

8
lej.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES - CUAUTITLAN

GUIA DE METODOS PARA LA DETERMINACION DEL NUMERO
DE ETAPAS IDEALES EN DESTILACION MULTICOMPONENTE

T E S I S

Que para obtener el Titulo de
INGENIERO QUIMICO

presentan

FLORES FLORES RODOLFO
GARCIA RAMIREZ MARCELA MA. ELENA
VAZQUEZ MORENO FLAVIO SALVADOR



Director de Tesis: Ing. Eligio Pastor Rivero Martínez

Cuatitlán Izcalli, Edo. de México

1988

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

OBJETIVOS DE LA TESIS

- Presentar técnicas fundamentales para la resolución de problemas de destilación multicomponente.
- Proporcionar una guía útil en el diseño de sistemas de separación multicomponente basados en la destilación.
- Señalar ventajas y desventajas de los métodos propuestos.
- Presentar programas por computadora en apoyo a los métodos propuestos.

INDICE

Introducción	
Capítulo 1	
Generalidades	1
1.1 Destilación multicomponente	1
1.2 Determinación de variables de sistemas multicomponentes en equilibrio líquido vapor	6
Capítulo 2	
Métodos cortos	13
2.1 Método KJFEM	16
2.2 Método de Underwood	25
2.3 Método de Hanson y Newman	31
2.4 Método de Chang	36
2.5 Método de Brown-Martin	40
2.6 Método de Colburn	43
Capítulo 3	
Métodos rigurosos	49
3.1 Método de Sorel	49
3.2 Método de Lewis-Matheson	53
3.3 Método de Akers-Wade	55
3.4 Método de Thiele-Geddes	58
3.5 Método de convergencia del conjunto de temperaturas	67
3.6 Método θ de convergencia	68
3.7 Método T de convergencia	71
3.8 Secuencia de cálculo propuesta	75

Capítulo 4

Ejemplos de aplicación	76
4.1 Problema propuesto 1	76
4.2 Problema propuesto 2	93
4.3 Problema propuesto 3	96

Capítulo 5

Conclusiones	99
5.1 Discusión de los métodos cortos	99
5.2 Discusión de los métodos rigurosos	99
5.3 Guía de diseño	107
5.4 Limitaciones y alcance de la guía	109

Apéndice A

Apéndice B

Bibliografía

INTRODUCCION

La destilación de mezclas multicomponentes es muy común en la industria y aunque existe un gran número de métodos para conocer el número de platos teóricos de sistemas multicomponentes, no se dispone de una recopilación de éstos lo suficientemente completa. Es por ello que en la presente tesis se estudian diversos métodos para la determinación de etapas teóricas en columnas convencionales de destilación multicomponente, clasificando y analizando las ventajas y desventajas de varios métodos, con lo que se elaborará una guía para encontrar el número de etapas ideales.

Las técnicas de cálculo que se requieren para este tipo de determinaciones son complejas y extensas por lo que el uso de la computadora es de gran utilidad para minimizar el tiempo de solución. Conforme a su complejidad y el grado de exactitud alcanzado podemos clasificar a los métodos en dos grupos: métodos cortos y métodos rigurosos. Los primeros se utilizan en estudios de diseño, inversión y costos de operación con un mínimo de cálculo. Los métodos rigurosos requieren de mayor información y tiempo de resolución pero permiten obtener resultados más exactos. Un gran número de casos pueden ser trabajados rápidamente por un método corto para alcanzar las condiciones óptimas y entonces la solución exacta es encontrada por algún método riguroso.

Esta tesis ha sido dividida en cinco capítulos. En el primer capítulo se presentan conceptos generales útiles en el desarrollo de los temas posteriores. Se discuten conceptos de destilación multicomponente y características principales de operación en columnas convencionales de destilación y el problema de su diseño, así como generalidades del equilibrio líquido-vapor de mezclas multicomponentes.

En el segundo capítulo se describen varios métodos cortos que permiten la determinación del número de etapas teóricas como una función de la razón del reflujo, del número mínimo de etapas y del reflujo mínimo.

En el siguiente capítulo se plantean métodos rigurosos de gran importancia con técnicas de cálculo más estrictas basadas en mayor cantidad de datos que los utilizados en los métodos cortos. Los métodos rigurosos se clasifican a su vez en tres grupos de acuerdo al procedimiento de cálculo utilizado. Los métodos etapa a etapa son convenientes para problemas de diseño cuando no hay componentes no clave ligeros o no clave pesados, su cálculo consiste generalmente de fijar la presión, la relación de reflujo y la distribución de los componentes en los productos del destilado y fondo, conduciendo a cálculos de prueba y error de las temperaturas, composiciones y cantidades de cada plato. Se empieza en el destilado y se continúa hacia abajo de la columna hasta alcanzar las condiciones del plato de alimentación y, empezando con las composiciones del fondo,

cantidad y temperatura se continúe hacia arriba de la columna hasta las condiciones del plato de alimentación. El parámetro de convergencia para determinar el número de etapas es cuando las condiciones de alimentación son iguales a las obtenidas a partir del domo y fondo de la columna.

En general, en los métodos de aproximación sucesiva se asumen los valores de flujos totales, temperaturas y, posiblemente también las composiciones individuales por etapa. Las ecuaciones son entonces resueltas conforme se necesite obtener valores de variables desconocidas adicionales, y las ecuaciones restantes son usadas como funciones de verificación en un esquema de convergencia para obtener nuevos valores de las variables asumidas. Métodos de aproximación sucesiva pueden ser establecidos de acuerdo a la idealidad o no idealidad de las soluciones en consideración.

Hasta el momento los métodos presentados anteriormente consideran condiciones en estado estacionario. El tercer grupo de métodos denominados de relajación permiten la aproximación a condiciones de estado transiente que existen cuando se presenta una perturbación en la columna hasta el momento en que el estado estacionario sea alcanzado de nuevo. Debido a que los problemas de diseño más comunes ocurren en estado estacionario, este tipo de métodos no será tratado en la presente tesis.

En el cuarto capítulo se proponen algunos ejemplos de aplicación en los cuales se incluyen las corridas de los programas desarrollados para algunos métodos cortos y rigurosos. Se presentan cuadros de resultados que permiten la comparación entre los diversos métodos.

Para finalizar este trabajo se concluye sobre la eficacia de los diversos métodos y se recomienda una secuencia para obtener el número de platos ideales. Se incluye un apéndice conteniendo la mínima información necesaria para la resolución de los problemas de aplicación.

CAPITULO I GENERALIDADES

1.1 Destilación Multicomponente.

La destilación es la operación mediante la cual una mezcla de varios componentes es separada en corrientes de diferentes concentraciones. La mezcla de alimentación puede estar constituida por dos ó más componentes; sin embargo, el término multicomponente es usado en destilación para las mezclas de más de tres componentes, debido a que los sistemas binarios y ternarios son resueltos de manera particular mediante métodos más sensibles.

Se considerará que la separación de los sistemas multicomponentes se lleva a cabo en una columna de destilación convencional. Esta se define como aquella columna que tiene una alimentación y dos corrientes de productos, el destilado D y los fondos B , como la que se muestra en la figura 1.1.

donde

- F = Flujo de alimentación
- D = Flujo de destilado
- B = Flujo de fondos
- V_j = Flujo de vapor que asciende del plato j
- L_j = Flujo de líquido que desciende del plato j
- y_{ji} = Fracción mol del vapor del componente i en el plato j
- x_{ji} = Fracción mol del líquido del componente i en el plato j
- x_{Di} = Fracción mol del componente i en el destilado
- x_{Bi} = Fracción mol del componente i en el fondo
- Q_c = Flujo de calor removido en el condensador
- Q_R = Flujo de calor suministrado en el reanervidor.

Como se indica en la figura 1.1, el vapor V_1 , deja el plato superior y entra al condensador donde es parcial ó totalmente condensado. El líquido formado es colectado en un acumulador desde el cual la corriente del líquido L_0 (llamado reflujo) y la corriente producto del domo D (el destilado) son extraídas. Cuando el vapor V_1 es totalmente condensado al

estado líquido, el condensador es llamado un condensador total. Si V_1 es parcialmente condensado al estado líquido para proveer el reflujo L_0 y el destilado es extraído como un vapor, el condensador se llama un condensador parcial. La cantidad de líquido en reflujo se expresa comúnmente en términos de la relación de reflujo, L_0/D .

El líquido que deja el plato del fondo de la columna entra al rehevador, donde es parcialmente vaporizado. El vapor producido es entonces retornado a través de la columna, y el líquido es extraído del rehevador y llamado producto del fondo B. En la práctica, el rehevador es generalmente localizado fuera de la columna.

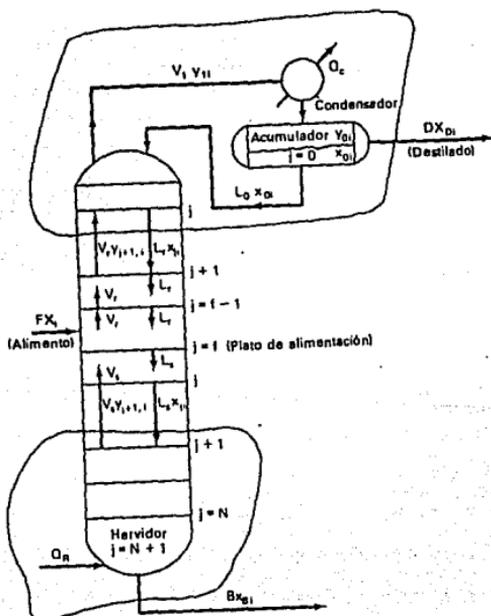


Figura 1.1 Columna de destilación convencional.

$$\left. \begin{array}{l}
 \text{Balances} \\
 \text{de} \\
 \text{Entalpia}
 \end{array} \right\} \begin{array}{l}
 V_{j+1} H_{j+1} = L_j h_j + DH_j + Q_c \quad (0 \leq j \leq f-2) \\
 V_j H_j + V_{f+1} H_{f+1} = L_{f-1} h_{f-1} + DH_{f-1} + Q_c \\
 V_{j+1} H_{j+1} = L_j h_j - B_j h_b + Q_c \quad (f \leq j \leq N) \\
 F H_F = B H_B + DH_D + Q_c - Q_R
 \end{array}$$

donde:

H, h = entalpias
 f = plato de alimentación
 F = alimentación
 c = componentes

Como puede observarse, el problema de destilación multicomponente es complejo y para su solución pueden asumirse suposiciones que lo simplifican. Si tales suposiciones son: flujos molares internos constantes y factores de separación poco sensibles a cambios de temperatura, se dispondrá de un grupo de soluciones llamadas métodos cortos (que pueden incluir otras simplificaciones particulares). Un método será más preciso conforme el número de simplificaciones establecidas sea menor. De aquí que exista otro grupo de soluciones más exactas conocidas como métodos rigurosos.

El comportamiento de un proceso de separación será completamente conocido si se da un número suficiente de especificaciones concernientes a flujos, temperaturas, dimensiones de equipo, etc. El total de variables establecidas dependerá del proceso. Si el número de variables es exactamente igual al número de ecuaciones independientes, el problema se encuentra definido. Al proporcionarse más variables que las requeridas, el problema está sobre especificado y no existe solución. Si, por el contrario, existen menos variables que las requeridas, el proceso se encuentra subdefinido y no hay una solución única.

La regla de la descripción menciona que para describir un proceso de separación en forma única, el número de variables independientes que debe ser especificado es igual al número que puede ser establecido por construcción o controlado por operación por medios externos independientes.

Para una columna de destilación convencional con condensador parcial, las variables establecidas para construcción y operación son:

Cantidad de cada componente en la alimentación	C
Condición térmica de alimentación	1
Presión	1
Etapas en rectificación (m)	1
Etapas en agotamiento (p)	1
Carga del rehervidor	1
Carga del condensador	1

C + 6

Estas C+6 variables describen completamente el proceso y si se da un valor para cada una de ellas la separación obtenida bajo estos valores está totalmente definida y pueden ser calculadas las demás variables tales como concentraciones de destilado, de fondos y flujos.

El número de variables independientes que hay que especificar en un problema de destilación deberá ser C+6 y estas variables pueden ser otras distintas a las mencionadas.

En el caso de un problema de diseño las variables a especificar son:

Flujo de cada componente en la alimentación	C
Condición térmica de la alimentación	1
Presión	1
Localización del plato de alimentación (x)	1

Las tres variables restantes se seleccionan de entre las variables de separación u operación, siendo las más frecuentes:

Relación de reflujo

(x) Se especifica que la alimentación se introduce en el plato óptimo, lo que minimiza el número de platos.

Dos variables de separación
(recuperación, composición,
relación de separación de un
componente, etc.)

2

C + 6

De las variables anteriores, la condición térmica de alimentación (q) se define como:

$$q = \frac{L' - L}{F} = \frac{HG - hF}{HG - hI}$$

HG : entalpía del vapor en condiciones de saturación

hI : entalpía de la mezcla líquida en condiciones de saturación

hF : entalpía de la mezcla en la alimentación

Puede observarse que la cantidad (q) es el calor necesario para convertir una mol de la mezcla de alimentación de su condición hF hasta un vapor saturado, dividido entre el calor latente molar $HG-hI$. La mezcla de alimentación puede introducirse en cualquiera de las diferentes condiciones térmicas, desde un líquido muy por debajo de su punto de burbuja hasta un vapor sobrecalentado; dependiendo de las condiciones (q) tendrá un valor diferente.

Otra variable a especificar es el reflujo cuyo máximo valor (reflujo total) se tiene cuando se retorna todo el producto principal a la columna y se rehíerve todo el producto residual; por ello, el flujo de alimentación fresca enviado debe reducirse a cero ($L_0/D = \infty$). De otro modo, podemos interpretar esta condición como la necesidad de disponer calor para el rehervidor y capacidad de enfriamiento del condensador infinitos para un flujo dado de alimentación. En cambio, la relación de reflujo mínimo ($(L_0/D)_{\min}$) es la relación máxima que requerirá de un número infinito de platos para lograr la separación deseada; corresponde al mínimo de calor del rehervidor y la mínima capacidad de enfriamiento del condensador respecto a la separación.

1.2 Determinación de variables de sistemas multicomponentes en equilibrio líquido-vapor.

El fundamento de la separación de mezclas multicomponentes es el equilibrio líquido-vapor que permite conocer el comportamiento del sistema en cada una de las etapas que

forman la columna de destilación.

Una mezcla multicomponente en dos fases se encuentra en equilibrio físico al satisfacerse las siguientes condiciones:

1. La temperatura T_V de la fase vapor es igual a la temperatura T_L de la fase líquida.
2. La presión total P_V a través de la fase vapor es igual a la presión total P_L a través de la fase líquida.
3. La tendencia de cada componente a escapar de la fase líquida a la fase vapor es exactamente igual a su tendencia a escapar de la fase vapor a la fase líquida.

Para este sistema cerrado multicomponente, constituido por dos fases en las cuales la temperatura y la presión son uniformes, puede demostrarse que al hallarse en desequilibrio los cambios de energía libre de Gibbs, que se darán espontáneamente son menores o iguales a cero,

$$\left(\frac{dG}{T, P}\right) \leq 0 \quad (1.2)$$

es decir; el proceso irreversible a T y P constantes se produce en la dirección que causa una disminución en la energía libre de Gibbs en el sistema. De este modo, el estado de equilibrio de un sistema cerrado es aquel donde G , la energía libre de Gibbs total, es un mínimo respecto a todos los cambios posibles para las condiciones de P y T .

