temperatura a la que entra el liquido en la etapa "j".

T_{j+1} = Temperatura a la que entra el gas en la etapa "j".

P_j = Presión a la que se encuentra la etapa "j".

P_{j-1} = Presión a la que entra el liquido en la etapa "j".

P_{j+1} = Presión a la que entra el gas en la etapa "j".

τ = factor de amortiguación.

P_i = Presión parcial del componente "i".

Pv_i = Presión de vapor del componente "i".

x_i = Fracción molar del componente "i".

N = número de etapas que conforman a la torre de absorción.

T_j^B = Temperatura calculada en la matriz tridiagonal de cada etapa.

T_j^{B-1} = Temperatura propuesta en cada etapa.

P_{ci} = Presión crítica del componente.

P_t = Presión total del sistema.

T_{ci} = Temperatura crítica del componente.

T = Temperatura del sistema.

ω = factor acentrico.

P_k = Presión de convergencia.

M_w = masa molecular promedio de la mezcla.

γ = densidad relativa (densidad del vapor de agua).

T = temperatura.

a_i = constante para el componente "i".

K^* = Constante de equilibrio de McWilliams.

T = Temperatura.

P = Presión a la que opera el sistema.

a_{Ti} = Constante para el componente "i".

a_{pi} = Constante para el componente "i".

K_i = Constante de equilibrio de Torp.

β = factor de corrección.

T_{bmix} = Temperatura de ebullición de la mezcla.

T_{cmix} = Temperatura crítica de la mezcla.

H_v = Entalpia de vapor.

H_l = Entalpia de liquido.

A, B, C, a, b, c = constantes para cada componente.

N = numero de etapa.

L = flujo de liquido desprendido.

X_i = composicion de cada componente.

G = flujo de gas desprendido.

Y_i = composicion de cada componente.

l_{ci} = flujo de liquido desprendido utilizando n – hexano como agente absorbedor

L_{ci} = flujo de liquido desprendido utilizando el aceite propuesto por Henley.

g_{ci} = flujo de gas desprendido utilizando n – hexano como agente absorbedor

G_{ci} = flujo de gas desprendido utilizando el aceite propuesto por Henley.

Nomenclatura de figuras e imágenes.

Figura 1: Mecanismo de absorción en cada etapa de la columna de absorción.

Figura 2: Representación de una etapa "j" de una columna de absorción multicomponente.

Figura 3: Representación de la figura 2 en una columna de absorción multicomponentes.

Figura 4: Matriz tridiagonal.

Figura 5: Representación del ejemplo 12.8 del libro Seader J.D y Henley, E.J 2000. Columna de absorción con 6 componentes y 6 etapas teóricas.

Imagen 1: Grafico de Priester para diferentes compuestos a diferentes presiones y temperaturas.

Imagen 2: Algoritmo de Burnigham -Otto utilizado por Henley.

Nomenclatura de Tablas.

Tabla 1. Datos obtenidos por el libro Yaws 1999 para el n-hexano.

Tabla 2: Constantes para las propiedades termodinámicas de cada componente utilizadas por Henley.

Tabla 3: Constantes para la propiedad termodinámica del calor específico de líquido.

Tabla 4: Constantes para la propiedad termodinámica del calor específico de vapor.

Tabla 5: Constantes para las propiedades termodinámicas de cada componente utilizadas para resolver el problema.

Tabla 6: Resultados obtenidos para el líquido con los datos de la tabla 2 (Henley).

Tabla 7: Resultados obtenidos para el gas con los datos de la tabla 2 (Henley).

Tabla 8: Resultados obtenidos para la cantidad de líquido para cada componente con los datos de la tabla 6 (Henley).

Tabla 9: Resultados obtenidos para la cantidad de gas para cada componente con los datos de la tabla 7 (Henley).

Tabla 10: Resultados obtenidos para el líquido con los datos de la tabla 5 (Propuesta del agente absorbedor como n-hexano).

Tabla 11: Resultados obtenidos para el gas con los datos de la tabla 5 (Propuesta del agente absorbedor como n-hexano).

Tabla 12: Resultados obtenidos para la cantidad de líquido para cada componente con los datos de la tabla 10 (Propuesta del agente absorbedor como n-hexano).

Tabla 13: Resultados obtenidos para la cantidad de gas para cada componente con los datos de la tabla 7 (Propuesta del agente absorbedor como n-hexano).

Nomenclatura de gráficas.

Gráfica 1: Desprendimiento del líquido de cada componente en cada etapa de la columna de absorción utilizando el aceite propuesto por Henley.

Gráfica 2: Desprendimiento del gas de cada componente en cada etapa de la columna de absorción utilizando el aceite propuesto por Henley.

Gráfica 3: Desprendimiento del líquido de cada componente en cada etapa de la columna de absorción utilizando n-hexano como agente absorbedor.

Gráfica 4: Desprendimiento del gas de cada componente en cada etapa de la columna de absorción utilizando n-hexano como agente absorbedor.

Gráfica 5: Comparación entre el flujo de líquido desprendido de cada componente con el aceite propuesto por Henley y el n-hexano.

Gráfica 6: Comparación entre el flujo de gas desprendido de cada componente con el aceite propuesto por Henley y el n-hexano

Bibliografía.

1. *Diagramas DE depriester.Pdf.* (s/f). Idoc.Pub. Recuperado el 16 de octubre de 2023
<https://idoc.pub/documents/diagramas-de-depriesterpdf-6ngeqd3v52lv>
2. Multicomponente, D. (s/f). *IV. Revisión Bibliográfica.* Udlap.mx. Recuperado el 16 de octubre de 2023,
http://catarina.udlap.mx/u_dl_a/tales/documentos/lpro/figueroa_r_jl/capitulo4.pdf
3. Seader, J. D., & Henley, E. J. (2006). *Separation Process Principles* (2a ed.). John Wiley & Sons.
4. Wikipedia contributors. (s/f). *Matriz tridiagonal.* Wikipedia, The Free Encyclopedia.
https://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Matriz_tridiagonal&oldid=152890759
5. (S/f-a). Stealthskater.com. Recuperado el 16 de octubre de 2023
<https://www.stealthskater.com/Personal/KFactors.pdf>
6. (S/f-b). Rua.ua.es. Recuperado el 16 de octubre de 2023
<https://rua.ua.es/dspace/bitstream/10045/1890/1/AOSTEMA2.pdf>
7. (S/f). Researchgate.net. Recuperado el 16 de octubre de 2023
https://www.researchgate.net/figure/Figura-25-Algoritmo-del-metodo-SR-de-Burningham-Otto-Seader-et-al-2011_fig6_323254600
8. *Chemical-Properties-Handbook-Carl-L-Yaws-McGraw-Hill-1999.Pdf.* (s/f). Scribd. Recuperado el 16 de octubre de 2023
<https://es.scribd.com/document/371108711/281124192-Chemical-Properties-Handbook-Carl-L-Yaws-McGraw-Hill-1999-pdf>

Apéndice.