Un criterio general para que el sistema este en equilibrio es:

$$\left(\frac{dG}{T, P}\right) = 0 \quad (1.3)$$

dado que para este sistema existen dos fases líquido y vapor en equilibrio debe existir una igualdad de potenciales químicos para cada especie en ambas fases

$$\mu_i^V = \mu_i^L \quad (i=1,2,3,\dots,c) \quad (1.4)$$

A su vez, esto nos conduce a una igualdad de las fugacidades individuales en la mezcla:

$$f_i^V = f_i^L \quad (i=1,2,3,\dots,c) \quad (1.5)$$

O en forma equivalente:

$$\sum_i y_i^V f_i^V = \sum_i y_i^L f_i^L \quad (1.6)$$

donde :

f_i^L, f_i^V = fugacidades del componente puro i , en los estados líquido y vapor respectivamente, evaluados a la presión total P y a la temperatura T del sistema.

x_i, y_i = fracciones mol del componente i en las fases líquido y vapor.

Podemos definir el coeficiente de equilibrio líquido-vapor (K_i) en la siguiente forma:

$$y_i = (f_i^L / f_i^V) x_i = K_i x_i \quad (1.7)$$

es útil poner la igualdad anterior en función del coeficiente de actividad del componente i en el vapor (ϕ_i^V)

$$\phi_i^V = f_i^V / P$$

$$y_i = (f_i^L / \phi_i^V P) x_i \quad (1.8)$$

A continuación podemos hacer las siguientes simplificaciones:

1. Cuando la fase vapor es un gas ideal:

$$\phi_i^V = 1$$

2. Cuando la fase líquida es una solución ideal

$$f_i^L = 1$$

3. La fugacidad del líquido puro i es insensible a la presión por lo que:

$$f_i^L = f_i^{\text{sat}}$$

f_i^{sat} = fugacidad de i evaluada en condiciones de saturación.

Pero como la fase vapor es un gas ideal:

$$f_i^{\text{sat}} = P_i^{\text{sat}}$$

P_i^{sat} = presión de vapor del componente i puro.

El asumir estas suposiciones nos conduce a

$$y_i = x_i P_{i \text{ sat}} / P \quad (i=1,2,\dots,c) \quad (1.9)$$

que es la ecuación de la ley de Raoult.

La presión de vapor, $P_{i \text{ sat}}$, es una función de la temperatura y puede ser determinada experimentalmente o por medio de relaciones empíricas como la ecuación de Antoine:

$$\ln P_{i \text{ sat}} = A - B / T + C \quad (1.10)$$

A, B, C = constantes de la ecuación de Antoine para cada componente

Sin embargo, una relación más precisa incluye dos constantes adicionales

$$\ln P_{i \text{ sat}} = A - B / T + C + D/T + E \ln T \quad (1.11)$$

Las relaciones de equilibrio del conjunto de ecuaciones (1.1) incluyen la constante de equilibrio (K_i) que puede ser obtenida como

$$K_i = P_{i \text{ sat}} / P$$

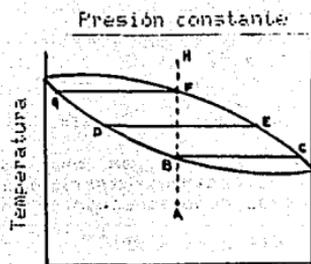
cuando se cumple la ley de Raoult ó a través de los diagramas de De Priestter.

Otra forma de calcular las constantes de equilibrio es mediante correlaciones, las cuales son utilizadas en los programas de métodos rigurosos (ver cap. 3). Las que se presentan en el apéndice A tienen la forma:

$$(K_i/T)^{1/3} = a_{1,i} + a_{2,i} T + a_{3,i} T^2 + a_{4,i} T^3$$

Para el cálculo de las temperaturas en cada etapa de equilibrio se recurre a la determinación de las temperaturas del punto de rocío y de burbuja que a continuación se definen.

Sobre el diagrama de equilibrio a presión constante V-L de un sistema binario en la figura 1.2 considerese el punto A que corresponde a una solución completamente líquida a presión constante. Si dicha solución se calienta, la primer burbuja de vapor se forma en el punto B, la temperatura que se alcanza en este punto se conoce como temperatura de punto de burbuja y se puede definir como la temperatura a la cual empieza la vaporización de una mezcla líquida, y tiene la composición en el punto C, más rica en la sustancia más volátil. La curva inferior del diagrama se conoce entonces como la curva de temperatura del punto de burbuja. Conforme la mezcla se va evaporando, se forma más vapor a expensas del líquido en el punto D y su vapor en el punto E en el equilibrio, siendo la composición de la masa total a la original como en el punto A.



x, y
fracción mol de A

Figura 1.2

La última gota del líquido se evapora en el punto F y la temperatura del punto de rocío es la que entonces se alcanza y se conoce como curva de temperatura del punto de rocío.

El estado de equilibrio para un sistema de dos fases (L-V) está definido por las relaciones siguientes en las cuales un número de componentes C están distribuidos entre las dos fases:

$$\text{Relaciones de Equilibrio.} \quad \left\{ \begin{array}{l} y_i = K_i x_i \quad (1 \leq i \leq C) \\ \sum_{i=1}^C y_i = 1 \\ \sum_{i=1}^C x_i = 1 \end{array} \right.$$

Donde K_i es función de la presión total y de la temperatura.

Las relaciones de equilibrio consisten de $C + 2$ ecuaciones con $2C + 2$ incógnitas. Por lo tanto, para obtener una solución de estas ecuaciones se deben de fijar C variables.

Al fijar $C - 1$ valores de x_i y la presión total P, la temperatura que satisface estas ecuaciones corresponde a la temperatura del punto de burbuja. Esta solución iterativa se puede efectuar por el método de Newton; estableciendo:

$$f(T) = K_i x_i - 1 \quad (1.14)$$

cuando la temperatura del punto de burbuja aquella en la cual $f(T) = 0$, y entonces por este método:

$$T_{n+1} = T_n - f(T_n)/f'(T_n) \quad (1.15)$$

El valor T_{n+1} así obtenido se toma como el valor asumido para la prueba siguiente T_n . Este procedimiento se repite hasta que $f(T)$ sea menor que algún número positivo pequeño

prefijado.

Al fijar los valores de y_i y P , la temperatura que satisface las relaciones de equilibrio corresponde a la temperatura del punto de rocío. Nuevamente con las relaciones de equilibrio

$$f(T) = y_i/x_i - 1 \quad x_i = y_i/K_i \quad (1.16)$$

La temperatura del punto de rocío es aquella T donde $f(T) = 0$ y

$$f'(T) = - y_i/K_i \frac{dK_i/dT}{K_i} \quad (1.17)$$

Robinson y Gilliland (6) dedujeron que si los valores de K_i relativos son independientes de la temperatura, las relaciones de equilibrio pueden reformularse de tal forma que las iteraciones en la determinación de las temperaturas de rocío y de burbuja no se requieren.

La relación K_i/K_b es la volatilidad relativa, del componente i con respecto al componente b ; es decir,

$$\alpha_i = K_i/K_b \quad (1.18)$$

donde K_i y K_b son evaluadas a la misma temperatura y presión. El componente b puede o no formar parte de la mezcla bajo consideración.

Para determinar la temperatura de punto de burbuja, fijando P y las x_i , las relaciones de equilibrio se establecen como:

$$y_i = (K_i/K_b) K_b x_i = \alpha_i K_b x_i$$

o bien

$$K_b = 1 / \sum_{i=1}^c \alpha_i x_i \quad (1.19)$$

Dado que las α_i no dependen de la temperatura, éstas se pueden calcular utilizando los valores de K_i y K_b evaluados para cualquier valor arbitrario de T y a la presión establecida. Con esta ecuación se evalúa K_b y después se obtiene la temperatura del punto de burbuja deseado a partir de la relación conocida entre K_b y T .

Ahora, si los valores de y_i se conocen, la temperatura del punto de rocío se puede calcular por:

$$K_b x_i = y_i/\alpha_i \quad (1.20)$$

y para todos los componentes

$$K_b = \sum_{i=1}^c y_i/\alpha_i \quad (1.21)$$

En los balances de energía de la ecuación 1.1 es necesario el uso de las entalpías. Para establecer los valores de entalpía de líquidos puros es necesario recurrir a un estado

de referencia (comunmente a 298 K y 1 atm.) donde se asigna a la entalpía un valor de cero. De este modo, a una temperatura dada, la expresión para la entalpía es:

$$h_i = \int_{T_0}^T C_{p,i} dT \quad (1.22)$$

$C_{p,i}$ = capacidad calorífica del líquido i

T_0 = temperatura de referencia

Para alcanzar las condiciones de vaporización de la mezcla líquida debe llevarse al menos a la temperatura del punto de burbuja ($T = T_b$) y la entalpía de mezcla debe incluir el calor de mezclado, lo que nos conduce a:

$$h_i = x_i \int_{T_0}^{T_b} C_{p,i} dT + \Delta h_{mez} \quad (1.23)$$

En soluciones próximas a la idealidad, el calor de mezclado es casi nulo, por lo cual la expresión se simplifica

$$h_L = \sum_{i=1}^n x_i h_i \quad (1.24)$$

La entalpía de un vapor comprende términos de calor sensible y latente

$$H_i = \int_{T_0}^{T_b} C_{p,i} dT + \lambda_i \quad (1.25)$$

Para mezclas de vapores, los calores de mezclado son despreciables

$$H_V = \sum_{i=1}^n y_i H_i \quad (1.26)$$

De este modo, la entalpía total de la mezcla es

$$F H_F = V H_V + L h_L \quad (1.27)$$

F = moles totales de la mezcla
 V = moles totales del vapor
 L = moles totales del líquido

CAPITULO 2

METODOS CORTOS

Los métodos cortos son aquellos que comprenden un mayor número de simplificaciones y son muy útiles en diseño preliminar de columnas de destilación y en estudios de inversión y costos de operación, recurriéndose aun mínimo de cálculos.

En destilación multicomponente (principalmente en métodos cortos) los conceptos de zona de composición constante y componentes clave son de gran importancia para su planteamiento.

Los componentes de la alimentación pueden ser ordenados en base a su volatilidad relativa. A los componentes más volátiles se les llama "ligeros" y a los menos volátiles "pesados". A diferencia de un sistema binario en destilación multicomponente no basta fijar la pureza en los productos o la recuperación de dos componentes (ligero y pesado) para determinar completamente el balance de materia pues se ignora la distribución a lo largo de la torre de los demás componentes. En este caso la distribución de los componentes estará en función de la selección y especificación de dos de ellos a los que se les llama "componentes clave". El componente clave ligero es aquel que está presente en los fondos en cantidad apreciable y es el más volátil, mientras que los componentes más ligeros que el clave ligero se encuentran en pequeñas cantidades. Si todos los componentes tienen concentraciones importantes en los fondos, entonces el más volátil es el clave ligero. En forma similar en el destilado habrá frecuentemente una cantidad importante de un componente, el componente clave pesado, que es el menos volátil; por el contrario, los componentes más pesados que el clave pesado están presentes sólo en pequeñas cantidades. Si en el destilado hay concentraciones importantes de todos los componentes, entonces el menos volátil es el clave pesado.

Considérese, por ejemplo, una mezcla de seis componentes C_i ($i=1,2,\dots,6$), donde $\alpha_1 > \alpha_2 > \alpha_3 > \alpha_4 > \alpha_5 > \alpha_6$ y que la mayor parte de C_3 así como esencialmente todo el C_1 y C_2 aparecen en el domo de una torre de destilación. A su vez, la mayor parte del C_4 y prácticamente todo el C_5 y el C_6 se presentan en el fondo. En este caso los componentes C_3 y C_4 son llamados componentes clave porque aparecen en cantidades significativas en ambos productos, mientras que los otros componentes (llamados no clave), son relegados casi exclusivamente a un producto o al otro. C_5 y C_6 son llamados componentes no clave pesados porque son menos volátiles que los clave, en tanto que C_1 y C_2 son los no clave ligeros debido a que son más volátiles que los clave.

Es de esperarse que todos los componentes en la alimentación se presenten en el plato de alimentación, tal como

se puede apreciar en las figuras 2.2 y 2.3. Dada la menor volatilidad relativa de C5 y C6, éstos componentes se ven impedidos de ascender sobre el plato de alimentación. De manera similar los componentes C1 y C2 son incapaces de descender bajo el plato de alimentación debido a su mayor volatilidad relativa.

Se puede notar para los no clave pesados, C5 y C6, que tienen fracciones mol relativamente constantes en el líquido y en el vapor desde la etapa inferior a la de alimentación hasta tres o cuatro etapas antes de llegar al fondo ($x_{NHK\ lim}$ y $y_{NHK\ lim}$ o composiciones límite). Algo parecido ocurre para los no clave ligeros en la zona de rectificación. Una consecuencia de lo anterior es la presencia de flujos molares constantes para líquido y vapor tanto en rectificación como en agotamiento, tal como se observa en la figura 2.1.

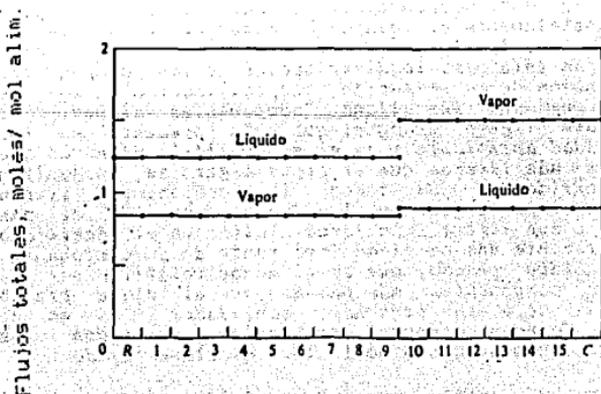
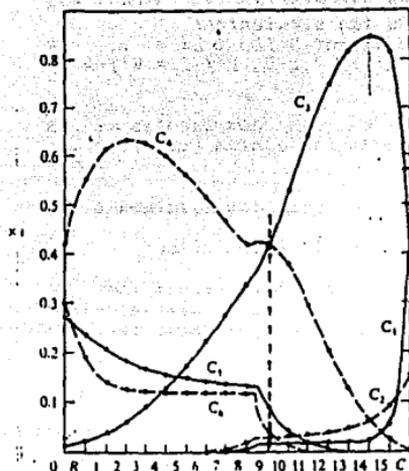


FIGURA 2.1 Flujos totales de líquido y vapor en una columna de destilación.

Figura 2.3 Perfil de composición de líquido en una columna de destilación.



Rehervidor

Condensador

Plato de alimentación
Fondos
Localización interetapa

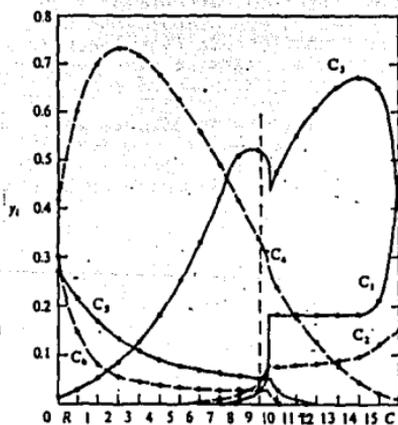


Figura 2.2 Perfil de composición en el vapor en una columna de destilación.

Rehervidor

Condensador

Plato de alimentación
Fondos
Localización interetapa

Las suposiciones asumidas para desarrollar las ecuaciones que integran los métodos cortos son las siguientes:

a) Flujos molares internos constantes ($L_0 = L_1 = \dots = L_{f-1}$, $V_1 = V_2 = \dots = V_f$, $L'_f = L'_{f+1} = L'_N$, $V'_{f-1} = V'_{f-2} = \dots = V'_N$)

b) La volatilidad relativa de los componentes α_i es considerada constante en cada una de las etapas (utilizar α_i 's promedio)

c) Las mezclas multicomponentes se comportan idealmente

d) La alimentación se introduce en el plato óptimo

Además, en este tipo de métodos se deberá especificar la composición, condición térmica y flujo de alimentación, relación de reflujo, recuperaciones (o purezas) de los componentes clave y presión de operación.

2.1 METODO KUFEM

De los métodos cortos existentes el que da los resultados más satisfactorios es el que se obtiene de una combinación de las ecuaciones de Kirkbride, Underwood y Fenske, y el diagrama de Erbar-Maddox (KUFEM)(9). Este método permite calcular el número teórico de platos N , y la localización del plato de alimentación f , proporcionando los siguientes parámetros: a) La distribución de los componentes clave, b) La composición y la condición térmica de la alimentación, c) La relación de reflujo.

El procedimiento de cálculo es el siguiente:

1) Calcular la composición de los productos del domo y del fondo utilizando la ecuación de Geddes.

Geddes (7,10) observó que al graficar $\log(x_{i,D}/x_{i,B})$ vs. α_i para los componentes ligeros se obtenía una función lineal, con una pendiente entre uno y H_{min} . Lo mismo ocurrió para los componentes pesados, pero había cierta variación en el valor de la pendiente. A pesar de estas ligeras diferencias, la distribución de todos los componentes puede aproximarse a la siguiente ecuación:

$$\log\left(\frac{(n)_D}{(n)_B}\right) = C_1 \log(\alpha_i) + C_2 \quad (2.1)$$

$\left(\frac{(n)_D}{(n)_B}\right)$ = razón de moles en el domo y fondo para el componente i .

C_1 y C_2 = constantes

2) Calcular el número mínimo de platos usando la ecuación de Fenske (14).

Si una columna de destilación es considerada etapa de equilibrio desde el fondo, se podrá escribir para la primer etapa la siguiente definición del factor de separación:

$$(y_a/y_b) = \alpha \frac{(x_a/x_b)}{a/b} \quad (2.3)$$

a, b = componentes clave

α = volatilidad relativa de "a" respecto a "b"

Se relaciona la composición del líquido en el plato dos con las composiciones anteriores con un balance de materiales,

$$V_{a,1} y_{a,1} = L_2 x_{a,2} - x_{a,B} \quad (2.4)$$

a reflujo total $V' \gg B$ y

$$y_{a,1} = x_{a,2} \quad (2.5)$$

Cuando el reflujo es mínimo, el número de etapas es infinito, $V = V_{\min}$ y $V' = V'_{\min}$. Si se considera esta situación y se suman las dos expresiones anteriores, se obtendrá la siguiente relación (para un sistema de cuatro componentes)

$$V_{\min} - V'_{\min} = \frac{\alpha_{1,D} D x_{1,D}}{\alpha_1 - \phi} + \frac{\alpha_{2,D} D x_{2,D}}{\alpha_2 - \phi} + \frac{\alpha_{2,B} B x_{2,B}}{\alpha_2 - \phi} + \frac{\alpha_{3,D} D x_{3,D}}{\alpha_3 - \phi} + \frac{\alpha_{3,B} B x_{3,B}}{\alpha_3 - \phi} + \frac{\alpha_{4,B} B x_{4,B}}{\alpha_4 - \phi} \quad (2.13)$$

(α_1) α_2) α_3) α_4)

clave ligero: componente 2

clave pesado: componente 3

Cualquier selección de las raíces β y β' debe ser consistente con los siguientes balances de materiales:

$$F_{1,F} = D_{1,D} \quad (2.14)$$

$$F_{2,F} = D_{2,D} + B_{2,B} \quad (2.15)$$

$$F_{3,F} = D_{3,D} + B_{3,B} \quad (2.16)$$

$$F_{4,F} = B_{4,B} \quad (2.17)$$

Si deseamos expresar la relación (2.13) en función de las variables de alimentación, β y β' deberán ser iguales para que los términos de los componentes 2 y 3 tengan un mismo denominador. De este modo:

$$V_{\min} - V'_{\min} = \frac{D_{1,D}}{\alpha - \beta} + \frac{\alpha_2}{\alpha - \beta} (D_{2,D} + B_{2,B}) +$$

$$\frac{\alpha_3}{\alpha - \beta} (D_{3,D} + B_{3,B}) + \frac{\alpha_4 B_{4,B}}{\alpha - \beta}$$

$$V_{\min} - V'_{\min} = F \left(\frac{\alpha_{1,F}}{\alpha - \beta} + \frac{\alpha_{2,F}}{\alpha - \beta} + \frac{\alpha_{3,F}}{\alpha - \beta} + \frac{\alpha_{4,F}}{\alpha - \beta} \right)$$

a reflujo total $V' \gg B$ y

$$y_{a,1} = x_{a,2} \quad (2.5)$$

De este modo, combinando (2.3) y (2.5):

$$(x_a/x_b) = \alpha_1 (x_a/x_b)_B \quad (2.6)$$

En forma similar para la etapa tres:

$$(x_a/x_b)_3 = \alpha_2 (x_a/x_b)_2 = \alpha_2 \alpha_1 (x_a/x_b)_B \quad (2.7)$$

Si se continua el proceso hasta el domo

$$(y_a/y_b)_N = \alpha_N \alpha_{N-1} \dots \alpha_1 (x_a/x_b)_B$$

o

$$(x_a/x_b)_D = (\alpha_{ab})^{N_{min}} (x_a/x_b)_B \quad (2.8)$$

Despejando N_{min} se obtiene la ecuación de Fenske para reflujo total:

$$N_{min} = \frac{\log \left(\frac{(x_{LK}/x_{HK})_D (x_{HK}/x_{LK})_B}{\log(\alpha_{LK})} \right)}{\log(\alpha_{LK})} \quad (2.10)$$

3) Calcular la relación de reflujo mínimo mediante las ecuaciones de Underwood.

Underwood (10) definió para sistemas multicomponentes las siguientes ecuaciones:

$$V/D = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i^x x_{i,D}}{\alpha_i - \theta} \quad (2.11)$$

$$-V'/B = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i^x x_{i,B}}{\alpha_i - \theta'} \quad (2.12)$$

donde β y β' son parámetros definidos en las figuras 2.7 y 2.8.

Puesto que $V - V' = F(1 - q)$, la ecuación toma la forma

$$1 - q = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i^x i_i F}{\alpha_i - \beta} \quad (2.18)$$

$$\alpha_{NHK} < 0 < \alpha_{HK}$$

Por otra parte, dado que

$$V_{min}/D = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i^x i_i D}{\alpha_i - \beta} \quad y$$

$$V_{min}/D = \frac{L_{min} + D}{D} = R_{min} + 1$$

Tenemos otra forma de la ecuación de Underwood:

$$R_{min} + 1 = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i^x i_i D}{\alpha_i - \beta} \quad (2.19)$$

4) Calcular el número de platos teóricos empleando el diagrama de Errbar-Maddox o de Gilliland (fig. 2.4, 2.5 y 2.6).

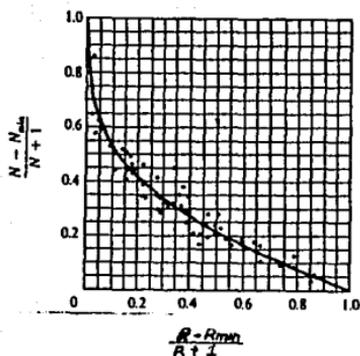


Figura 2.5 Determinación del número de platos teóricos (Gilliland).

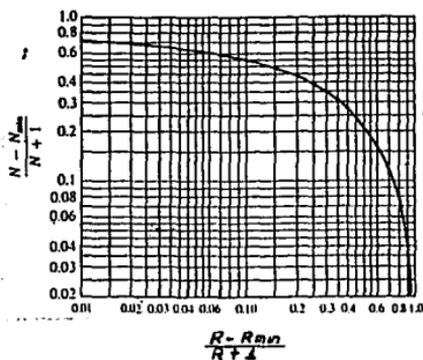


Figura 2.6 Determinación del número de platos teóricos (Gilliland).

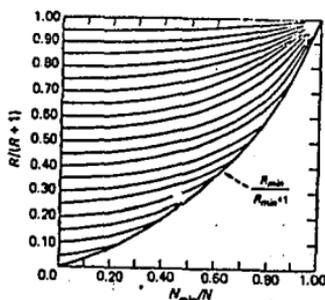


Figura 2.4. Determinación del número de platos teóricos (Erbar-Madox).

5) Determinar la localización del plato de alimentación usando la ecuación de Kirkbride (9).

ec. (2.20)

$$\log(m/p) = 0.206 \log \left(\frac{B/D}{F} \left(\frac{x_{HK}}{x_{LK}} \right) \left(\frac{x_{LK}}{x_{HK}} \right)^2 \right)$$

m = número de platos en la zona de rectificación

p = número de platos en la zona de agotamiento

Para resolver las ecuaciones de Underwood y obtener el reflujo mínimo Ripps (12) ha propuesto el siguiente procedimiento:

Se tiene

$$F(\theta) = \sum_{i=1}^C \frac{\frac{\alpha_i x_i}{\alpha_i - \theta}}{\alpha_i - \theta} - (1 - q) = 0 \quad (2.21)$$

La ecuación (2.21) es altamente no lineal e indeterminada en cada valor de $\theta = \alpha_i$. Las raíces de interés caen en el intervalo abierto entre pares de α_i adyacentes. Debido a este carácter fuertemente no lineal de la ecuación (ver fig. 2.7 y 2.8) una aplicación directa de los métodos normales de iteración (como es el de Newton) falla frecuentemente al convergir a una raíz equivocada o requiere de un número excesivo de ciclos para alcanzar una raíz.

En nuestro caso consideraremos que se encuentra en el intervalo

$$\alpha_{HK} < \phi < \alpha_{LK}$$

α_{HK} = volatilidad relativa del componente clave pasado

α_{LK} = volatilidad relativa del componente clave ligero

Suponiendo de momento que la raíz cde cerca de ϕ definimos

$$G(\phi) = \frac{\left(\frac{\alpha_{HK} \alpha_{LK}}{HK} F \right)}{\alpha_{HK} - \phi} - F(\phi) \quad (2.22)$$

La ecuación (2.22) puede ser resuelta para ϕ tratando $G(\phi)$ como una constante. Puesto que $G(\phi)$ es una función de ϕ , la solución debe ser iterativa. Entonces;

$$(\phi)_n = \alpha_{HK} (1 - \frac{\alpha_{LK}}{HK} F) / (G(\phi)_n) \quad (2.23)$$

$(\phi)_n$ = valor supuesto de ϕ en ciclo n de iteración

$(\phi)_n$ = valor calculado de ϕ en el ciclo n de iteración

Recurriendo a series de Taylor de primer orden se obtiene la siguiente solución iterativa:

$$(\phi)_{n+1} = (\phi)_n - \frac{(\phi)_n - (\phi)_n}{1 - \left\{ \frac{d\phi_c}{d\phi} \right\}} \quad (2.24)$$

donde

$$\left\{ \frac{d\phi_c}{d\phi} \right\} \cong \frac{(\phi)_n - (\phi)_{n-1}}{(\phi)_n - (\phi)_{n-1}} \quad (2.25)$$

para $n = 2, 3, \dots$

Para empezar el procedimiento se tomará ϕ como el punto medio entre α_{HK} y α_{LK} .

$$(\phi)_1 = (\alpha_{HK} + \alpha_{LK}) / 2 \quad (2.26)$$

Asumiendo originalmente que la raíz en el intervalo señalado está más cerca de α_{HK} que de α_{LK} . Al evaluar la función en $(\phi)_1$ se obtiene una prueba para esta suposición. Si $F(\phi)_1$ es positiva la suposición es correcta y se debe continuar. Si la función es negativa la raíz está más cerca de α_{LK} .

Al continuar se utiliza la ecuación (2.23) como una iteración directa para el segundo punto de inicio. Por lo tanto,

$$(\phi)_2 = (\phi)_1$$

Posteriormente se utilizará el método de Newton modificado dado por las ecuaciones (2.24) y (2.25).

En el programa elaborado por este método se supone una distribución ideal de los componentes en la torre. No se considera la presencia de claves intermedias. Para calcular el número de platos se utiliza la correlación de Gilliland (3).

$$Y = 0.75 - 0.75X^{0.5668}$$

donde

$$Y = (N - N_{min}) / (N + 1)$$

$$X = (R - R_{min}) / (R + 1)$$

2.2 Método de Underwood

King (7) ha propuesto una secuencia de cálculo para determinar el número de etapas en destilación multicomponente por el método de Underwood.

1. Calcular la distribución de los componentes en la torre de acuerdo a la distribución de los clave o recurriendo a la ecuación de Geddes (2.1), para ello se requerirá de datos de volatilidad relativa y composición en el fondo y domo.