Desarrollo para llegar a la ecuación (2.0) utilizando la ley de Raoult y Dalton

$$P_i = P v_i x_i \quad \text{Ley de Raoult}$$

$$P_i = y_i P \quad \text{Ley de Dalton}$$

Al combinar ambos se tiene:

$$P v_i x_i = y_i P$$

Agrupando de un lado las composiciones y del otro las presiones se obtienen:

$$\frac{y_i}{x_i} = \frac{P v_i}{P} = K \quad (2.0)$$

Realizando un balance de materia para la figura 1:

$$\textit{Entrada} - \textit{Salidas} + \textit{Generaci\`on} - \textit{Consumo} = \textit{Acumulaci\`on}$$

Consideraciones:

- No hay reacción química.
- Estado estacionario.
- No hay consumo.

$$\textit{Entrada} - \textit{Salidas} + \textit{Generaci\`on} - \textit{Consumo} = \textit{Acumulaci\`on} \quad (1)$$

La Ec.1 se reduce a:

$$\textit{Entrada} - \textit{Salidas} = 0 \quad (2)$$

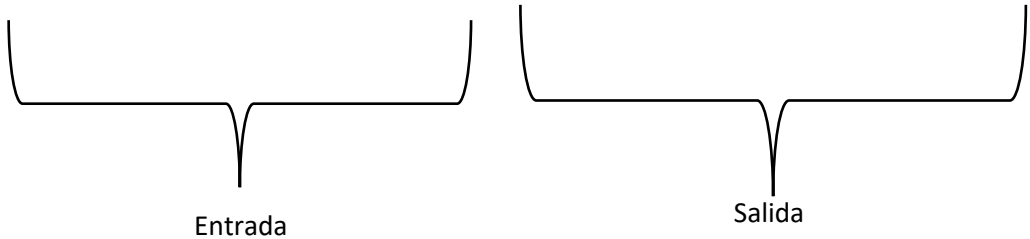
Reacomodando la Ec.2:

$$\textit{Entrada} = \textit{Salidas} \quad (3)$$

Aplicando la Ec.3 con los elementos de la Fig.1 se obtiene:

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

Realizando un balance de materia por componente, la Ec.4 queda:

$$(L_{j-1})(x_{i,j-1}) + (V_{j+1})(y_{i,j+1}) + (F_j)(Z_{i,j}) = (V_j)(y_{i,j}) + (W_j)(y_{i,j}) + (L_j)(x_{i,j}) + (U_j)(x_{i,j}) \quad (5)$$


The diagram shows the equation (5) with two large curly brackets underneath. The first bracket is under the left side of the equation, labeled 'Entrada'. The second bracket is under the right side of the equation, labeled 'Salida'.

Agrupando términos la Ec.5 queda:

$$(L_{j-1})(x_{i,j-1}) + (V_{j+1})(y_{i,j+1}) + (F_j)(Z_{i,j}) = (V_j + W_j)(y_{i,j}) + (L_j + U_j)(x_{i,j}) \quad (6)$$

Aplicando la estructura de la Ec.2 a la Ec.6 se obtiene:

$$(L_{j-1})(x_{i,j-1}) + (V_{j+1})(y_{i,j+1}) + (F_j)(Z_{i,j}) - (V_j + W_j)(y_{i,j}) - (L_j + U_j)(x_{i,j}) = 0 \quad (3.2)$$

Si se desea conocer la ecuación que describe al balance de energía, es muy parecido al balance de materia. Entonces retomando la forma de la Ec.(6) utilizando ahora las variables que se involucran para el balance de energía, se obtiene:

$$(L_{j-1})(H_{L,j-1}) + (V_{j+1})(H_{v,j+1}) + (F_j)(H_{F,j}) - (V_j + W_j)(H_{v,j}) - (L_j + U_j)(H_{L,j}) - Q_j = 0 \quad (3.7)$$

Deducción de la ecuación (3.8)

Aplicando a la Ec.(3.2) la suma desde la etapa 1 hasta la etapa “j” y del componente “i” al componente “c” se obtiene:

$$\left(\sum_{j=1}^j L_{j-1}\right)\left(\sum_{i=1}^c x_{i,j-1}\right) + \left(\sum_{j=1}^j V_{j+1}\right)\left(\sum_{i=1}^c y_{i,j+1}\right) + \left(\sum_{j=1}^j F_j\right)\left(\sum_{i=1}^c Z_{i,j}\right) - \left[\sum_{j=1}^j (V_j + W_j)\right]\left(\sum_{i=1}^c y_{i,j}\right) - \left[\sum_{j=1}^j (L_j + U_j)\right]\left(\sum_{i=1}^c x_{i,j}\right) = 0 \quad (7)$$

Si a la Ec (7) se le aplica las Ec. (3.4) (3.5) y (3.6) queda de la siguiente manera:

$$\left(\sum_{j=1}^j L_{j-1}\right)(1) + \left(\sum_{j=1}^j V_{j+1}\right)(1) + \left(\sum_{j=1}^j F_j\right)(1) - \left[\sum_{j=1}^j (V_j + W_j)\right](1) - \left[\sum_{j=1}^j (L_j + U_j)\right](1) = 0 \quad (7.1)$$

Por lo tanto, la ecuación. (7.1) también puede representarse de la siguiente manera:

$$\sum_{j=1}^j L_{j-1} + \sum_{j=1}^j V_{j+1} + \sum_{j=1}^j F_j - \sum_{j=1}^j (V_j + W_j) - \sum_{j=1}^j (L_j + U_j) = 0 \quad (8)$$

Desglose de la ecuación. (3.8) para la obtención de la ecuación. (3.9 o auxiliar)

Se toma como ecuación general la ecuación. (8)

$$\sum_{j=1}^j L_{j-1} + \sum_{j=1}^j V_{j+1} + \sum_{j=1}^j F_j - \sum_{j=1}^j (V_j + W_j) - \sum_{j=1}^j (L_j + U_j) = 0 \quad (8)$$

Recordemos que la torre de absorción no consta de 1 etapa, sino de “j” etapas. Por lo que al desarrollar la ecuación. (8) para “j” etapas se tiene lo siguiente:

- Para la etapa $j=1$

$$L_{1-1} + V_{1+1} + F_1 - (V_1 + W_1) - (L_1 + U_1) = 0$$

Vale 0 ya que no existe la etapa 0

$$L_0 + V_2 + F_1 - V_1 - W_1 - L_1 - U_1 = 0$$

$$V_2 + F_1 - V_1 - W_1 - L_1 - U_1 = 0$$

Despejando a L_1 :

$$L_1 = V_2 + F_1 - V_1 - W_1 - U_1 \quad (a)$$

- Para la etapa $j=2$

$$L_{2-1} + V_{2+1} + F_2 - (V_2 + W_2) - (L_2 + U_2) = 0$$

$$L_1 + V_3 + F_2 - V_2 - W_2 - L_2 - U_2 = 0$$

Sustituir L_1

$$\underbrace{(V_2 + F_1 - V_1 - W_1 - U_1)}_{L_1} + V_3 + F_2 - V_2 - W_2 - L_2 - U_2 = 0$$

$$V_2 + F_1 - V_1 - W_1 - U_1 + V_3 + F_2 - V_2 - W_2 - L_2 - U_2 = 0$$

Agrupando términos iguales:

$$F_1 + F_2 - V_1 + V_3 - W_1 - W_2 - U_1 - U_2 - L_2 = 0$$

Despejando a L_2 :

$$L_2 = F_1 + F_2 - V_1 + V_3 - W_1 - W_2 - U_1 - U_2 \quad (b)$$

- Para el plato $j=3$

$$L_{3-1} + V_{3+1} + F_3 - (V_3 + W_3) - (L_3 + U_3) = 0$$

$$L_2 + V_4 + F_3 - V_3 + W_3 - L_3 - U_3 = 0$$

Sustituir L_2 :

$$\underbrace{(F_1 + F_2 - V_1 + V_3 - W_1 - W_2 - U_1 - U_2)}_{L_2} + V_4 + F_3 - V_3 + W_3 - L_3 - U_3 = 0$$

$$F_1 + F_2 - V_1 + V_3 - W_1 - W_2 - U_1 - U_2 + V_4 + F_3 - V_3 + W_3 - L_3 - U_3 = 0$$

Agrupando términos queda:

$$F_1 + F_2 + F_3 - V_1 + V_4 - W_1 - W_2 - W_3 - U_1 - U_2 - U_3 - L_3 = 0$$

Despejando a L_3 :

$$L_3 = F_1 + F_2 + F_3 - V_1 + V_4 - W_1 - W_2 - W_3 - U_1 - U_2 - U_3 \quad (c)$$