2. Utilizando el flujo de alimentación y balances de materia, calcular D, B, V y V' .

3. Resolver las ecuaciones de Underwood en rectificación.

$$V = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i x_{i,D}}{\alpha_i - \beta} \quad (2.27)$$

para $0 < \beta < \alpha_{HK}$ y $\alpha_{LK} < \beta < \alpha$

en agotamiento

$$-V = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i x_{i,B}}{\alpha_i - \beta} \quad (2.28)$$

para $\alpha_{HK} < \beta' < \alpha_{LK}$ y $\beta' > \alpha_{LK}$

4. Calcular las composiciones en el plato de alimentación para un número infinito de etapas.

$$x_{LNK, \infty} = \frac{x_{D/L}}{LNK, D} \left(\frac{\alpha_i / \beta}{\alpha_i - \beta} - 1 \right) \quad (2.29)$$

$$x_{HNK, \infty} = \frac{x_{B/L'}}{HNK, B} \left(1 - \frac{\alpha_i / \beta'}{\alpha_i - \beta'} \right) \quad (2.30)$$

donde

ϕ_{HK}^- = valor de ϕ en el intervalo $0 < \phi < \alpha_{HK}$

ϕ_{LK}^+ = valor de ϕ' en el intervalo $\phi' > \alpha_{LK}$

Las composiciones de los componentes clave se calculan mediante las siguientes relaciones:

$$(x_{LK}/x_{HK})_F = \frac{(x_{LR,D}/V) + (x_{LR,B}/V')}{(x_{HR,D}/V) + (x_{HR,B}/V')} \quad (2.31)$$

$$x_{LR,F} + x_{HR,F} = 1 - \sum x_{NR,F} \quad (2.32)$$

5. Obtener el número de etapas en las zonas de rectificación y agotamiento mediante las siguientes ecuaciones:

$$(\phi/\phi')_k^m = \frac{\sum_{i=1}^C \frac{\alpha_{i,i,F}}{\alpha - \phi}}{\sum_{i=1}^C \frac{\alpha_{i,i,F}}{\alpha - \phi'}} \quad (2.33)$$

$$(\phi'/\phi)_k^p = \frac{\sum_{i=1}^C \frac{\alpha_{i,i,F}}{\alpha - \phi'}}{\sum_{i=1}^C \frac{\alpha_{i,i,F}}{\alpha - \phi}} \quad (2.34)$$

j, k = valores particulares de ϕ o ϕ'

Se calcula el número total de etapas

$$N = m + p$$

La determinación de ϕ y ϕ' presenta dificultad debido a el carácter discontinuo de las funciones $F(\phi)$ y $F(\phi')$.

$$F(\phi) = \sum_{i=1}^C \frac{\frac{\alpha x_i D}{i i, D}}{\alpha - \phi_i} - V$$

$$F(\phi') = \sum_{i=1}^C \frac{\frac{\alpha x_i B}{i i, B}}{\alpha - \phi'_i} + V'$$

Donde $F(\phi)$ y $F(\phi')$ deben hacerse cero al alcanzarse la convergencia por el método de Newton. Esto puede apreciarse en las siguientes gráficas:

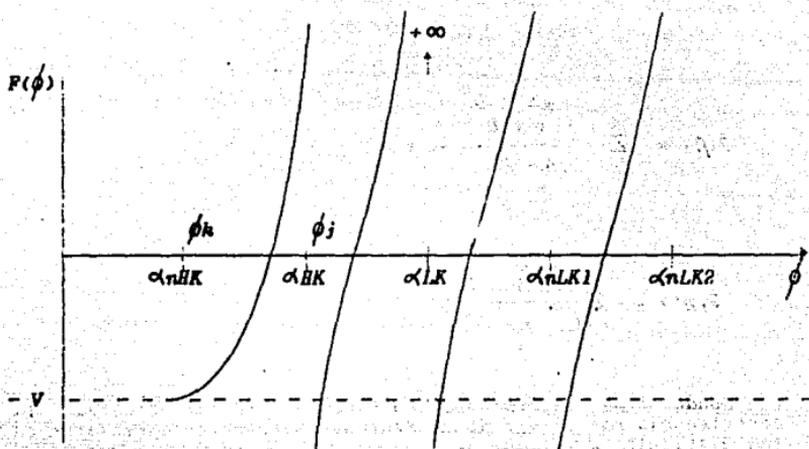


FIGURA 2.7 $F(\phi)$

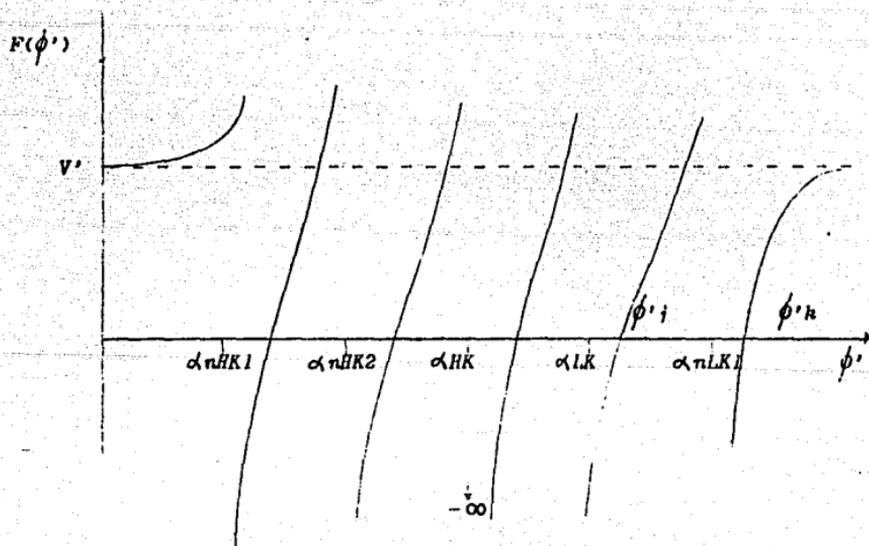


FIGURA 2.8 $F(\phi')$

Dado que el método de Newton-Raphson consiste en el trazo de tangentes a la función cuya intersección con el eje de las abscisas marca la siguiente aproximación, el método no alcanza la convergencia cuando las pendientes están muy cercanas a cero o a infinito. En el caso de la función F la solución puede salir del intervalo señalado o nunca alcanzarse.

Para disponer de un método de solución eficiente, se combinó el método propuesto por Ripps (12) con el de Underwood obteniéndose el siguiente procedimiento:

Definamos F como:

en rectificación

$$F(\phi) = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha^x \tau_{i,D}}{\alpha - \phi} - V \quad (2.35 a)$$

en agotamiento

$$F(\phi') = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha^x \tau_{i,B}}{\alpha - \phi'} + V' \quad (2.35 b)$$

siendo G :

en rectificación

$$G(\phi) = \frac{\alpha^x \tau_{\tau,D}}{\alpha - \phi} - F(\phi) \quad (2.36 a)$$

en agotamiento

$$G(\phi') = \frac{\alpha^x \tau_{\tau,B}}{\alpha - \phi'} - F(\phi') \quad (2.36 b)$$

τ = componente cerca de cuya α está la solución ϕ .

El valor calculado de ϕ o ϕ' estará dado por:

$$\phi_c = \frac{\alpha (1 - x_{\tau,D}/G(\phi))}{\tau} \quad (2.37)$$

Utilizando la serie de Taylor con dos términos se llega a:

$$(\phi)_{n+1} = (\phi)_n + \frac{(\phi_c)_n - (\phi)_n}{1 - \left\{ \frac{d(\phi_c)}{d\phi} \right\}} \quad (2.38)$$

donde

$$\left\{ \frac{d(\phi_c)}{d\phi} \right\} = \frac{(\phi_c)_n - (\phi_c)_{n-1}}{(\phi)_n - (\phi)_{n-1}} \quad (2.39)$$

para $n = 2, 3, \dots$

Para iniciar el proceso se recurre al promedio en el intervalo y al segundo valor supuesto es:

$$(\phi)_2 = (\phi_c)_1$$

Se han observado buenos resultados en su aplicación.

2.3 Método de Hanson y Newman

Este método es idéntico al dado por King (7). Primeramente se calcula la distribución de los componentes en la torre, se determinan los flujos de interés, se resuelven las ecuaciones (2.27) y (2.28), finalmente se obtiene el número de etapas con las ecuaciones (2.33) y (2.34).

La diferencia consiste en el cálculo de las composiciones en el plato de alimentación así como en la localización óptima de éste. Para ilustrar el método consideremos un sistema de cuatro componentes (a,b,c,d) donde se establece la separación de b y c. Las ecuaciones (2.33) y (2.34) pueden ser escritas con pares de valores de ϕ_j y ϕ'_j , entonces estas ecuaciones se convierten en:

$$\begin{aligned} (\phi_j / \phi'_{LK})^m &= \frac{\sum_{i=1}^C \frac{\alpha_{i,i,f}^x}{\alpha_i - \phi_{LK}}}{\sum_{i=1}^C \frac{\alpha_{i,i,f}^x}{\alpha_i - \phi_j}} \\ &= \frac{\sum F_{i,LK} x_{i,f}}{\sum F_{i,j} x_{i,f}} \end{aligned} \quad (2.40)$$

donde x_f = composiciones a la salida del plato de alimentación
y

$$\begin{aligned} (\phi'_j / \phi'_{HK})^p &= \frac{\sum_{i=1}^C \frac{\alpha_{i,i,f}^x}{\alpha_i - \phi'_{LK}}}{\sum_{i=1}^C \frac{\alpha_{i,i,f}^x}{\alpha_i - \phi'_j}} \\ &= \frac{\sum G_{i,j} x_{i,f}}{\sum G_{i,HK} x_{i,f}} \end{aligned} \quad (2.41)$$

donde $F_{i,j} = \frac{\alpha_i}{\alpha_i - \phi_j}$ $G_{i,j} = \frac{\alpha_i}{\alpha_i - \phi'_j}$

En este ejemplo se dispone de las siguientes ecuaciones:

$$(\phi_a / \phi_b)^m = \frac{\sum F_{i,b} x_{i,f}}{\sum F_{i,a} x_{i,f}} \quad (2.42)$$

$$(\phi_c/\phi_b)^m = \frac{\sum_{i,b} F_{i,f} x_{i,f}}{\sum_{i,c} F_{i,f} x_{i,f}} \quad (2.43)$$

$$(\phi_d/\phi_b)^m = \frac{\sum_{i,b} F_{i,f} x_{i,f}}{\sum_{i,d} F_{i,f} x_{i,f}} \quad (2.44)$$

$$(\phi_a/\phi_c)^p = \frac{\sum_{i,a} G_{i,f} x_{i,f}}{\sum_{i,c} G_{i,f} x_{i,f}} \quad (2.45)$$

$$(\phi_d/\phi_c)^p = \frac{\sum_{i,d} G_{i,f} x_{i,f}}{\sum_{i,c} G_{i,f} x_{i,f}} \quad (2.46)$$

$$(\phi_b/\phi_c)^p = \frac{\sum_{i,b} G_{i,f} x_{i,f}}{\sum_{i,c} G_{i,f} x_{i,f}} \quad (2.47)$$

Para cada componente ligero se pueda escribir esta relación:

$${}^m_{NLK,LK} - {}^m_{LR,HK} = 0$$

donde ${}^m_{NLK,LK}$ corresponde a las ecuaciones (2.42) y (2.44)

y ${}^m_{LR,HK}$ corresponde a la ecuación (2.43)

Esto también puede expresarse como: (2.48)

$$(1/\ln(\phi_j/\phi_{LK})) (\ln \sum_{i,LK} F_{i,f} x_{i,f} - \ln \sum_{i,j} F_{i,f} x_{i,f}) -$$

$$(1/\ln(\phi_{HK}/\phi_{LK})) (\ln \sum_{i,LK} F_{i,f} x_{i,f} - \ln \sum_{i,HK} F_{i,f} x_{i,f}) = 0$$

para $j \neq LK$

similarmente para agotamiento:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{\ln(\phi'_j / \phi'_j)} \right) \left(\ln \sum_{i,j} G_{i,j} x_{i,f} - \ln \sum_{i,HK} G_{i,HK} x_{i,f} \right) - \\ & \left(\frac{1}{\ln(\phi'_{LK} / \phi'_{LK})} \right) \left(\ln \sum_{i,LK} G_{i,LK} x_{i,f} - \ln \sum_{i,HK} G_{i,HK} x_{i,f} \right) = 0 \end{aligned} \quad (2.49)$$

para $j \neq HK$

Las ecuaciones (2.48) y (2.49) ahora pueden ser diferenciadas con respecto a la fracción molar del componente clave pesado. De este modo para cada no clave ligero:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{\ln(\phi_j / \phi_{LK})} \right) \left\{ \frac{\sum_{i,LK} \frac{dx_{i,f}}{dx_{HK,f}}}{\sum_{i,LK} x_{i,f}} \right\} - \left\{ \frac{\sum_{i,j} \frac{dx_{i,f}}{dx_{HK,f}}}{\sum_{i,j} x_{i,f}} \right\} - \\ & \left(\frac{1}{\ln(\phi_{HK} / \phi_{LK})} \right) \left\{ \frac{\sum_{i,LK} \frac{dx_{i,f}}{dx_{HK,f}}}{\sum_{i,LK} x_{i,f}} \right\} - \left\{ \frac{\sum_{i,HK} \frac{dx_{i,f}}{dx_{HK,f}}}{\sum_{i,HK} x_{i,f}} \right\} = 0 \end{aligned} \quad (2.50)$$

y para cada no clave pesado:

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{1}{\ln(\phi' / \phi')} \right)_{f, HK} \left\{ \frac{\sum G_{i,j} \frac{dx_{i,f}}{dx_{HK,f}}}{\sum G_{i,j} x_{i,f}} \right\} - \left\{ \frac{\sum G_{i,HR} \frac{dx_{i,f}}{dx_{HK,f}}}{\sum G_{i,HR} x_{i,f}} \right\} \\
 & \left(\frac{1}{\ln(\phi' / \phi')} \right)_{LK, HK} \left\{ \frac{\sum G_{i,LK} \frac{dx_{i,f}}{dx_{HK,f}}}{\sum G_{i,LK} x_{i,f}} \right\} - \left\{ \frac{\sum G_{i,HR} \frac{dx_{i,f}}{dx_{HK,f}}}{\sum G_{i,HR} x_{i,f}} \right\} = 0
 \end{aligned} \tag{2.51}$$

La condición de localización óptima del plato de alimentación es expresada por la adición de las derivadas de la sección de rectificación y la de agotamiento.

$$\begin{aligned}
 & \left[\frac{dm}{dx} \right]_{HK,f} + \left[\frac{dp}{dx} \right]_{HK,LK} = 0 \\
 & \left(\frac{1}{\ln(O / O')} \right)_{HK, LR} \left\{ \frac{\sum F_{i,LK} \frac{dx_{i,f}}{dx_{HK,f}}}{\sum F_{i,LK} x_{i,f}} \right\} - \left\{ \frac{\sum F_{i,HR} \frac{dx_{i,f}}{dx_{HK,f}}}{\sum F_{i,HR} x_{i,f}} \right\} + \\
 & \left(\frac{1}{\ln(O' / O')} \right)_{LK, HK} \left\{ \frac{\sum G_{i,LK} \frac{dx_{i,f}}{dx_{HK,f}}}{\sum G_{i,LK} x_{i,f}} \right\} - \left\{ \frac{\sum G_{i,HR} \frac{dx_{i,f}}{dx_{HK,f}}}{\sum G_{i,HR} x_{i,f}} \right\} = 0
 \end{aligned} \tag{2.52}$$

En esta forma hay dos ecuaciones para cada no clave ligero (2.48) y (2.50), y dos para cada no clave pesado (2.49) y (2.51). La ecuación (2.52) más las ecuaciones:

$$\sum x_{i,f} = 1 \quad (2.53)$$

$$\sum \frac{dx_{i,f}}{dx_{HK,f}} = 0 \quad (2.54)$$

$$\frac{dx_{i,f}}{dx_{HK}} = 1 \quad (2.55)$$

completan el conjunto de cálculo para todas las

$$x_{i,f} \quad \text{y} \quad \frac{dx_{i,f}}{dx_{HK,f}}$$

en el plato de alimentación.

El procedimiento provee de una solución exacta para la columna en el plato óptimo de alimentación. Sin embargo, la búsqueda de las soluciones es larga y compleja, lo que hace del método de Hanson y Newman (3) poco competitivo y dado el tiempo de cálculo requerido sería preferible, incluso, un método riguroso.

2.4 Método de Chang

EL procedimiento propuesto por Chang (2) permite calcular la distribución de los componentes en la torre con rapidez y razonable exactitud, al igual que la relación mínima de reflujo y el número de etapas teóricas.

Para conocer la distribución de los componentes se requerirá de el conocimiento de la alimentación y de los valores promedio de las volatilidades relativas. Además deberán suponerse valores de recuperación de los componentes clave en el domo y en el fondo. El número de moles de los componentes clave queda establecido por las siguientes relaciones:

$$d_{LK} = \frac{d_{LK}}{f_{LK}} (f_{LK}) = s_1 (f_{LK}) \quad (2.56)$$

$$b_{LK} = f_{LK} - d_{LK} \quad (2.57)$$

$$d_{HK} = (1 - b_{LK}/f_{LK}) f_{HK} = (1 - s_1) (f_{HK}) \quad (2.58)$$

$$b_{HK} = f_{HK} - d_{HK} \quad (2.59)$$

donde:

$s_1 = d_{LK}/f_{LK}$ = recuperación especificada del componente clave ligero

$s_2 = b_{LK}/f_{LK}$ = recuperación especificada del componente clave pesado

Se estima la distribución de los no clave por la ecuación de Hengstebeck-Geddes:

$$\ln(d_i/b_i) = C_1 - C_2 \ln \alpha_i \quad (2.1)$$

Sustituyendo al i -ésimo componente por LK y HK se obtiene un par de ecuaciones simultáneas, de las cuales es posible obtener los valores de C_1 y C_2 .

$$C1 = \ln\left(\frac{d}{b}\right)_{HK} \quad (2.60)$$

$$C2 = \ln\left(\frac{d}{b}\right)_{LK} \left(\frac{b}{d}\right)_{HK} / \ln \alpha_{LK} \quad (2.61)$$

La ecuación (2.1) puede ser reescrita como:

$$\frac{d_i}{b_i} = \exp(C1 + C2 \ln \alpha_i) \quad (2.1')$$

El balance de materia para el componente i es:

$$f_i = d_i + b_i \quad (2.62)$$

Eliminando d_i de (2.1') y (2.62), se llega a:

$$b_i = \frac{f_i}{1 + \exp(C1 + C2 \ln \alpha_i)} \quad (2.63)$$

$$d_i = f_i - b_i \quad (2.64)$$

Ahora es posible calcular las fracciones molares para cada componente en el domo y en el fondo, de la siguiente manera:

$$(x_i)_D = \frac{d_i}{\sum d_i} \quad (2.65)$$

$$(x_i)_B = \frac{b_i}{\sum b_i} \quad (2.66)$$

Basándose en las recuperaciones supuestas y utilizando las dos ecuaciones anteriores se pueden calcular las fracciones mol de los componentes clave $(x_{D,HK})_{ca}$ y $(x_{B,LK})_{ca}$.

Se definen las funciones g_1 y g_2 como:

$$g_1(s_1, s_2) = (x_{D,HK})_{ca} - (x_{HK})_D \quad (2.67)$$

$$g_2(s_1, s_2) = (x_{B,LK})_{ca} - (x_{LK})_B \quad (2.68)$$

Ahora es necesario hallar aquellos valores de s_1 y s_2 para los cuales g_1 y g_2 se hacen cero. Para ello podemos recurrir al método de Newton-Raphson. Podría asumirse que $s_{1,n}$ y $s_{2,n}$ son aproximaciones razonables que permiten obtener nuevos y mejores valores de aproximación $s_{1,n+1}$ y $s_{2,n+1}$. El método de Newton-Raphson conlleva al siguiente procedimiento:

$$s_{1,n+1} = s_{1,n} + \Delta s_1 \quad (2.69)$$

$$s_{2,n+1} = s_{2,n} + \Delta s_2 \quad (2.70)$$

Para conocer Δs_1 y Δs_2 se requiere resolver el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales simultáneas:

$$\begin{bmatrix} g'_{1,1} & g'_{1,2} \\ g'_{2,1} & g'_{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta s_1 \\ \Delta s_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -g_1 \\ -g_2 \end{bmatrix} \quad (2.71)$$

donde:

$$g'_{i,j} = \frac{\partial g_{i,j}}{\partial s_j} \quad (2.72)$$

Dada su naturaleza implícita es preferible un método de aproximación por diferencias finitas:

$$\frac{\partial g_{i,j}}{\partial s_1} = \frac{g_{i,1}(s_1 + \delta, s_2) - g_{i,1}(s_1, s_2)}{\delta}$$

$$\frac{\partial g_{i,j}}{\partial s_2} = \frac{g_{i,1}(s_1, s_2 + \delta) - g_{i,1}(s_1, s_2)}{\delta} \quad (2.73)$$

para $i = 1, 2$

Un valor satisfactorio es $\delta = 0.00001$. Con los nuevos valores supuestos de s_1 y s_2 se repite el procedimiento recurriendo a las ecuaciones (2.69), (2.70) y (2.71) hasta alcanzar un grado de convergencia razonable.

Tras haberse establecido la distribución de los componentes en el domo y en el fondo se pasa a determinar el número mínimo de etapas teóricas mediante la ecuación de Fenske (2.10), si bien

$$N_{\min} = C_2$$

en la ecuación de Hengstebach-Geddes.

El reflujo mínimo, R_{\min} , es determinado con las ecuaciones de Underwood (2.18) y (2.19). Una buena técnica para su resolución es la planteada por Ripps (12).

Finalmente, el número de etapas teóricas puede ser conocido empleando los diagramas de Erbar-Haddock o de Gilliland, (fig. 2.1, 2.2 y 2.3). Chang (2) utiliza la correlación siguiente para el diagrama de Gilliland:

$$Y = 1 - \exp \frac{(1 + 54.4X)(X - 1)}{(11 + 117.2X) X} \quad (2.74)$$

donde:

$$X = \frac{R - R_{\min}}{R + 1} \quad \text{y} \quad Y = \frac{N - N_{\min}}{N + 1}$$

2.5 Método de Brown-Martin

Bajo las condiciones de reflujo mínimo, si la separación tiene lugar entre los dos componentes menos volátiles en la alimentación, en el domo de la columna, la relación de las fracciones mol de los componentes clave en el líquido en la zona de composición constante, será la misma que en la porción del líquido de la alimentación.

Procedimiento de cálculo en la zona de rectificación:

Efectuando un balance de materia para el componente clave pesado en el domo de la columna; se tiene

$$V K_{j,j} x_j = L x_j \quad (2.75)$$

Si nada del clave pesado aparece en el destilado pero aparece en la zona de composición constante:

$$V K_{j,j} x_j = L x_j \quad (2.76)$$

donde

$$K_{j,j} = \frac{L}{V} \quad (2.77)$$

Entonces, la temperatura será aquella en la cual

$$K_{HK} = (L/V)_{\min} \quad (2.78)$$

Por lo tanto, la secuencia de solución es;

1. Asumir un valor de $(L/V)_{\min}$, que es igual a K_{HK} .
2. A la presión de la columna determinar K_i . El balance de materia se calcula como sigue:

$$\sum_i x_i = 1.0 = \sum_i \frac{D x_{i,D}}{K_i D + L(K_i - 1)} \quad (2.79)$$

3. Evaluar el valor de K para todos los componentes en el destilado incluyendo el clave pesado a la temperatura y presión en la zona de composición constante.

4. De las ecuaciones anteriores, calcular la composición del líquido en la zona de rectificación calculando las composiciones abajo incluyendo la del clave ligero y obtener la composición de el clave pesado por diferencia.

5. Asumir dos valores más de reflujo mínimo y repetir los cálculos.

6. Graficar la relación de x_{LK}/x_{HK} vs. L_{min} .

7. En el punto donde la relación de las composiciones líquidas de los clave ligero y pesado sea igual a la relación en la porción líquida de la alimentación, leer L_{min} y calcular $(L/V)_{min}$.

Procedimiento de cálculo en la sección de agotamiento:

Ahora el balance de materia queda como

$$\sum_i x_i = 1.0 = \sum_i \frac{B x_{i,B}}{B K_i + L'(1 - K_i)} \quad (2.80)$$

Si nada del componente clave ligero aparece en el producto del fondo:

$$L x_i = V' y_i + B x_{i,B} \quad x_{i,B} = 0 \quad (2.81)$$

$$\frac{L'}{V'} = \frac{K}{LK} \quad (2.82)$$

Se seleccionan tres valores de L'/V' y las K 's de los componentes son evaluadas a las temperaturas que corresponden a valores menores de $K_{LK} = L'/V'$. Para varios valores de L'/V' calcular los valores de "x" y las relaciones de x_{LK}/x_{HK} . Graficar y leer el L_{min} , a partir del cual la relación de reflujo mínimo se calcula.

En el programa presentado para conocer el reflujo mínimo correspondiente a la relación de fracciones de alimentación, se utilizó la fórmula de interpolación de Lagrange dentro de un intervalo de ± 1 el punto a interpolar. La fórmula de interpolación es la siguiente:

$$\begin{aligned}
 Y = & \frac{(x-x_2)(x-x_3)\dots(x-x_n)y_1}{(x-x_2)(x-x_3)\dots(x-x_n)} + \\
 & \frac{(x-x_1)(x-x_3)\dots(x-x_n)y_2}{(x-x_1)(x-x_3)\dots(x-x_n)} + \\
 & \frac{(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)y_3}{(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)} + \\
 & \frac{(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)y_4}{(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)} + \dots + \\
 & \frac{(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_{n-1})y_n}{(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_{n-1})}
 \end{aligned}$$

El número mínimo de etapas se calcula con la ecuación de Fenske y con R y R_{\min} se determina el número de etapas ideales empleando las gráficas de Erbar-Maddox o de Gilliland (fig. 2.1, 2.2 y 2.3).

2.6 Método de Colburn

El procedimiento a seguir para determinar el número de etapas ideales por el método de Colburn (15) es el siguiente:

1. Asumir un valor de $(L/V)_{\min}$ al cual será igual a K_{HK} . Con este valor supuesto de K_{HK} y la presión de operación de la columna determinar los valores de K_i en la parte superior de la torre para todos los componentes más ligeros que el componente clave pesado. De manera similar en la parte inferior de la torre, asumir un valor de (L'/V') al cual será igual a K_{LK} y con la presión de operación determinar los valores de K_i para todos los componentes más pesados que el componente clave ligero.

2. Calcular la composiciones aproximadas en la zona superior de composición constante de la torre mediante las ecuaciones siguientes. Dicho cálculo se efectuará para todos los componentes más ligeros que el clave ligero incluyendo a éste.

$$(Lx)_{a m} = \frac{(Dx)}{a D} \frac{(K/K) - 1 + (K/K) (Dx) / (Lx)}{a d m + (K/K) d D d m} \quad (2.83)$$

$$(Lx)_{a m} = \frac{(Dx)}{a D} \frac{(\alpha) - 1 + (\alpha) (Dx) / (Lx)}{a d + (\alpha) d D d m} \quad (2.84)$$

$$(Lx)_{a m} = \frac{(Dx)}{c D} \frac{(\alpha) - 1 + (\alpha) (Dx) / (Lx)}{c d m + (\alpha) d D d m} \quad (2.85)$$

Se supone que $(Lx)_{e m}, (Lx)_{f m}, \dots = 0$

donde:

- a, b : componentes no clave ligeros
 c : componente clave ligero
 d : componente clave pesado
 e, f : componentes no clave pesados
 m : zona superior de la columna de destilación
 D : flujo de destilado
 (x_a, x_b, x_c) : fracciones mol de componentes a, b, c en el destilado
 R_i : constante de equilibrio líquido-vapor del componente i
 $(\alpha_{ij})_m$: volatilidad relativa del componente i con respecto a j en la zona superior

$$(L x)_d = \frac{(x/x)_d}{d c f} \frac{(D x)_c D}{(\alpha - 1)_{cd}}$$

$(x)_d$, $(x)_c$: fracciones mol de componentes clave pesado y clave ligero en la alimentación

3. Determinar las composiciones aproximadas en la zona inferior de composición constante por

$$(L x)_a = 0, (L x)_b = 0$$

$$(L x)_d = \frac{(B x)_d}{1 - (\alpha)_{dc} + (\alpha)_{dc} (B x)_c / (L x)_c} \quad (2.86)$$

$$(L x)_e = \frac{(B x)_e}{1 - (\alpha)_{ec} + (\alpha)_{ec} (B x)_c / (L x)_c} \quad (2.87)$$

donde:

- p : zona inferior de la columna de destilación
 B : flujo de fondos
 (x_d, x_e) : fracciones mol de componentes d, e en el flujo de fondos
 $(\alpha_{ij})_p$: volatilidad relativa del componente i con respecto de j en la zona inferior

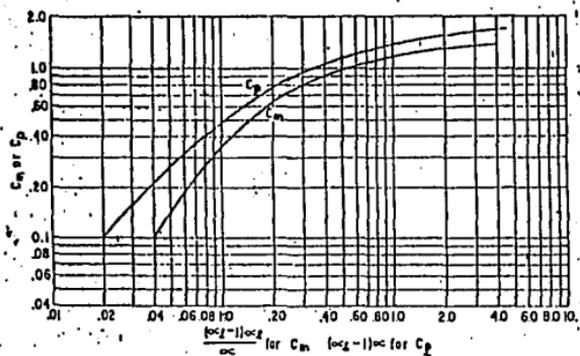


Figura 2.9 Factores de Colburn para reflujo mínimo C_m y C_p .

b) Calcular $(L x)_{c p}$

$$(L x)_{c p} = (L x)_{d m} + (L x)_a + (L x)_b + (L x)_{c m} + F - L \frac{(L x)_d + (L x)_e + (L x)_f}{p} \quad (2.92)$$

donde: F : porción líquida en la alimentación

c) Calcular

$$L_p = (L x)_{c p} + (L x)_d + (L x)_e + (L x)_f \quad (2.93)$$

$$L_m = (L x)_{d m} + (L x)_a + (L x)_b + (L x)_{c m} \quad (2.94)$$

d) Resolver para $(L x)_{d m}$

$$\frac{(L x)_{c p} (L x)_{d m}}{(L x)_{d p} (L x)_{c m}} = \frac{L_p L_m}{(L_p - \sum (C K/K) L x)_d (L_m - \sum (C L x)_m)} \quad (2.95)$$

e) Comparar si $(L x)_{d m}$ supuesta = $(L x)_{d m}$ calculada

sino es así $(L x)_{d m}$ calculada = $(L x)_{d m}$ supuesta y repetir a)

f) Si por el contrario las dos $(L x)_{d m}$ son iguales calcular

$$(L/V)_{\min} = \frac{1}{(1 + D/L_m)} \quad (2.96)$$

$$(L'/V') = \frac{1}{(1 - B/L_p)} \quad (2.97)$$

comparar si $(L/V)_{\min}$ calculado = $(L/V)_{\min}$ supuesto

$$(L'/V')_{\min} \text{ calculado} = (L'/V')_{\min} \text{ supuesto}$$

sino es así repetir desde (1.) con los valores de $(L/V)_{\min}$ y $(L'/V')_{\min}$ calculados.

g) Si $(L/V)_{\min}$ y $(L'/V')_{\min}$ calculados y supuestos son iguales calcular R_{\min} . Con R_{\min} y la ecuación de Fenske determinar N_{\min} . Finalmente, con la ecuación de Gilliland determinar el número de etapas ideales.

CAPITULO TRES

METODOS RIGUROSOS

Los métodos rigurosos permiten obtener soluciones exactas en los problemas de destilación multicomponente, basándose en una mayor información y requiriendo un tiempo de cálculo considerable. En este capítulo se tratarán primero los métodos etapa a etapa y posteriormente los de aproximación sucesiva.

Métodos etapa a etapa.

Estos métodos se aplican en problemas de diseño donde se especifican las siguientes variables: flujo de alimentación, condición térmica y composición del flujo de alimentación, dos especificaciones de los productos (como pureza ó recuperación), presión de la columna y relación de reflujo. El plato de alimentación será aquel que tenga la misma relación de componentes clave (z_{LK}/z_{HK}). Primeramente se estimará la distribución de los componentes y se efectuará el balance de materia para iniciar el cálculo de la zona de rectificación en el destilado el cual puede efectuarse por prueba y error e involucra además de los balances de materia las relaciones de equilibrio, esto se realiza para cada etapa y al concluirse se continúa en la siguiente. El procedimiento finaliza al alcanzarse las condiciones de alimentación. De manera similar se efectúa la determinación del número de etapas en la zona de agotamiento.