Como se ha demostrado cada que se le asigna un valor a j y se despeja a L_j , siempre quedan las siguientes variables $V_{j+1}, \sum_{j=1}^j F_j, \sum_{j=1}^j W_j, \sum_{j=1}^j U_j$ y $(-V_1)$, por lo tanto, se puede concluir una ecuación que generalice todas estas variables siendo esta:

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \quad (3.9 \text{ o auxiliar})$$

Si a la ecuación (2.20 o auxiliar) se le hace la modificación para L_{j-1} se tiene lo siguiente

$$L_{j-1} = V_{j+1-1} + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1$$

Recordemos que las variables $(F_j - W_j - U_j) - V_1$ no cambian con este arreglo, por lo que se llega a la ecuación (2.21).

$$L_{j-1} = V_j + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \quad (2.21)$$

Para llegar a la ecuación (2.22) es necesario sustituir con ecuaciones que ya se han demostrado como lo son las ecuaciones (2.20 o auxiliar) y (2.21).

Partiremos de la ecuación (2.13)

$$(L_{j-1})(x_{i,j-1}) + (V_{j+1})(y_{i,j+1}) + (F_j)(Z_{i,j}) - (V_j + W_j)(y_{i,j}) - (L_j + U_j)(x_{i,j}) = 0 \quad (2.13)$$

En la ecuación (2.13) tenemos variables que ahora están descritas por una ecuación. Entonces al hacer la sustitución de dichas variables, obtenemos:

$$\begin{aligned} & \overbrace{\left[V_j + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right]}^{L_{j-1}} (x_{i,j-1}) + (V_{j+1})(y_{i,j+1}) + (F_j)(Z_{i,j}) - (V_j + W_j)(y_{i,j}) \\ & - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] + U_j \right\} (x_{i,j}) = 0 \\ & \underbrace{\hspace{15em}}_{L_j} \end{aligned}$$

De igual manera podemos utilizar otras ecuaciones que describan variables que se encuentran en la ecuación anterior como lo es la ecuación. (3.3)

$$y_{i,j} = (K_{i,j})(x_{i,j}) \quad (3.3)$$

$$\left[V_j + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] (x_{i,j-1}) + (V_{j+1}) \overbrace{[(K_{i,j+1})(x_{i,j+1})]}^{y_{i,j+1}} + (F_j)(Z_{i,j}) - (V_j + W_j) \overbrace{[(K_{i,j})(x_{i,j})]}^{y_{i,j}} - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] + U_j \right\} (x_{i,j}) = 0 \quad (2.22)$$

Para obtener la Ec. (2.23) a partir de la Ec. (2.22) primeramente se mantuvo en la parte izquierda la ecuación todos los términos que involucraran la composición del líquido (x).

$$\left[V_j + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] (x_{i,j-1}) + (V_{j+1})[(K_{i,j+1})(x_{i,j+1})] - (V_j + W_j)[(K_{i,j})(x_{i,j})] - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] + U_j \right\} (x_{i,j}) = -(F_j)(Z_{i,j})$$

Desarrollando algunos productos se obtiene:

$$\left[V_j + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] (x_{i,j-1}) + (V_{j+1} K_{i,j+1} x_{i,j+1}) - V_j K_{i,j} x_{i,j} - W_j K_{i,j} x_{i,j} - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] + U_j \right\} (x_{i,j}) = -(F_j)(Z_{i,j})$$

Se observa que se puede factorizar la composición (x) y constantes de equilibrio ($K_{i,j}$) quedando:

$$\left[V_j + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] (x_{i,j-1}) - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] + U_j + (V_j + W_j) K_{i,j} \right\} (x_{i,j}) + (V_{j+1} K_{i,j+1}) x_{i,j+1} = -(F_j)(Z_{i,j}) \quad (2.23)$$

Cálculo de las constantes involucrada en la ecuación (3.14).

Para su cálculo se utilizaron las siguientes ecuaciones:

$$A_j = \left[V_j + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right]$$

$$B_j = - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] + U_j + (V_j + W_j)K_{i,j} \right\}$$

$$C_j = (V_{j+1}K_{i,j+1})$$

$$D_j = -(F_j)(Z_{i,j})$$

Dichas ecuaciones tuvieron modificaciones, puesto a que en la figura 2 nos da consideraciones a tomar en cuenta.

Consideraciones:

- No hay extracciones en ninguna etapa ($U_j = 0$ y $W_j = 0$)
- No hay flujos de entradas externas en ninguna etapa ($F_j = 0$) solo en la etapa 1.
- No hay calor externo a la torre de absorción ($Q=0$)

Una vez aclaradas estas consideraciones, se realizan los arreglos pertinentes a cada ecuación.

Aplicando las consideraciones para la etapa $j=1$ se obtiene:

$$A_j = \left[V_j + \underbrace{\sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j)}_{=0} - V_1 \right]$$

Valen 0 de acuerdo a las consideraciones de la figura 2.

Entonces:

$$A_{i,j} = [V_j - V_1]$$

Valen 0 de acuerdo a las consideraciones de la figura 2

$$B_j = - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] + U_j + (V_j + W_j)K_{i,j} \right\}$$

Por lo tanto:

$$B_{i,j} = - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j F_j - V_1 \right] + V_j K_{i,j} \right\}$$

$$C_j = (V_{j+1}K_{i,j+1})$$

$$D_j = -(F_j)(Z_{i,j})$$

Aplicando las nuevas formas se obtiene para los componentes en el plato 1

$$A_{1,1} = [V_1 - V_1] \quad B_{1,1} = -[V_2 + F_1 - V_1 + V_1K_{1,1}] \quad C_{1,1} = V_2K_{1,2} \quad D_{1,1} = -F_1Z_{1,1}$$

$$A_{2,1} = [V_1 - V_1] \quad B_{2,1} = -[V_2 + F_1 - V_1 + V_1K_{2,1}] \quad C_{2,1} = V_2K_{2,2} \quad D_{2,1} = -F_1Z_{2,1}$$

$$A_{3,1} = [V_1 - V_1] \quad B_{3,1} = -[V_2 + F_1 - V_1 + V_1K_{3,1}] \quad C_{3,1} = V_2K_{3,2} \quad D_{3,1} = -F_1Z_{3,1}$$

$$A_{4,1} = [V_1 - V_1] \quad B_{4,1} = -[V_2 + F_1 - V_1 + V_1K_{4,1}] \quad C_{4,1} = V_2K_{4,2} \quad D_{4,1} = -F_1Z_{4,1}$$

$$A_{5,1} = [V_1 - V_1] \quad B_{5,1} = -[V_2 + F_1 - V_1 + V_1K_{5,1}] \quad C_{5,1} = V_2K_{5,2} \quad D_{5,1} = -F_1Z_{5,1}$$

$$A_{6,1} = [V_1 - V_1] \quad B_{6,1} = -[V_2 + F_1 - V_1 + V_1K_{6,1}] \quad C_{6,1} = V_2K_{6,2} \quad D_{6,1} = -F_1Z_{6,1}$$

Para la etapa $j=2$

- Aplicando las consideraciones se obtiene:

$$A_j = \left[V_j + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right]$$

$$B_j = - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] + U_j + (V_j + W_j)K_{i,j} \right\}$$