3.1 Método de Sorel.

Este método fué desarrollado por M. Sorel (15) en 1893. Su procedimiento de cálculo es el siguiente:

1. Para un condensador total (figura 3.1) la temperatura del plato 1 es calculada como la temperatura del punto de rocío de un vapor que tiene la misma composición del destilado D (por lo que también deben ser determinadas $x_{1,i}$ y $y_{1,i}$). En el caso de un condensador parcial (figura 3.2) se determina la temperatura del producto y del reflujo líquido, que es la temperatura del punto de rocío del vapor D_v .

2. La cantidad de vapor ascendiendo desde el plato 1, es determinada por un balance de materia

$$V_1 = (R+1) D \quad (3.1)$$

3. La carga térmica del condensador es calculada por un balance de entalpía

$$Q_C = L_0 h_0 + D h_D - V_1 H_1 \quad (3.2)$$

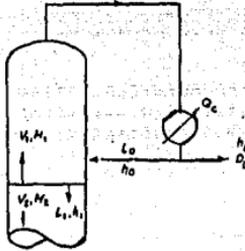


Figura 3.1 Condensador Total.

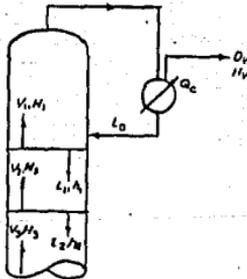


Figura 3.2 Condensador parcial.

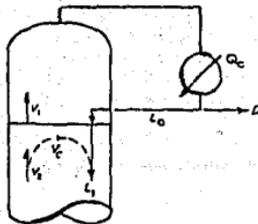


Figura 3.3 Reflujo causado por reflujo líquido subenfriado del condensador.

4. La composición del vapor V_2 se determina por balance de materia y energía. Para un condensador total y un reflujo líquido subenfriado (figura 3.3) V_2 se calcula a partir de las relaciones:

$$V_{c1} \lambda = L_{o1} C_{P1} (T_b - T_R) \quad (3.3)$$

$$V_2 = V_{c1} + V_1; \quad L_{o1} + V_{c1} = L_1 \quad (3.4)$$

$$T_2 = \frac{D C_{P1} (T_b - T_R) - q_D D - V_2 \lambda}{V_2 C_{PV1}} + T_1 \quad (3.5)$$

Donde: T_b : temperatura de burbuja

T_R : temperatura del reflujo subenfriado

V_c : vapor condensándose

Este cálculo de T_2 se realiza asumiendo que los calores molares de la mezcla y las capacidades caloríficas son esencialmente constantes.

Entonces la composición del vapor V_2 será, para un condensador total:

$$V_2 = L_1 + D = V_{c1} + V_1 \quad (3.6)$$

$$V_{2,i} y_i = L_{1,i} x_{1,i} + D_{i,i} x_{D,i} \quad \text{donde } x_{1,i} = y_{1,i} / K_{1,i} \quad (3.7)$$

$$V_{2,i} H_i + q_{D,i} D = L_{1,i} h_{1,i} + D_{i,i} h_{D,i} \quad (3.8)$$

Las entalpías son evaluadas como se señala en el capítulo 1.

Si fuera un condensador parcial:

$$V_1 = L_{o1} + D \quad (3.6a)$$

$$V_{1,i} y_i = L_{o1,i} x_{o1,i} + D_{i,i} x_{D,i} \quad (3.7a)$$

$$V_{1,i} H_i + q_{D,i} D = L_{o1,i} h_{o1,i} + D_{i,i} h_{D,i} \quad (3.8a)$$

5. Determinar la composición de L_2 en el equilibrio con V_2

a T_2 y la presión de la columna calculando las concentraciones de equilibrio

$$x_{2i} = y_{2i} / K_{2i}$$

6. Calcular V_3 utilizando las ecuaciones (3.6) a (3.8).

7. Evaluar la composición de V_3 por balance de materia.

8. Determinar la temperatura de V_3 de forma similar con la ecuación (3.5).

9. Repetir los cálculos plato por plato hasta que la composición del vapor alcanzada se aproxima a la composición de la porción de vapor en la alimentación (ó tomando como referencia las composiciones del líquido).

10. Las cantidades de líquido y vapor bajo el plato de alimentación se calculan como

$$L'_f = L_{f-1} + L_F \quad (3.9)$$

$$V'_{f+1} = V_f - V_F \quad (3.10)$$

11. Calcular la temperatura de punto de burbuja en los fondos.

12. La composición de V'_{n+1} es la composición de equilibrio con B y es calculada por

$$y_{i,n+1} = (K x)_{i,n+1}$$

13. Puesto que las cantidades L'_n y V'_{n+1} son conocidas, la composición de L'_n puede ser determinada por balance de materia.

14. La temperatura del plato n es la temperatura del punto de burbuja de L'_n .

15. Se continúa el cálculo plato por plato, hasta que la razón de los componentes clave en el líquido es igual a la proporción en la alimentación.

Las entalpías y capacidades caloríficas de las mezclas no son muy disponibles y su consideración complica el cálculo. Una suposición razonable es la que los flujos son equimolares y constantes, simplificándose al procedimiento. Esto ha determinado que los métodos que consideran flujos molares constantes sean más utilizados que el método de Sorel(15).

3.2 Método de Lewis-Matheson.

En el método de Lewis-Matheson (14,15) los flujos molares internos se consideran constantes.

El procedimiento se señala a continuación para un condensador total (en el caso de un condensador parcial se consideran balances como los especificados en el método de Sorel):

Sección de rectificación:

1. Determinar la temperatura del punto de rocío con las composiciones del destilado.

2. Obtener los flujos del líquido y vapor

$$L_o = RD$$

$$V = (R + 1)D$$

3. Obtener los flujos individuales de líquido en el plato número uno:

$$l_{i,1} = x_{i,1} L_{i,1} \quad (3.11)$$

$$\text{donde: } L_{i,1} = L_o$$

$x_{i,1}$ = composiciones del líquido obtenidas en el punto de rocío.

4. Obtener los flujos individuales de vapor en el plato dos

$$v_{i,2} = l_{i,1} + d_i$$

en general:

$$v_{i,n+1} = l_{i,n} + d_i \quad (3.12)$$

5. Obtener las composiciones del vapor V_2

$$y_{i,2} = \frac{v_{i,2}}{V_2}$$

6

$$y_{i,n+1} = \frac{v_{i,n+1}}{V_{n+1}} \quad (3.13)$$

6. Con las composiciones del vapor obtener la temperatura

de punto de rocío (T_{n+1}).

7. Obtener ($x_{LK,n+1}/x_{HK,n+1}$).

8. Con las x_i obtenidas calcular los flujos individuales del líquido, obtener los flujos individuales y composiciones de vapor. Continuar con los cálculos hasta que:

$$(x_{LK,n}/x_{HK,n}) \leq (x_{LK,F}/x_{HK,F})$$

Cuando esto ocurra se ha alcanzado la etapa de alimentación.

Sección de agotamiento:

1. Calcular la temperatura de punto de burbuja con las composiciones de salida de los fondos.

2. Obtener los flujos internos de líquido y vapor en agotamiento

$$L'_n = L_o + qF$$

$$V'_n = V_1 + (1 - q)F$$

3. Calcular los flujos individuales de vapor en la última etapa de la torre (primera en agotamiento):

$$v_{i,1} = y_{i,1} V'_n \quad (3.14)$$

$y_{i,1}$ = composiciones en el vapor obtenidas con el punto de burbuja.

4. Obtener los flujos individuales del líquido en la siguiente etapa.

$$l'_{i,2} = v'_{i,1} + b_i$$

ó

$$l'_{i,n+1} = v'_{i,n} + b_i \quad (3.15)$$

5. Determinar las composiciones del líquido:

$$x_{i,2} = l'_{i,2} / L'_2$$

ó

$$x_{i,n+1} = l'_{i,n+1} / L'_{n+1} \quad (3.16)$$

Calcular $(x_{LK,n+1}/x_{HK,n+1})$

6. Con las composiciones del líquido encontradas determinar la temperatura del punto de burbuja. Obtener las composiciones en el vapor.

7. Repetir la secuencia anterior hasta que:

$$(x_{LK,n}/x_{HK,n}) \approx (x_{LK,F}/x_{HK,F})$$

Los verdaderos flujos individuales en el domo y en el fondo se calculan con el método de Bonner (15)

$$\Delta d_i = - \frac{(x_{i,F})_r - (x_{i,F})_b}{(x_{i,F})_r + (x_{i,F})_b} \quad (3.17)$$

$$d_{i,N} = d_i + \Delta d_i \quad (3.18)$$

$$b_{i,N} = b_i - \Delta d_i \quad (3.19)$$

donde: $(x_{i,F})_r$ y $(x_{i,F})_b$ = composiciones del líquido para el componente i calculadas desde el domo y los fondos de la columna, respectivamente.

$d_{i,N}$, $b_{i,N}$ = nuevos valores de d y b

El programa presentado se realizó para una separación con no clave ligeros, componentes clave y componentes no clave pesados. Las constantes de equilibrio líquido-vapor son calculadas por la correlación presentada en el apéndice A.

3.3 Método de Akers-Wade

El método de solución directa de Akers y Wade (3) permite reducir la cantidad de cálculos de prueba y error, por lo que es bastante rápido. Las suposiciones asumidas para el método son las siguientes:

a) La presión de toda la columna es constante (se desprecia la caída de presión por plato).

b) Los flujos molares internos son constantes.

a) Las volatilidades relativas de todos los componentes permanecen constantes en la zona de rectificación y en la zona de agotamiento. Esto implica que las α 's no varían significativamente con la temperatura, por lo que la relación de composiciones de los gases no variará mucho entre el flujo de alimentación y el plato de alimentación.

El procedimiento es el siguiente:

A. Zona de rectificación.

1. Determinar el balance de materia alrededor de la columna incluyendo el reflujo L_0 , producto del destilado D , producto de fondos B .

a) Con un condensador total, la composición del reflujo es igual a la composición del producto de destilado condensado.

b) Con un condensador parcial el producto D es un vapor, de esta manera se debe calcular una temperatura del punto de rocío en base a sus fracciones mol para obtener la composición del reflujo líquido.

2. Determinar la temperatura del domo mediante el cálculo del punto de rocío en el vapor V_1 . Para un condensador total su composición es la misma que en el producto de destilado. Para un condensador parcial determinar la temperatura del punto de rocío para el vapor V_1 , con las composiciones determinadas mediante un balance de materia.

3. Determinar $(x_{2,i}/x_{2,HK})$ para cada componente, usando los valores de x para el reflujo como $x_{n-1,i}$ iniciales.

$$\left(\frac{x_{i, HK}}{x_{i, n}} \right) = \frac{1}{\alpha_i} \left\{ \frac{R x_{n-1,i} + x_{D,i}}{R x_{n-1, HK} + x_{D, HK}} \right\} \quad (3.21)$$

α_i = volatilidad relativa del componente i en rectificación (promedio).

4. Evaluar $\sum (x_{i, HK}/x_{i, n})$. Esto es igual a $1/x_{n, HK}$.

5. Determinar $x_{n,i}$ para cada componente por:

$$x_{n,i} = \frac{\left(\frac{x_{i, HK}}{x_{i, n}} \right)}{\sum \left(\frac{x_{i, HK}}{x_{i, n}} \right)} \quad (3.22)$$

Esta es la composición del líquido sobre el plato.

6. Continuar hacia abajo de la columna usando la composición calculada para el plato mediante la ecuación (3.21) para obtener $(x_i/x_{HK})_n$ para el plato de abajo.

7. Asegurarse que las α_i no varíen significativamente.

8. Continuar con los cálculos hasta que la relación de los componentes clave $(x_{LK}/x_{HK})_n$ sea igual o menor a la relación en la alimentación. Este es considerado entonces el plato de alimentación.

B. Zona de agotamiento.

1. Determinar la temperatura del punto de burbuja de los fondos y la composición del vapor V'_n . Calcular la volatilidad relativa de los componentes respecto al componente clave pesado a esta temperatura.

2. Calcular $(y_i/y_{HK})_n$ para el primer plato en la zona de agotamiento

$$(y_i/y_{HK})_n = \alpha_i \frac{(V'_n/B) y_{n+1,i} + x_{B,i}}{(V'_n/B) y_{n+1,HK} + x_{B,HK}} \quad (3.23)$$

3. Evaluar $\sum (y_i/y_{HK})_n$ para obtener $1/y_{n,HK}$.

4. Calcular y_i para la primera etapa

$$y_{n,i} = \frac{(y_i/y_{HK})_n}{\sum (y_i/y_{HK})_n} \quad (3.24)$$

5. Calcular $(y_i/y_{HK})_n$ para la siguiente etapa, usando los valores de y_i de la etapa $l(n+1)$ en la ecuación para resolver $(y_i/y_{HK})_n$. Obtener $(x_i/x_{HK})_n$

$$(x_i/x_{HK})_n = \frac{(y_i/y_{HK})_n}{\alpha_i} \quad (3.25)$$

Se alcanza la etapa de alimentación cuando

$$(x_i/x_{HK})_n \geq (x_i/x_{HK})_F \quad (3.26)$$

Continuar con los cálculos hasta llegar a esta condición. Es necesario asegurarse de que no haya variaciones significativas en las α_i con la temperatura de cada plato.

El número total de etapas teóricas es la suma de las obtenidas en los cálculos de rectificación mas los de agotamiento y el plato de alimentación. Esto no incluye al rehervidor ni al condensador parcial.

Métodos de aproximación sucesiva.

En los métodos de aproximación sucesiva se especifican como variables:

- | | |
|---|------------------|
| 1) Número total de platos en la columna | N |
| 2) Flujo de alimentación | F |
| 3) Condición térmica ó temperatura de alimentación | q ó T
F |
| 4) Composición del flujo de alimentación | $C-1$ |
| 5) Presión de la columna | P |
| 6) Relación de reflujo | R |
| 7) Una especificación en el destilado (como flujo total de destilado) | D |
| 8) Plato de alimentación | f |

Con estas variables se especifica totalmente el problema.

3.4 Método de Thiele-Geddes.

Para las condiciones de operación en estado estacionario el método de Thiele-Geddes permite encontrar las composiciones de los productos de la parte superior y del fondo de la columna. Las ecuaciones requeridas para representar este sistema fueron dadas en (1.1).

En la figura (3.4) se encuentra una representación esquemática de los balances de materia y energía por componente, mientras que el comportamiento en el plato de alimentación se muestra en la figura (3.5).

Los balances de materia y entalpía pueden ser representados por las líneas de contorno mostradas en la figura (3.4). Como en el caso de balances de materia para cualquier componente, el número de balances de energía independientes es igual a $(2C + 3)(N + 2)$ tomándose como variables independientes para su resolución las temperaturas que es en lo que consiste el método de Thiele-Geddes. Sin embargo el simple hecho de escoger las variables independientes no describe suficientemente el procedimiento de cálculo.

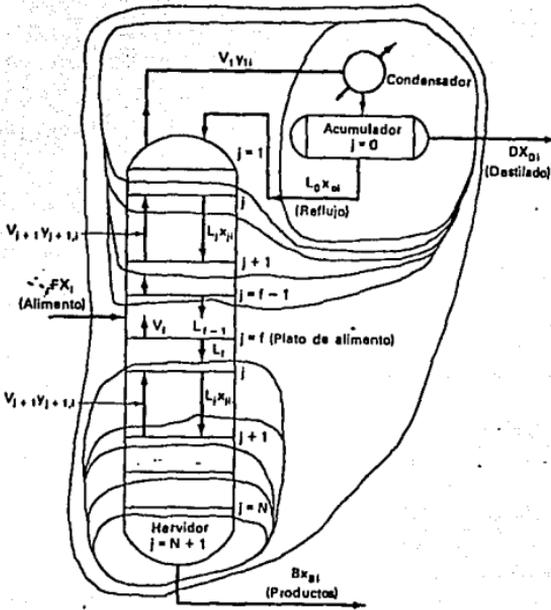


Figura 3.4. Representación de los balances de materia por componente dados por la ecuación (1.1).

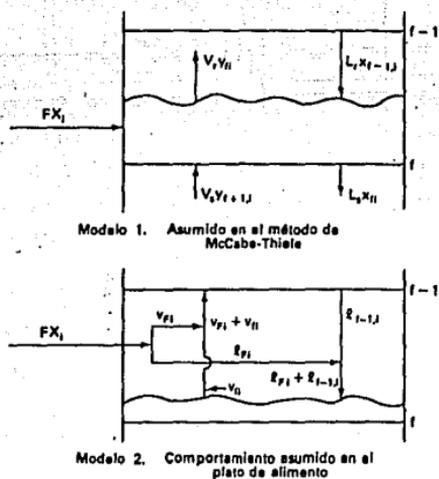


Figura 3.5 Modelos de comportamiento del plato de alimentación.

En la solución de un conjunto de ecuaciones no lineales por medio de técnicas iterativas, la convergencia ó divergencia de un procedimiento de cálculo depende no solamente de la elección inicial de las variables independientes sino también del orden preciso y arreglo de cada ecuación del conjunto.

En la solución del balance de materia y relaciones de equilibrio los siguientes dos procedimientos propuestos han demostrado ser competentes.

Formulación de los balances de materia por componentes y relaciones de equilibrio como matriz tridiagonal.

El desarrollo del procedimiento de cálculo es iniciado con la reformulación del balance de materia por componente y las relaciones de equilibrio en forma de matriz tridiagonal.

En el caso de balances de materia por componente se introduce un nuevo grupo de variables, la velocidad de flujo por componente en las fases de vapor y líquido, así,

$$v_{j,i} = V y_{j,i} \quad \text{y} \quad l_{j,i} = L x_{j,i} \quad (3.27)$$

También la velocidad de flujo del componente i en el destilado y fondo son representados por,

$$d_i = D x_{D,i} \quad \text{y} \quad b_i = B x_{B,i} \quad (3.28)$$

y la velocidad de flujo del componente i en las fracciones de vapor y líquido de la alimentación se representan por

$$v_{F,i} = V y_{F,i} \quad \text{y} \quad l_{F,i} = L x_{F,i} \quad (3.29)$$

La expresión $y_{j,i} = K_{j,i} x_{j,i}$ puede reformularse como

$$V y_{j,i} = (V K_{j,i} / L) L x_{j,i} \quad (3.30)$$

y de la ecuación (3.27) se tiene

$$v_{j,i} = S l_{j,i} \quad \text{y} \quad l_{j,i} = A_{j,i} v_{j,i} \quad (3.31)$$

donde $A_{j,i} = 1/S = L / K_{j,i} V$

En lugar de las líneas de contorno que incluyen los extremos de la columna y los platos respectivos en cada sección de la columna como lo mostrado en la figura (1.1), se obtiene un grupo equivalente de ecuaciones de balance de materia al encerrar cada plato ($j = 0, 1, 2, \dots, N, N + 1$) por un balance de

materia del componente como se muestra en la figura (3.4).

Los balances de materia correspondiente para cada componente i son los siguientes:

$$\begin{aligned}
 -l_{0,i} - d_i + v_{1,i} &= 0 \\
 l_{j-1,i} - v_{j,i} - l_{j,i} + v_{j+1,i} &= 0 \quad (1 \leq j \leq f-2) \\
 l_{f-2,i} - v_{f-1,i} - l_{f-1,i} + v_{f,i} &= -v_{f,i} \\
 l_{f-1,i} - v_{f,i} - l_{f,i} + v_{f+1,i} &= -l_{f,i} \\
 l_{j-1,i} - v_{j,i} - l_{j,i} + v_{j+1,i} &= 0 \quad (f-1 \leq j \leq N) \\
 l_{N,i} - v_{N+1,i} - b_i &= 0
 \end{aligned} \tag{3.32}$$

Excepto para la primera expresión de la ecuación (3.32) los $l_{j,i}$ pueden eliminarse utilizando la relación de equilibrio de la ecuación (3.31). Para el caso de un condensador total, $l_{0,i}$ y d_i tienen la misma composición, entonces,

$$l_{0,i} = \left\{ \frac{L_0}{D} \right\} d_i \tag{3.33}$$

$$\text{luego } l_{0,i} = A_{0,i} d_i \tag{3.34}$$

donde $A_{0,i} = L_0/D$ para el condensador total.

Una expresión equivalente para el hervidor puede establecerse de la siguiente manera:

$$y_{N+1,i} \frac{V_{N+1}}{N+1} = \left\{ \frac{v_{N+1,i} K_{N+1,i}}{B} \right\} x_{B,i}$$

ó

$$b_i = A_{N+1,i} \frac{v_{N+1,i}}{N+1,i} \tag{3.35}$$

$$\text{donde } A_{N+1,i} = \frac{B}{K_{N+1,i} \frac{V_{N+1}}{N+1}}$$

Quando los $l_{j,i}$ y b_i se eliminan de la ecuación (3.32) por medio de las ecuaciones (3.31), (3.33), (3.34) y (3.35) se obtienen los siguientes resultados.

Balances de materia y relaciones de equilibrio.

$$-(A_{0,i} + 1)d_i + v_{1,i} = 0$$

$$A_{j-1,i} v_{j-1,i} - (A_{j,i} + 1)v_{j,i} + v_{j+1,i} = 0; \quad 1 \leq j \leq f-2$$

$$A_{f-2,i} v_{f-2,i} - (A_{f-1,i} + 1)v_{f-1,i} + v_{f,i} = -v_{f,i} \quad (3.36)$$

$$A_{f-1,i} v_{f-1,i} - (A_{f,i} + 1)v_{f,i} + v_{f+1,i} = -v_{f,i}$$

$$A_{j-1,i} v_{j-1,i} - (A_{j,i} + 1)v_{j,i} + v_{j+1,i} = 0; \quad f+1 \leq j \leq N$$

$$A_{N,i} v_{N,i} - (A_{N+1,i} + 1)v_{N+1,i} = 0$$

Este grupo de ecuaciones puede formularse en forma de matriz

$$A_{i,i} v_i = b_i \quad (3.37)$$

donde

$$- \rho_{0,i} \quad 1 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0$$

$$A_{0,i} \quad - \rho_{1,i} \quad 1 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0$$

$$0 \quad 0 \quad A_{f-2,i} \quad - \rho_{f-1,i}$$

$$0 \quad 0 \quad 0 \quad A_{f-1,i} \quad - \rho_{f,i} \quad 1 \quad 0 \quad 0$$

$$0 \quad \dots \quad 0 \quad A_{N-1,i} \quad - \rho_{N,i} \quad 1$$

$$0 \quad \dots \quad 0 \quad 0 \quad A_{N,i} \quad - \rho_{N+1,i}$$

$$v_i = [d_{v,1,i} \quad v_{1,i} \quad \dots \quad v_{f-1,i} \quad f_{f,i} \quad \dots \quad v_{N,i} \quad N_{N+1,i}]^T$$

$$d_i = [0 \quad 0 \quad 0 \quad \dots \quad v_{f,i} \quad l_{f,i} \quad \dots \quad 0 \quad 0]^T$$

$$e_{j,i} = A_{j,i} - 1$$

El método con la suposición de unas temperaturas T_j y unas velocidades de vapor V_j de las cuales se obtienen las correspondientes velocidades de los líquidos L_j utilizando el balance total de materia presentado más adelante, esta selección en particular de variables independientes fue propuesta primero por Thiele y Geddes. En base a las temperaturas asumidas y a los flujos totales los factores de absorción $A_{j,i}$ que aparecen en la ecuación (3.37) pueden evaluarse para el componente i en cada plato j . Puesto que la matriz A_i en la ecuación (3.37) es de la forma tridiagonal, esta ecuación matricial puede resolverse para los valores de las velocidades de vapor para el componente i , (representado por $(v_{j,i})$) utilizando el algoritmo de Thomas. Considere las siguientes ecuaciones lineales en las variables x_0, x_1, \dots, x_{N+1} cuyos coeficientes forman una matriz tridiagonal

$$\begin{array}{ccccccc} Bx & + & Cx & = & D \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{array}$$

$$\begin{array}{ccccccc} Ax & + & Bx & + & Cx & = & D \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 2 & 1 \end{array}$$

$$\begin{array}{ccccccc} Ax & + & Bx & + & Cx & = & D \\ 2 & 1 & 2 & 2 & 2 & 3 & 2 \end{array}$$

.....

$$\begin{array}{ccccccc} Ax & + & Bx & + & Cx & = & D \\ N & N-1 & N & N & N & N+1 & N \end{array}$$

$$\begin{array}{ccccccc} Ax & + & Bx & = & D \\ N & N & N+1 & N+1 & N+1 \end{array}$$

Las siguientes fórmulas de recurrencia son aplicadas en el orden establecido:

$$f_0 = C/B, \quad g_0 = D/B$$

$$f_k = C / (B - A f_{k-1}) \quad (k = 1, 2, \dots, N)$$

$$g_k = (D - A g_{k-1}) / (B - A f_{k-1}) \quad (k = 1, 2, \dots, N-1)$$

Después de que se han calculado las f y las g , los valores de x_{N+1} , x_N , ..., x_1 , x_0 se calculan como sigue:

$$v_{N+1} = g_{N+1}$$

$$x_k = g_k - f_k x_{k+1} \quad (k = N, N+1, \dots, 2, 1, 0)$$

Posteriormente de que estas fórmulas recurrentes han sido aplicadas para cada componente i y se hayan encontrado todas las velocidades de vapor ($v_{j,i}$)ca mediante la ecuación (3.31) se encuentran las correspondientes velocidades del líquido ($l_{j,i}$)co. Estas velocidades de flujo ya calculadas son utilizadas en el método de convergencia.

Solución de los balances de materia por componentes y relaciones de equilibrio por medio de ecuaciones encadenadas.

Las ecuaciones de interés se obtienen escribiendo primero la ecuación (1.1) en función de los flujos del componente:

$$v_{j+1,i} = l_{j,i} + d_i \quad 0 \leq j \leq f-2$$

$$v_{f,i} + v_{f-1,i} = l_{f-1,i} + d_i \quad (3.38)$$

$$v_{j+1,i} = l_{j,i} - b_i \quad f \leq j \leq N$$

La eliminación de $l_{j,i}$ de la primera expresión de la ecuación (3.38) por medio de las relaciones de equilibrio $l_{j,i} = A_{j,i} v_{j,i}$ produce la siguiente expresión:

$$\frac{v_{j+1,i}}{d_i} = A_{j,i} \left\{ \frac{v_{j,i}}{d_i} \right\} + 1 \quad (j=1, 2, \dots, f-1) \quad (3.39)$$

Para $j=0$ (condensador) y para un condensador total la primera expresión de la ecuación (3.38) se convierte en:

$$\frac{v_{1,i}}{d_i} = \frac{l_{0,i}}{d_i} + 1 = \frac{L_{0,i} x_{0,i}}{D x_{D,i}} + 1 = \frac{L_{0,i}}{D} + 1 \quad (3.40)$$

puesto que $x_{0,i} = x_{D,i}$.

Mediante la aplicación de las ecuaciones (3.39) y (3.40), los cálculos se inician en la parte superior de la columna y continúan hasta el plato de alimentación. Para el caso de alimentación líquida en el punto de ebullición y alimentación subenfriada se suspenden tan pronto como se obtiene $v_{f,i}/d_i$ según discusión que se verá más adelante.

Las ecuaciones encadenadas para la sección de agotamiento se inician en el rehervidor. Puesto que $y_{N+1,i} = K_{N+1,i} x_{N+1,i} = K_{N+1,i} x_{N+1,i} \times B_{N+1,i}$ ó $y_{N+1,i} = S_{N+1,i} x_{N+1,i}$ el balance de materia por componente incluyendo el rehervidor se reduce a

$$\frac{l_{N,i}}{b_i} = \left\{ \frac{S_{N+1,i}}{b_i} \right\} b_i + 1 = S_{N+1,i} + 1 \quad (3.41)$$

donde $S_{N+1,i} = B/(V_{N+1} \times K_{N+1,i})$.

Después que se ha obtenido $l_{N,i}/b_i$ éste se utiliza para calcular $l_{N-1,i}/b_i$ mediante la siguiente ecuación que es obtenida al eliminar $v_{j+1,i}/b_i$ de las expresiones ($f \leq j \leq N$) de la ecuación (3.40) mediante la relación de equilibrio $v_{j,i} = S_{j,i} x_{j,i}$, es decir,

$$\frac{l_{j,i}}{b_i} = S_{j+1,i} \left\{ \frac{l_{j+1,i}}{b_i} \right\} + 1 \quad (3.42)$$

lo cual se aplica para $j = f, f+1, \dots, N-1$.

Después de que se ha calculado $l_{f,i}/b_i$, se suspenden los cálculos encadenados y la cantidad $v_{f,i}/b_i$ se calcula mediante la relación de equilibrio

$$\frac{v_{f,i}}{b_i} = S_{f,i} \left\{ \frac{l_{f,i}}{b_i} \right\}$$

Para el caso de un alimento líquido en el punto de ebullición ó alimento subenfriado, $v_{f,i} = 0$, $l_{f,i} = F \times z_i$ y por lo tanto las moles de vapor que entran al plato $f-1$ son iguales a las moles de vapor que salen del plato f . Por consiguiente, b_i/d_i puede ser calculado a partir de valores numéricos encontrados para f_i/d_i y f_i/b_i , por medio de cálculos encadenados, de la siguiente manera:

$$\frac{b_i}{d_i} = \frac{v_{f,i} / d_i}{v_{f,i} / b_i} \quad (3.43)$$

El balance total de materia por componente para la ecuación (3.38) puede resolverse para d_i en función de b_i/d_i de la siguiente manera

$$F z_i = d_i (1 - b_i/d_i) \quad \text{y} \quad d_i = F z_i / (1 - b_i/d_i) \quad (3.44)$$

Después de que se ha obtenido d_i , pueden obtenerse fácilmente todos los flujos por componente b_i , $v_{j,i}$, $l_{j,i}$, a partir de los resultados calculados previamente.

Para el caso general de un alimento vaporizado parcialmente, la expresión para calcular b_i/d_i se obtiene comenzando con la segunda expresión de la ecuación (3.38) y reorganizando da:

$$\begin{pmatrix} v_{f,i} \\ b_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_i \\ d_i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} v_{F,i} \\ F z_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F z_i \\ d_i \end{pmatrix} = \frac{l_{f-1,i}}{d_i} + 1 \quad (3.45)$$

Puesto que:

$$v_{f,i} / F z_i = 1 - l_{f-1,i} / F z_i \quad \text{y} \quad (F z_i / d_i) = 1 + b_i/d_i$$

La ecuación (3.45) puede resolverse para b_i/d_i como sigue

$$\frac{b_i}{d_i} = \frac{(1 - l_{f-1,i} / F z_i) + (1 - l_{f-1,i} / F z_i)}{(v_{f,i} / b_i) + (v_{F,i} / F z_i)} \quad (3.46)$$

Cuando se emplean valores apropiados para $l_{f-1,i}$ y $v_{F,i}$, puede utilizarse la ecuación (3.46) para calcular b_i/d_i para una alimentación a cualquier condición térmica. Para un líquido en el punto de burbuja y alimentos subenfriados $l_{f-1,i} = F z_i$ y $v_{F,i} = 0$. Para alimentación que entra a la columna en el punto de rocío y vapores recalentados, $v_{F,i} = F z_i$ y $l_{f-1,i} = 0$.