Logrando entonces:

$$A \left[V_1 + \sum_{m=1}^{j-1} F_m - V_1 \right]_{i,j}$$

$$B_{i,j} = - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j F_j - V_1 \right] + V_j K_{i,j} \right\}$$

$$C_{i,j} = (V_{j+1} K_{i,j+1})$$

$$D_{i,j} = -(F_j)(Z_{i,j})$$

Entonces para la etapa 2 quedan

$$A_{1,2} = [V_2 + F_1 - V_1] \quad B_{1,2} = -[V_3 + F_1 + F_2 - V_1 + V_2 K_{1,2}] \quad C_{1,2} = V_{1,3} K_{1,3} \quad D_{1,2} = -F_2 Z_{1,2}$$

$$A_{2,2} = [V_2 + F_1 - V_1] \quad B_{2,2} = -[V_3 + F_1 + F_2 - V_1 + V_2 K_{2,2}] \quad C_{2,2} = V_{2,3} K_{2,3} \quad D_{2,2} = -F_2 Z_{2,2}$$

$$A_{3,2} = [V_2 + F_1 - V_1] \quad B_{3,2} = -[V_3 + F_1 + F_2 - V_1 + V_2 K_{3,2}] \quad C_{3,2} = V_3 K_{3,3} \quad D_{3,2} = -F_2 Z_{3,2}$$

$$A_{4,2} = [V_2 + F_1 - V_1] \quad B_{4,2} = -[V_3 + F_1 + F_2 - V_1 + V_2 K_{4,2}] \quad C_{4,2} = V_3 K_{4,3} \quad D_{4,2} = -F_2 Z_{4,2}$$

$$A_{5,2} = [V_2 + F_1 - V_1] \quad B_{5,2} = -[V_3 + F_1 + F_2 - V_1 + V_2 K_{5,2}] \quad C_{5,2} = V_3 K_{5,3} \quad D_{5,2} = -F_2 Z_{5,2}$$

$$A_{6,2} = [V_2 + F_1 - V_1] \quad B_{6,2} = -[V_3 + F_1 + F_2 - V_1 + V_2 K_{6,2}] \quad C_{6,2} = V_3 K_{6,3} \quad D_{6,2} = -F_2 Z_{6,2}$$

Para la etapa $j=3$

- Aplicando las consideraciones se obtiene:

$$A_j = \left[V_j + \sum_{j=1}^j (F_j - \cancel{W_j} - \cancel{U_j}) - V_1 \right]$$

$$B_j = - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j (F_j - \cancel{W_j} - \cancel{U_j}) - V_1 \right] + \cancel{U_j} + (V_j + \cancel{W_j}) K_{i,j} \right\}$$

Entonces:

$$A \left[V_1 + \sum_{m=1}^{j-1} F_m - V_1 \right]_{i,j}$$

$$B_{i,j} = - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j F_j - V_1 \right] + V_j K_{i,j} \right\}$$

$$C_{i,j} = (V_{j+1} K_{i,j+1})$$

$$D_{i,j} = -(F_j)(Z_{i,j})$$

Por lo tanto, la etapa $j=3$ queda:

$$\begin{aligned}
A_{1,3} &= [V_3 + F_1 + F_2 - V_1] & B_{1,3} &= -[V_4 + F_1 + F_2 + F_3 - V_1 + V_3K_{1,3}] & C_{1,3} &= V_4K_{1,4} \\
A_{2,3} &= [V_3 + F_1 + F_2 - V_1] & B_{2,3} &= -[V_4 + F_1 + F_2 + F_3 - V_1 + V_3K_{2,3}] & C_{2,3} &= V_4K_{2,4} \\
A_{3,3} &= [V_3 + F_1 + F_2 - V_1] & B_{3,3} &= -[V_4 + F_1 + F_2 + F_3 - V_1 + V_3K_{3,3}] & C_{3,3} &= V_4K_{3,4} \\
A_{4,3} &= [V_3 + F_1 + F_2 - V_1] & B_{4,3} &= -[V_4 + F_1 + F_2 + F_3 - V_1 + V_3K_{4,3}] & C_{4,3} &= V_4K_{4,4} \\
A_{5,3} &= [V_3 + F_1 + F_2 - V_1] & B_{5,3} &= -[V_4 + F_1 + F_2 + F_3 - V_1 + V_3K_{5,3}] & C_{5,3} &= V_4K_{5,4} \\
A_{6,3} &= [V_3 + F_1 + F_2 - V_1] & B_{6,3} &= -[V_4 + F_1 + F_2 + F_3 - V_1 + V_3K_{6,3}] & C_{6,3} &= V_4K_{6,4}
\end{aligned}$$

$$D_{1,3} = -F_3Z_{1,3}$$

$$D_{2,3} = -F_3Z_{2,3}$$

$$D_{3,3} = -F_3Z_{3,3}$$

$$D_{4,3} = -F_3Z_{4,3}$$

$$D_{5,3} = -F_3Z_{5,3}$$

$$D_{6,3} = -F_3Z_{6,3}$$

Para la etapa $j=4$

- Aplicando las consideraciones se obtiene:

$$A_j = \left[V_j + \sum_{j=1}^j (F_j - \cancel{W_j} - \cancel{U_j}) - V_1 \right]$$

$$B_j = - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j (F_j - \cancel{W_j} - \cancel{U_j}) - V_1 \right] + \cancel{U_j} + (V_j + \cancel{W_j})K_{i,j} \right\}$$

Se obtiene:

$$A \left[V_1 + \sum_{m=1}^{j-1} F_m - V_1 \right]_{i,j}$$

$$B_{i,j} = - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j F_j - V_1 \right] + V_j K_{i,j} \right\}$$

$$C_{i,j} = (V_{j+1} K_{i,j+1})$$

$$D_{i,j} = -(F_j)(Z_{i,j})$$

Por lo tanto, la etapa $j=4$ queda:

$$\begin{array}{ll} A_{1,4} = [V_4 + F_1 + F_2 + F_3 - V_1] & B_{1,4} = -[V_5 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 - V_1 + V_4 K_{1,4}] \\ A_{2,4} = [V_4 + F_1 + F_2 + F_3 - V_1] & B_{2,4} = -[V_5 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 - V_1 + V_4 K_{2,4}] \\ A_{3,4} = [V_4 + F_1 + F_2 + F_3 - V_1] & B_{3,4} = -[V_5 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 - V_1 + V_4 K_{3,4}] \\ A_{4,4} = [V_4 + F_1 + F_2 + F_3 - V_1] & B_{4,4} = -[V_5 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 - V_1 + V_4 K_{4,4}] \\ A_{5,4} = [V_4 + F_1 + F_2 + F_3 - V_1] & B_{5,4} = -[V_5 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 - V_1 + V_4 K_{5,4}] \\ A_{6,4} = [V_4 + F_1 + F_2 + F_3 - V_1] & B_{6,4} = -[V_5 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 - V_1 + V_4 K_{6,4}] \end{array}$$

$$C_{1,4} = V_5 K_{1,5}$$

$$C_{2,4} = V_5 K_{2,5}$$

$$C_{3,4} = V_5 K_{3,5}$$

$$C_{4,4} = V_5 K_{4,5}$$

$$C_{5,4} = V_5 K_{5,5}$$

$$C_{6,4} = V_5 K_{6,5}$$

$$D_{1,4} = -F_4 Z_{1,4}$$

$$D_{2,4} = -F_4 Z_{2,4}$$

$$D_{3,4} = -F_4 Z_{3,4}$$

$$D_{4,4} = -F_4 Z_{4,4}$$

$$D_{5,4} = -F_4 Z_{5,4}$$

$$D_{6,4} = -F_4 Z_{6,4}$$

Para la etapa $j=5$

- Aplicando las consideraciones se obtiene:

$$A_j = \left[V_j + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right]$$

$$B_j = - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] + U_j + (V_j + W_j) K_{i,j} \right\}$$

Se obtiene:

$$A \left[V_1 + \sum_{m=1}^{j-1} F_m - V_1 \right]_{i,j}$$

$$B_{i,j} = - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j F_j - V_1 \right] + V_j K_{i,j} \right\}$$

$$C_{i,j} = (V_{j+1} K_{i,j+1})$$

$$D_{i,j} = -(F_j)(Z_{i,j})$$

Por lo tanto, la etapa $j=5$ queda:

$$A_{1,5} = [V_5 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 - V_1] \quad B_{1,5} = -[V_6 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 - V_1 + V_5 K_{1,5}]$$

$$A_{2,5} = [V_5 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 - V_1] \quad B_{2,5} = -[V_6 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 - V_1 + V_5 K_{2,5}]$$

$$A_{3,5} = [V_5 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 - V_1] \quad B_{3,5} = -[V_6 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 - V_1 + V_5 K_{3,5}]$$

$$A_{4,5} = [V_5 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 - V_1] \quad B_{4,5} = -[V_6 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 - V_1 + V_5 K_{4,5}]$$

$$A_{5,5} = [V_5 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 - V_1] \quad B_{5,5} = -[V_6 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 - V_1 + V_5 K_{5,5}]$$

$$A_{6,5} = [V_5 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 - V_1] \quad B_{6,5} = -[V_6 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 - V_1 + V_5 K_{6,5}]$$

$$C_{1,5} = V_6 K_{1,6}$$

$$D_{1,5} = -F_5 Z_{1,5}$$

$$C_{2,5} = V_6 K_{2,6}$$

$$D_{2,5} = -F_5 Z_{2,5}$$

$$C_{3,5} = V_6 K_{3,6}$$

$$D_{3,5} = -F_5 Z_{3,5}$$

$$C_{4,5} = V_6 K_{4,6}$$

$$D_{4,5} = -F_5 Z_{4,5}$$

$$C_{5,5} = V_6 K_{5,6}$$

$$D_{5,5} = -F_5 Z_{5,5}$$

$$C_{6,5} = V_6 K_{6,6}$$

$$D_{6,5} = -F_5 Z_{6,5}$$

Para la etapa $j=6$

- Aplicando las consideraciones se obtiene:

$$A_j = \left[V_j + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right]$$

$$B_j = - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j (F_j - W_j - U_j) - V_1 \right] + U_j + (V_j + W_j) K_{i,j} \right\}$$

Se llega a:

$$A \left[V_1 + \sum_{m=1}^{j-1} F_m - V_1 \right]_{i,j}$$

$$B_{i,j} = - \left\{ \left[V_{j+1} + \sum_{j=1}^j F_j - V_1 \right] + V_j K_{i,j} \right\}$$

$$C_{i,j} = (V_{j+1}K_{i,j+1})$$

$$D_{i,j} = -(F_j)(Z_{i,j})$$

Por lo tanto, la etapa $j=6$ queda:

$$A_{1,6} = [V_6 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 - V_1]$$

$$A_{2,6} = [V_6 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 - V_1]$$

$$A_{3,6} = [V_6 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 - V_1]$$

$$A_{4,6} = [V_6 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 - V_1]$$

$$A_{5,6} = [V_6 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 - V_1]$$

$$A_{6,6} = [V_6 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 - V_1]$$

$V_7 = 0$, ya que no existe la etapa 7 en la torre de absorción.

$$B_{1,6} = -[V_7 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 + F_6 - V_1 + V_6K_{1,6}]$$

$$B_{1,6} = -[F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 + F_6 - V_1 + V_6K_{1,6}]$$

$$B_{2,6} = -[V_7 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 + F_6 - V_1 + V_6K_{2,6}]$$

$$B_{2,6} = -[F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 + F_6 - V_1 + V_6K_{2,6}]$$

$$B_{3,6} = -[V_7 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 + F_6 - V_1 + V_6K_{3,6}]$$

$$B_{3,6} = -[F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 + F_6 - V_1 + V_6K_{3,6}]$$

$$B_{4,6} = -[V_7 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 + F_6 - V_1 + V_6 K_{4,6}]$$

$$B_{4,6} = -[F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 + F_6 - V_1 + V_6 K_{4,6}]$$

$$B_{5,6} = -[V_7 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 + F_6 - V_1 + V_6 K_{5,6}]$$

$$B_{5,6} = -[F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 + F_6 - V_1 + V_6 K_{5,6}]$$

$$B_{6,6} = -[V_7 + F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 + F_6 - V_1 + V_6 K_{6,6}]$$

$$B_{6,6} = -[F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 + F_6 - V_1 + V_6 K_{6,6}]$$

$$C_{1,6} = V_7 K_{1,7}$$

$$C_{2,6} = V_7 K_{2,7}$$

$$C_{3,6} = V_7 K_{3,7}$$

$$C_{4,6} = V_7 K_{4,7}$$

$$C_{5,6} = V_7 K_{5,7}$$

$$C_{6,6} = V_7 K_{6,7}$$

=0, ya que no existe la etapa 7 en la torre de absorción

$$D_{1,6} = -F_6 Z_{1,6}$$

$$D_{2,6} = -F_6 Z_{2,6}$$

$$D_{3,6} = -F_6 Z_{3,6}$$

$$D_{4,6} = -F_6 Z_{4,6}$$

$$D_{5,6} = -F_6 Z_{5,6}$$

$$D_{6,6} = -F_6 Z_{6,6}$$

Una vez que se tienen estas ecuaciones. Se pueden acomodar en un sistema de matrices de 6x6 con el fin de utilizar la ecuación (2.26). Esto se debe a que cada matriz representa a cada componente dentro de cada etapa de la torre de absorción. Por lo tanto, las matrices son las siguientes.

Composición del metano (c_1) en las etapas 1, 2, 3, 4, 5 y 6

$$\begin{bmatrix} x_{1,1} \\ x_{1,2} \\ x_{1,3} \\ x_{1,4} \\ x_{1,5} \\ x_{1,6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_{11} & C_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_{12} & B_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{13} & B_{13} & C_{13} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{14} & B_{14} & C_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{15} & B_{15} & C_{15} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{16} & B_{16} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} D_{1,1} \\ D_{1,2} \\ D_{1,3} \\ D_{1,4} \\ D_{1,5} \\ D_{1,6} \end{bmatrix}$$

Composición del etano (c_2) en las etapas 1, 2, 3, 4, 5 y 6:

$$\begin{bmatrix} x_{2,1} \\ x_{2,2} \\ x_{2,3} \\ x_{2,4} \\ x_{2,5} \\ x_{2,6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_{21} & C_{21} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_{22} & B_{22} & C_{22} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{23} & B_{23} & C_{23} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{24} & B_{24} & C_{24} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{25} & B_{25} & C_{25} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{26} & B_{26} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} D_{2,1} \\ D_{2,2} \\ D_{2,3} \\ D_{2,4} \\ D_{2,5} \\ D_{2,6} \end{bmatrix}$$

Composición del propano (c_3) en las etapas 1, 2, 3, 4, 5 y 6:

$$\begin{bmatrix} x_{3,1} \\ x_{3,2} \\ x_{3,3} \\ x_{3,4} \\ x_{3,5} \\ x_{3,6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_{31} & C_{31} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_{32} & B_{32} & C_{32} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{33} & B_{33} & C_{33} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{34} & B_{34} & C_{34} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{35} & B_{35} & C_{35} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{36} & B_{36} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} D_{3,1} \\ D_{3,2} \\ D_{3,3} \\ D_{3,4} \\ D_{3,5} \\ D_{3,6} \end{bmatrix}$$

Composición del n-butano (c_4) en las etapas 1, 2, 3, 4, 5 y 6:

$$\begin{bmatrix} x_{4,1} \\ x_{4,2} \\ x_{4,3} \\ x_{4,4} \\ x_{4,5} \\ x_{4,6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_{41} & C_{41} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_{42} & B_{42} & C_{42} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{43} & B_{43} & C_{43} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{44} & B_{44} & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{45} & B_{45} & C_{45} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{46} & B_{46} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} D_{4,1} \\ D_{4,2} \\ D_{4,3} \\ D_{4,4} \\ D_{4,5} \\ D_{4,6} \end{bmatrix}$$

Composición del n-pentano (c_5) en las etapas 1, 2, 3, 4, 5 y 6:

$$\begin{bmatrix} x_{5,1} \\ x_{5,2} \\ x_{5,3} \\ x_{5,4} \\ x_{5,5} \\ x_{5,6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_{51} & C_{51} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_{52} & B_{52} & C_{52} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{53} & B_{53} & C_{53} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{54} & B_{54} & C_{54} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{55} & B_{55} & C_{55} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{56} & B_{56} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} D_{5,1} \\ D_{5,2} \\ D_{5,3} \\ D_{5,4} \\ D_{5,5} \\ D_{5,6} \end{bmatrix}$$

Composición del aceite propuesto por Henley o agente absorbedor propuesto (n-hexano) en las etapas 1, 2, 3, 4, 5 y 6

$$\begin{bmatrix} x_{6,1} \\ x_{6,2} \\ x_{6,3} \\ x_{6,4} \\ x_{6,5} \\ x_{6,6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_{61} & C_{61} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_{62} & B_{62} & C_{62} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{63} & B_{63} & C_{63} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{64} & B_{64} & C_{64} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{65} & B_{65} & C_{65} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{66} & B_{66} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} D_{6,1} \\ D_{6,2} \\ D_{6,3} \\ D_{6,4} \\ D_{6,5} \\ D_{6,6} \end{bmatrix}$$

Método de Newton-Raphson para ecuaciones no lineales:

El método de Newton-Raphson es aplicado a una serie de ecuaciones no lineales las cuales pueden escribirse como:

$$f_i(x_1, x_2, x_3, \dots, x_i) \quad (I)$$

Dónde:

i=número de ecuaciones no lineales.

La Ec.I puede expandirse mediante una serie de Taylor quedando como:

$$0 \approx f_i(x_1^*, x_2^*, x_3^* \dots x_i^*) + \frac{df_i}{dx_1} |^* \Delta x_1 + \frac{df_i}{dx_2} |^* \Delta x_2 + \frac{df_i}{dx_3} |^* \Delta x_3 + \frac{df_i}{dx_i} |^* \Delta x_i \quad (II)$$

Dónde:

$$\Delta x_j = x_j - x_j^*$$

Los términos con asterisco (*) se refieren a estimaciones iniciales que deben hacerse.

Cuando todas las correcciones resultan ser cero (o muy próximas), las estimaciones iniciales serán las correctas y la ecuación (I) quedará resuelta, de no ser así, estas correcciones Δx_j se suman a las estimaciones iniciales para proporcionar un nuevo conjunto de valores iniciales para aplicarse a la ecuación (II).

Este procedimiento se repite hasta que todas las correcciones y por lo tanto las funciones sean iguales a cero.

Esto se logra cuando:

$$\Delta x_j = x_j - x_j^* \simeq 0 \quad (II.A)$$

Desarrollo para la ecuación (3.7 matriz)

Recordemos la estructura de la ecuación (3.19)

$$H_{V,j} = \sum_{i=1}^c y_{i,j} (A_i + B_i T + C_i T^2) \quad (3.19)$$

Donde:

$H_{V,j}$ = Entalpia de vapor en el plato "j" [BTU/lb-mol]

$y_{i,j}$ = fracción de gas del componente "i" en el plato "j".

T_j = temperatura en el plato j [°F].

A_i, B_i y C_i son constantes correspondientes a cada componente del gas.

- Para el plato $j=1$:

$$H_{v,1} = y_{1,1}(A_1 + B_1T_1 + C_1T_1^2) + y_{2,1}(A_2 + B_2T_1 + C_2T_1^2) + y_{3,1}(A_3 + B_3T_1 + C_3T_1^2) \\ + y_{4,1}(A_4 + B_4T_1 + C_4T_1^2) + y_{5,1}(A_5 + B_5T_1 + C_5T_1^2) + y_{6,1}(A_6 + B_6T_1 \\ + C_6T_1^2)$$

- Para el plato $j=2$:

$$H_{v,2} = y_{1,2}(A_1 + B_1T_2 + C_1T_2^2) + y_{2,2}(A_2 + B_2T_2 + C_2T_2^2) + y_{3,2}(A_3 + B_3T_2 + C_3T_2^2) \\ + y_{4,2}(A_4 + B_4T_2 + C_4T_2^2) + y_{5,2}(A_5 + B_5T_2 + C_5T_2^2) + y_{6,2}(A_6 + B_6T_2 \\ + C_6T_2^2)$$

- Para el plato $j=3$:

$$H_{v,3} = y_{1,3}(A_1 + B_1T_3 + C_1T_3^2) + y_{2,3}(A_2 + B_2T_3 + C_2T_3^2) + y_{3,3}(A_3 + B_3T_3 + C_3T_3^2) \\ + y_{4,3}(A_4 + B_4T_3 + C_4T_3^2) + y_{5,3}(A_5 + B_5T_3 + C_5T_3^2) + y_{6,3}(A_6 + B_6T_3 \\ + C_6T_3^2)$$

- Para el plato $j=4$:

$$H_{v,4} = y_{1,4}(A_1 + B_1T_4 + C_1T_4^2) + y_{2,4}(A_2 + B_2T_4 + C_2T_4^2) + y_{3,4}(A_3 + B_3T_4 + C_3T_4^2) \\ + y_{4,4}(A_4 + B_4T_4 + C_4T_4^2) + y_{5,4}(A_5 + B_5T_4 + C_5T_4^2) + y_{6,4}(A_6 + B_6T_4 \\ + C_6T_4^2)$$

- Para el plato $j=5$:

$$H_{v,5} = y_{1,5}(A_1 + B_1T_5 + C_1T_5^2) + y_{2,5}(A_2 + B_2T_5 + C_2T_5^2) + y_{3,5}(A_3 + B_3T_5 + C_3T_5^2) \\ + y_{4,5}(A_4 + B_4T_5 + C_4T_5^2) + y_{5,5}(A_5 + B_5T_5 + C_5T_5^2) + y_{6,5}(A_6 + B_6T_5 \\ + C_6T_5^2)$$

- Para el plato $j=6$:

$$H_{v,6} = y_{1,6}(A_1 + B_1T_6 + C_1T_6^2) + y_{2,6}(A_2 + B_2T_6 + C_2T_6^2) + y_{3,6}(A_3 + B_3T_6 + C_3T_6^2) \\ + y_{4,6}(A_4 + B_4T_6 + C_4T_6^2) + y_{5,6}(A_5 + B_5T_6 + C_5T_6^2) + y_{6,6}(A_6 + B_6T_6 \\ + C_6T_6^2)$$

Aplicaremos el mismo procedimiento, pero para la ecuación (3.20)

$$H_{L,j} = \sum_{i=1}^c x_{i,j}(a_i + b_i T + c_i T^2) \quad (3.20)$$

$H_{L,j}$ = Entalpia del liquido en el plato "j" [BTU/lb-mol]

$x_{i,j}$ = fracción de liquido del componente "i" en el plato "j".

T_j = temperatura en el plato j [°F].

a_i, b_i y c_i son constantes correspondientes a cada componente del gas.

- Para el plato j=1:

$$H_{L,1} = x_{1,1}(a_1 + b_1 T_1 + c_1 T_1^2) + x_{2,1}(a_2 + b_2 T_1 + c_2 T_1^2) + x_{3,1}(a_3 + b_3 T_1 + c_3 T_1^2) \\ + x_{4,1}(a_4 + b_4 T_1 + c_4 T_1^2) + x_{5,1}(a_5 + b_5 T_1 + c_5 T_1^2) + x_{6,1}(a_6 + b_6 T_1 \\ + c_6 T_1^2)$$

- Para el plato j=2

$$H_{L,2} = x_{1,2}(a_1 + b_1 T_2 + c_1 T_2^2) + x_{2,2}(a_2 + b_2 T_2 + c_2 T_2^2) + x_{3,2}(a_3 + b_3 T_2 + c_3 T_2^2) \\ + x_{4,2}(a_4 + b_4 T_2 + c_4 T_2^2) + x_{5,2}(a_5 + b_5 T_2 + c_5 T_2^2) + x_{6,2}(a_6 + b_6 T_2 \\ + c_6 T_2^2)$$

- Para el plato j=3

$$H_{L,3} = x_{1,3}(a_1 + b_1 T_3 + c_1 T_3^2) + x_{2,3}(a_2 + b_2 T_3 + c_2 T_3^2) + x_{3,3}(a_3 + b_3 T_3 + c_3 T_3^2) \\ + x_{4,3}(a_4 + b_4 T_3 + c_4 T_3^2) + x_{5,3}(a_5 + b_5 T_3 + c_5 T_3^2) + x_{6,3}(a_6 + b_6 T_3 \\ + c_6 T_3^2)$$

- Para el plato j=4

$$H_{L,4} = x_{1,4}(a_1 + b_1 T_4 + c_1 T_4^2) + x_{2,4}(a_2 + b_2 T_4 + c_2 T_4^2) + x_{3,4}(a_3 + b_3 T_4 + c_3 T_4^2) \\ + x_{4,4}(a_4 + b_4 T_4 + c_4 T_4^2) + x_{5,4}(a_5 + b_5 T_4 + c_5 T_4^2) + x_{6,4}(a_6 + b_6 T_4 \\ + c_6 T_4^2)$$

- Para el plato j=5

$$H_{L,5} = x_{1,5}(a_1 + b_1T_5 + c_1T_5^2) + x_{2,5}(a_2 + b_2T_5 + c_2T_5^2) + x_{3,5}(a_3 + b_3T_5 + c_3T_5^2) \\ + x_{4,5}(a_4 + b_4T_5 + c_4T_5^2) + x_{5,5}(a_5 + b_5T_5 + c_5T_5^2) + x_{6,5}(a_6 + b_6T_5 \\ + c_6T_5^2)$$

- Para el plato j=6

$$H_{L,6} = x_{1,6}(a_1 + b_1T_6 + c_1T_6^2) + x_{2,6}(a_2 + b_2T_6 + c_2T_6^2) + x_{3,6}(a_3 + b_3T_6 + c_3T_6^2) + \\ x_{4,6}(a_4 + b_4T_6 + c_4T_6^2) + x_{5,6}(a_5 + b_5T_6 + c_5T_6^2) + x_{6,6}(a_6 + b_6T_6 + c_6T_6^2) \text{ Dónde:}$$

También es necesario conocer las derivadas parciales, por lo que es indispensable utilizar la ecuación 3.21

$$\phi_j = \frac{dH_{V,j}}{dT} = \sum_{i=1}^c y_{i,j}(B_i + 2C_i T) \quad (3.21)$$

- Para el plato j=1:

$$\phi_1 = y_{1,1}(B_1 + 2C_1T_1) + y_{2,1}(B_2 + 2C_2T_1) + y_{3,1}(B_3 + 2C_3T_1) + y_{4,1}(B_4 + 2C_4T_1) \\ + y_{5,1}(B_5 + 2C_5T_1) + y_{6,1}(B_6 + 2C_6T_1)$$

- Para el plato j=2:

$$\phi_2 = y_{1,2}(B_1 + 2C_1T_2) + y_{2,2}(B_2 + 2C_2T_2) + y_{3,2}(B_3 + 2C_3T_2) + y_{4,2}(B_4 + 2C_4T_2) \\ + y_{5,2}(B_5 + 2C_5T_2) + y_{6,2}(B_6 + 2C_6T_2)$$

- Para el plato j=3:

$$\phi_3 = y_{1,3}(B_1 + 2C_1T_3) + y_{2,3}(B_2 + 2C_2T_3) + y_{3,3}(B_3 + 2C_3T_3) + y_{4,3}(B_4 + 2C_4T_3) \\ + y_{5,3}(B_5 + 2C_5T_3) + y_{6,3}(B_6 + 2C_6T_3)$$

- Para el plato j=4:

$$\phi_4 = y_{1,4}(B_1 + 2C_1T_4) + y_{2,4}(B_2 + 2C_2T_4) + y_{3,4}(B_3 + 2C_3T_4) + y_{4,4}(B_4 + 2C_4T_4) \\ + y_{5,4}(B_5 + 2C_5T_4) + y_{6,4}(B_6 + 2C_6T_4)$$

- Para el plato j=5:

$$\phi_5 = y_{1,5}(B_1 + 2C_1T_5) + y_{2,5}(B_2 + 2C_2T_5) + y_{3,5}(B_3 + 2C_3T_5) + y_{4,5}(B_4 + 2C_4T_5) + y_{5,5}(B_5 + 2C_5T_5) + y_{6,5}(B_6 + 2C_6T_5)$$

- Para el plato j=6:

$$\phi_6 = y_{1,6}(B_1 + 2C_1T_6) + y_{2,6}(B_2 + 2C_2T_6) + y_{3,6}(B_3 + 2C_3T_6) + y_{4,6}(B_4 + 2C_4T_6) + y_{5,6}(B_5 + 2C_5T_6) + y_{6,6}(B_6 + 2C_6T_6)$$

Realizando el mismo desarrollo para la ecuación (3.22)

$$\psi_j = \frac{dH_{L,j}}{dT} = \sum_{i=1}^c x_{i,j}(b_i + 2c_i T) \quad (3.22)$$

- Para el plato j=1:

$$\psi_1 = x_{1,1}(b_1 + 2c_1T_1) + x_{2,1}(b_2 + 2c_2T_1) + x_{3,1}(b_3 + 2c_3T_1) + x_{4,1}(b_4 + 2c_4T_1) + x_{5,1}(b_5 + 2c_5T_1) + x_{6,1}(b_6 + 2c_6T_1)$$

- Para el plato j=2:

$$\psi_2 = x_{1,2}(b_1 + 2c_1T_2) + x_{2,2}(b_2 + 2c_2T_2) + x_{3,2}(b_3 + 2c_3T_2) + x_{4,2}(b_4 + 2c_4T_2) + x_{5,2}(b_5 + 2c_5T_2) + x_{6,2}(b_6 + 2c_6T_2)$$

- Para el plato j=3

$$\psi_3 = x_{1,3}(b_1 + 2c_1T_3) + x_{2,3}(b_2 + 2c_2T_3) + x_{3,3}(b_3 + 2c_3T_3) + x_{4,3}(b_4 + 2c_4T_3) + x_{5,3}(b_5 + 2c_5T_3) + x_{6,3}(b_6 + 2c_6T_3)$$

- Para el plato j=4:

$$\psi_4 = x_{1,4}(b_1 + 2c_1T_4) + x_{2,4}(b_2 + 2c_2T_4) + x_{3,4}(b_3 + 2c_3T_4) + x_{4,4}(b_4 + 2c_4T_4) + x_{5,4}(b_5 + 2c_5T_4) + x_{6,4}(b_6 + 2c_6T_4)$$

- Para el plato j=5:

$$\psi_5 = x_{1,5}(b_1 + 2c_1T_5) + x_{2,5}(b_2 + 2c_2T_5) + x_{3,5}(b_3 + 2c_3T_5) + x_{4,5}(b_4 + 2c_4T_5) + x_{5,5}(b_5 + 2c_5T_5) + x_{6,5}(b_6 + 2c_6T_5)$$

- Para el plato $j=6$:

$$\psi_6 = x_{1,6}(b_1 + 2c_1T_6) + x_{2,6}(b_2 + 2c_2T_6) + x_{3,6}(b_3 + 2c_3T_6) + x_{4,6}(b_4 + 2c_4T_6) + x_{5,6}(b_5 + 2c_5T_6) + x_{6,6}(b_6 + 2c_6T_6)$$

Retomando únicamente “A” de la ecuación (3.7 modificada):

$$\underbrace{\left(\frac{dH_j}{dT_{j-1}}\right)^B}_{A} \Delta T_{j-1}^B + \underbrace{\left(\frac{dH_j}{dT_j}\right)^B}_{B} \Delta T_j^B + \underbrace{\left(\frac{dH_j}{dT_{j+1}}\right)^B}_{C} \Delta T_{j+1}^B = \underbrace{-H_j^B}_{D} \quad (3.7 \text{ modificada})$$

$$A = \left(\frac{dH_j}{dT_{j-1}}\right)^B$$

Utilizando la ecuación (A) y (3.22) con el fin de obtener los términos de L_j y de ψ_j

$$A = \frac{dH_j}{dT_{j-1}} = L_{j-1} \frac{dH_{L,j-1}}{dT_{j-1}} = L_{j-1} \left[\sum_{j=1}^c x_{i,j-1}(b_i + 2c_iT) \right] \quad (E)$$

Por lo tanto, simplificando la ecuación (E) se obtiene una ecuación más simple de resolver.

$$A_j = L_{j-1}\psi_{j-1} \quad (E.1)$$

Para el plato $j=1$:

$$A_1 = L_0\psi_0 = 0 \text{ ya que no existe el plato } 0.$$

Para el plato $j=2$:

$$A_2 = L_1\psi_1$$

Para el plato $j=3$:

$$A_3 = L_2\psi_2$$

Para el plato $j=4$:

$$A_4 = L_3\psi_3$$

Para el plato $j=5$:

$$A_5 = L_4\psi_4$$

Para el plato $j=6$:

$$A_6 = L_5\psi_5$$

Si a la ecuación (B) con las ecuaciones (3.21) y (3.22) y posteriormente se modifica el plato $j=N$ se llega a la siguiente ecuación general:

$$B_j = -(V_j + W_j) \left[\sum_{i=1}^c y_{i,1} (B_i + 2C_i T) \right] - (L_j + U_j) \left[\sum_{i=1}^c b_{i,j} (x_i + 2c_i T) \right]$$

Simplificando la ecuación (F) queda.

$$B_j = -(V_j + W_j)\phi_j - (L_j + U_j)\psi_j \quad (F\ 1)$$

Si a la ecuación (F 1) se le aplican las condiciones iniciales (no hay extracciones ni entradas adicionales) entonces queda como:

$$B_j = -(\cancel{V_j + W_j})\phi_j - (\cancel{L_j + U_j})\psi_j$$

$$B_j = -(V_j \phi_j) - (L_j \psi_j) \quad (F\ 2)$$

Para el plato $j=1$:

$$B_1 = -(V_1 \phi_1) - (L_1 \psi_1)$$

Para el plato $j=2$

$$B_2 = -(V_2 \phi_2) - (L_2 \psi_2)$$

Para el plato $j=3$

$$B_3 = -(V_3 \phi_3) - (L_3 \psi_3)$$

Para el plato $j=4$

$$B_4 = -(V_4 \phi_4) - (L_4 \psi_4)$$

Para el plato $j=5$

$$B_5 = -(V_5 \phi_5) - (L_5 \psi_5)$$

Para el plato $j=6$

$$B_6 = -(V_6 \phi_6) - (L_6 \psi_6)$$

Al modificar la ecuación (C) con la ecuación (3.21) y con el plato $j=N$ se obtiene.

$$C_i = V_j \left[\sum_{i=1}^c y_{i,1} (B_i + 2C_i T) \right]$$

Simplificando:

$$C_j = V_{j+1} \phi_{j+1} \quad (C 1)$$

Para el plato j=1

$$C_1 = V_2 \phi_2$$

Para el plato j=2

$$C_2 = V_3 \phi_3$$

Para el plato j=3

$$C_3 = V_4 \phi_4$$

Para el plato j=4

$$C_4 = V_5 \phi_5$$

Para el plato j=5

$$C_5 = V_6 \phi_6$$

Para el plato j=6

$$C_6 = V_7 \phi_7 = 0 \text{ Ya que no existe el plato 7.}$$

Si a la ecuación (D) se le aplica las condiciones (no hay entradas ni extracciones y Q=0) entonces queda:

$$D_j = -H_j = -[(L_{j-1})(H_{L,j-1}) + (V_{j+1})(H_{v,j+1}) + (F_j)(H_{F,j}) - (V_j + W_j)(H_{v,j}) - (L_j + U_j)(H_{L,j}) - Q_j]$$

$$D_j = -H_j = -[(L_{j-1})(H_{L,j-1}) + (V_{j+1})(H_{v,j+1}) + (F_j)(H_{F,j}) - V_j H_{v,j} - L_j H_{L,j}]$$

- Para el plato j=1:

Vale 0 ya que no existe el plato 0

$$D_1 = -[(L_0)(H_{L,0}) + (V_2)(H_{v,2}) + (F_1)(H_{F,1}) - V_1 H_{v,1} - L_1 H_{L,1}]$$

$$D_1 = -[(V_2)(H_{v,2}) + (F_1)(H_{F,1}) - (V_1 H_{v,1} - L_1 H_{L,1})]$$

- Para el plato j=2:

$$D_2 = -[(L_1)(H_{L,1}) + (V_3)(H_{v,3}) - V_2 H_{v,2} - L_2 H_{L,2}]$$

- Para el plato j=3:

$$D_3 = -[(L_2)(H_{L,2}) + (V_4)(H_{v,4}) - V_3 H_{v,3} - L_3 H_{L,3}]$$

- Para el plato j=4:

$$D_4 = -[(L_3)(H_{L,3}) + (V_5)(H_{v,5}) - V_4 H_{v,4} - L_4 H_{L,4}]$$

- Para el plato j=5

$$D_5 = -[(L_4)(H_{L,4}) + (V_6)(H_{v,6}) - V_5 H_{v,5} - L_5 H_{L,5}]$$

- Para el plato j=6:

Vale 0 ya que no existe el plato 7.

$$D_6 = -[(L_5)(H_{L,5}) + (V_7)(H_{v,7}) + (F_6)(H_{F,6}) - V_5 H_{v,5} - L_5 H_{L,6}]$$

$$D_6 = -[(L_5)(H_{L,5}) + (F_6)(H_{F,6}) - V_5 H_{v,5} - L_5 H_{L,6}]$$

Entonces finalmente se puede plantear la matriz tridiagonal que predice las temperaturas en cada etapa.

$$\begin{bmatrix} \Delta T_1 \\ \Delta T_2 \\ \Delta T_3 \\ \Delta T_4 \\ \Delta T_5 \\ \Delta T_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_4 & B_4 & C_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_5 & B_5 & C_5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_6 & B_6 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ D_4 \\ D_5 \\ D_6 \end{bmatrix}$$