3.5 Métodos de convergencia del conjunto de temperaturas.

En la determinación de un nuevo conjunto de temperaturas en la columna puede recurrirse a los siguientes métodos.

Método de iteración directa.

En este método las composiciones molares en el vapor son calculadas para cualquier plato j en la zona de rectificación mediante:

$$y_{j,i} = \frac{(v_{j,i}/d_i)ca_i (d_i)ca_i}{\sum_{i=1}^C (v_{j,i}/d_i)ca_i (d_i)ca_i} \quad (3.47)$$

Si $\sum y_{j,i} = 1$, la temperatura asumida en el plato es satisfactoria, si no, se obtiene una nueva temperatura ajustando proporcionalmente las (y_i) hasta que su suma sea uno y se calcula la temperatura del punto de rocío.

Para verificar la temperatura en un plato en la sección de agotamiento se obtiene:

$$x_{j,i} = \frac{(l_{j,i}/d_i)ca_i (d_i)ca_i}{\sum_{i=1}^C (l_{j,i}/d_i)ca_i (d_i)ca_i} \quad (3.48)$$

para todos los componentes en el plato j .

Si $\sum x_{j,i} = 1$, la temperatura es correcta. Si no, las $x_{j,i}$ se ajustan para que la suma sea uno y se calcula la temperatura del punto de burbuja.

El perfil de temperatura no sólo debe ser congruente con el equilibrio líquido-vapor existente en cada plato ($\sum x_{j,i} = 1$, $\sum y_{j,i} = 1$) si no también satisfacer la especificación del valor de D . Si el perfil de temperaturas asumido es demasiado alto el valor calculado de D será mayor que el especificado; y si el perfil de temperaturas asumido es demasiado bajo el valor de D será menor que el especificado.

3.6 Método θ de convergencia.

En esta aplicación el promotor de convergencia θ es utilizado para corregir las fracciones molares empleadas en la determinación de un nuevo perfil de temperaturas recurriendo al método K_b ó al de Newton. Los flujos individuales son seleccionados en forma tal que estén en concordancia con el balance total de materia y el valor especificado de D ; esto es:

$$Fz_i = (d_i)co_i + (b_i)co_i \quad (3.49)$$

y

$$\sum_{i=1}^C (d_i)_{co} = 1 \quad (3.50)$$

Ambas condiciones quedan satisfechas mediante una adecuada elección del multiplicador θ , que queda definido por:

$$\left\{ \frac{b_i}{d_i} \right\}_{co} = \theta \left\{ \frac{b_i}{d_i} \right\}_{ca} \quad (3.51)$$

(Los subíndices co y ca , corresponden respectivamente a los valores corregidos y calculados).

Eliminando $(b_i/d_i)_{ca}$ de las ecuaciones (3.49) y (3.51) se obtiene la siguiente expresión para $(d_i)_{co}$,

$$(d_i)_{co} = \frac{F z_i}{1 + \theta (b_i/d_i)_{ca}} \quad (3.52)$$

Como la suma de los valores de $(d_i)_{co}$ debe ser igual al valor especificado de D , el valor deseado de θ es aquel de θ que hace $g(\theta) = 0$, donde

$$g(\theta) = \sum_{i=1}^C (d_i)_{co} - D \quad (3.53)$$

Una gráfica de la función $g(\theta)$ puede ser observada en la figura (3.6).

Si θ es determinada por el método de Newton se necesitará la primera derivada $g'(\theta)$,

$$g'(\theta) = - \sum_{i=1}^C \frac{(b_i/d_i)_{ca} F z_i}{(1 + (b_i/d_i)_{ca})^2} \quad (3.54)$$

Una vez obtenido el valor de θ deseado, $(b_i)_{co}$ puede ser calculado con la ecuación (3.51).

Las fracciones molares corregidas para las fases líquida y vapor se calculan como sigue:

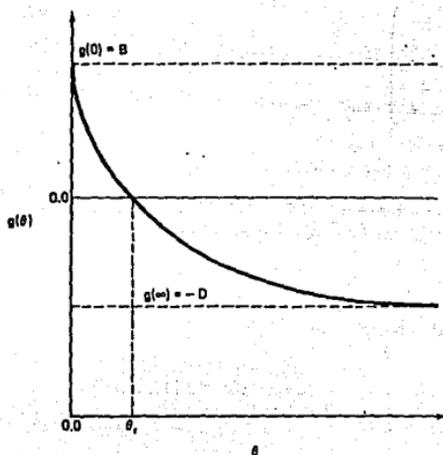


Figura 3.6 Representación geométrica de la función $g(\theta)$ en la vecindad de la raíz positiva.

$$\begin{aligned}
 x_{j,i} &= \frac{(l_{j,i} / d_i) c_{a,i} (d_i) c_{o,i}}{\sum_{i=1}^C (l_{j,i} / d_i) c_{a,i} (d_i) c_{o,i}} \\
 y_{j,i} &= \frac{(v_{j,i} / d_i) c_{a,i} (d_i) c_{o,i}}{\sum_{i=1}^C (v_{j,i} / d_i) c_{a,i} (d_i) c_{o,i}}
 \end{aligned}
 \tag{3.55}$$

3.7 Método T de convergencia.

En este procedimiento se utiliza como promotor de convergencia a la temperatura del plato de alimentación. El método puede ser formulado como sigue: los factores de separación $S_{j,i}$ ($j \neq f$), supuestos invariables dentro de la columna, permiten encontrar la temperatura en el plato de alimentación, y los factores $S_{f,i}$ correspondientes, de acuerdo a la especificación D.

Primeramente, se introducen los factores globales de separación en las zonas de rectificación y agotamiento:

$$l_{f-1,i} = \alpha_i y_{f,i} V$$

$$d_i = \epsilon_i y_{f,i} V$$

$$v_{f-1,i} = \beta_i x_{f,i} L$$

$$\text{donde } \alpha_i + \epsilon_i = 1.0$$

y los factores de separación (α, ϵ, β) son función de las $S_{j,i}$ conocidas

$$\alpha_i = l_{f-1,i} / v_{f,i}$$

$$\epsilon_i = d_i / v_{f,i}$$

$$\beta_i = v_{f+1,i} / l_{f,i}$$

Por lo tanto, deben resolverse las siguientes ecuaciones: balance de materia de componentes alrededor de la etapa f , relaciones de equilibrio y especificación del destilado. En

términos de las diferencias de las ecuaciones, para $i = 1, 2, \dots, C$, se tiene:

$$f_{1,i} = F_i - (1-\alpha)y_i - V_i - (1-\beta)x_i - L_i = 0$$

$$f_{2,i} = y_i - K_{f,i} x_i = 0$$

$$f_3 = \sum_{i=1}^C E_i y_i - V - D = 0$$

Este sistema puede ser resuelto por la linearización de acuerdo al método de Newton-Raphson, su formulación linearizada puede ser expresada analíticamente en términos de incrementos de las variables desconocidas:

$$\delta T = \frac{-f_3 + V \sum_{i=1}^C E_i f_{2,i} \left(1 - \frac{K_{f,i} V (1-\alpha)}{DEN_i}\right) - V \sum_{i=1}^C \frac{E_i K_{f,i} f_{1,i}}{DEN_i}}{\sum_{i=1}^C E_i x_i \frac{\partial K_{f,i}}{\partial T} \left(1 - \frac{K_{f,i} V (1-\alpha)}{DEN_i}\right)}$$

$$\delta x_{f,i} = \frac{f_{1,i} + f_{2,i} V (1-\alpha) - x_i \frac{\partial K_{f,i}}{\partial T} V (1-\alpha) T}{DEN_i}$$

$$\delta y_{f,i} = -f_{2,i} + K_{f,i} \delta x_{f,i} + x_i \frac{\partial K_{f,i}}{\partial T} \delta T$$

$$DEN_i = L_i (1-\beta) + K_{f,i} V (1-\alpha) \quad (T \text{ en } ^\circ R)$$

El resultado de las ecuaciones anteriores es una nueva temperatura efectiva del plato de alimentación, por tanto también nuevos valores de $K_{f,i}$ y nuevos factores de separación δf_i . Las fracciones molares corregidas se calculan de acuerdo a las ecuaciones en (3.55).

Determinación de mejores valores para flujos totales por el método de composición constante.

En el método de composición constante, uno de los flujos totales (V_j ó L_j) es eliminado de cada balance de entalpía dado por la ecuación (1.1) utilizando uno de los balances de materia por componente dado por la ecuación (1.1). Para ilustrar el desarrollo considere los balances de entalpía que encierran cualquier plato j de la sección de rectificación.

$$V_{j+1} H_{j+1} = L_j h_j + DH_j + Q_D \quad (1 \leq j \leq f-2) \quad (3.56)$$

El flujo total V_{j+1} se elimina de la ecuación (3.56) utilizando el balance de materia por componente que encierra el plato j

$$v_{j+1,i} = l_{j,i} + d_i \quad (1 \leq j \leq f-2)$$

por consiguiente:

$$\begin{aligned} V_{j+1} H_{j+1} &= \sum_{i=1}^C H_{j+1,i} v_{j+1,i} = \sum_{i=1}^C H_{j+1,i} (l_{j,i} + d_i) \\ &= L_j \sum_{i=1}^C H_{j+1,i} x_{j,i} + D \sum_{i=1}^C H_{j+1,i} D_{i,j} \\ &= L_j H(x_{j,j+1}) + DH_{j+1} \end{aligned} \quad (3.57)$$

$$\text{donde: } H(x_{j,j+1}) = \sum_{i=1}^C H_{j+1,i} x_{j,i}$$

$$DH_{j+1} = \sum_{i=1}^C H_{j+1,i} D_{i,j}$$

eliminando $V_{j+1} \times H_{j+1}$ de las ecuaciones (3.56) y (3.57):

$$L_j = \frac{D(H_{j+1} - H(x_{j,j+1})) + Q_D}{(H(x_{j,j+1}) - h_j)} \quad (1 \leq j \leq f-2) \quad (3.58)$$

En forma análoga:

$$L_{f-1} = \frac{D(H_{Df} - H(x)_{Df}) + V_f(H(y)_{Ff} - H) + Q_c}{(H(x)_{f-1} - h_{f-1})} \quad (3.59)$$

y

$$Q_c = L_o(H(x)_{O1} - h_o) + D(H(x)_{D1} - H) \quad (3.60)$$

Los flujos en la sección de agotamiento pueden ser determinados utilizando los balances de entalpía que encierran la parte superior ó el fondo de la columna. Cuando se incluye el rehervidor, las fórmulas se derivan de manera análoga a la demostrada arriba.

$$V_{j+1} = \frac{B_j(h(x)_{Bj} - h) + Q_R}{(H_{j+1} - h(y)_{j+1})} \quad (f \leq j \leq N) \quad (3.61)$$

donde: $h(x)_{Bj} = \sum_{i=1}^C h_{j,i} x_{B,i}$

$$h(y)_{j+1} = \sum_{i=1}^C h_{j+1,i} y_{j+1,i}$$

La energía del rehervidor QR se encuentra utilizando la última expresión dada por la ecuación (1.1).

Después que se han determinado las L_j para rectificación y las V_j para agotamiento se pueden determinar los flujos totales restantes por medio de la siguiente ecuación:

$$V_{j+1} = L_j + D \quad (0 \leq j \leq f-2)$$

$$V_f + V_{Ff} = L_{f-1} + D \quad (3.62)$$

$$L_j = V_{j+1} + B \quad (f \leq j \leq N)$$

$$F = D + B$$

Los valores más recientes de las variables $(T_{j,n+1})$, $(V_{j,n+1})$ y $(L_{j,n+1})$ son utilizados para realizar la iteración siguiente.

3.8 Secuencia de cálculo propuesta.

Tras asumir las temperaturas T_j y los flujos totales en la columna, es necesario obtener los flujos individuales del líquido y vapor. Se ha encontrado que el uso del algoritmo de Thomas y las ecuaciones encadenadas proporcionan idénticos resultados aunque, éstas implican un procedimiento más sencillo y de mayor rapidez, por lo que su uso es más recomendable.

Entre los métodos de convergencia de temperatura, el método de iteración directa es el que requiere mayor número de pruebas para lograr el ajuste a la especificación del destilado D . En cambio el uso del promotor de convergencia THETA no sólo requiere un menor número de pruebas si no que se aplica a la mayoría de los problemas de columnas convencionales. Finalmente, el método T no es aplicable a la generalidad de las mezclas y presenta grandes oscilaciones. Por lo antes discutido el método más recomendable es el método de convergencia THETA.

De esta manera la secuencia de cálculo propuesta es la siguiente:

1. Asumir las temperaturas T_j y las velocidades de vapor V_j (Encontrar las velocidades de los líquidos L_j con (3.62)).
2. En base a las temperaturas y velocidades de flujo asumidas calcular los flujos de cada componente i por medio de las ecuaciones encadenadas.
3. Hallar $\theta(0)$ que hace $f(\theta) = 0$. (El método de Newton siempre converge al θ deseado cuando el primer valor asumido de θ se toma como uno).
4. Usar la ecuación (3.55) para calcular las $x_{j,i}$ corregidas para cada componente i y plato j .
5. Usar los resultados del inciso anterior para calcular las $K_{j,i}$ y evaluar las nuevas temperaturas con el método de Newton.
6. Usar los resultados de los incisos (4) y (5) para calcular los nuevos flujos totales V_j y L_j por medio de las ecuaciones (3.58) hasta (3.62).
7. Si θ , las T_j y las V_j están dentro de las tolerancias especificadas, entonces se ha alcanzado la secuencia; si no, repetir desde el inciso (2) hasta (6) en base a los T_j y V_j más recientes.

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

CAPITULO 4
EJEMPLOS DE APLICACION

Con el propósito de establecer una comparación directa entre los métodos expuestos se proponen algunos problemas de destilación multicomponente que serán resueltos por cada uno de ellos. El hecho de resolver varios problemas y estudiar sus diversos resultados no constituye un criterio suficiente para determinar la validez de un método por lo que se aabe recurrir al análisis de sus suposiciones, características y referencias bibliográficas sobre su aplicabilidad.

4.1 Problema propuesto 1.

Una mezcla de hidrocarburos debe fraccionarse de modo que la recuperación del n-butano sea del 82% en el destilado y la del n-pentano sea del 82% en el fondo. Se empleará un condensador total y el destilado saldrá como líquido saturado. La presión de operación es de 300 psias. La relación de reflujo utilizada será de uno. La mezcla se alimenta en el punto de burbuja ($TF=707.83 R$). Se supone que la alimentación está en el plato óptimo.

Datos:

componente	z_i	$\bar{\alpha}_i x$
C1 Propano	0.25	4.4636
C2 n-Butano	0.25	2.1000
C3 n-Pentano	0.25	1.0000
C4 n-hexano	0.25	0.4731

Variables:

- Flujo de alimentación	1
- Recuperaciones de LR y HK	2
- Condición térmica de alimentación	1
- Presión	1
- Relación de reflujo	1
- Plato óptimo de alimentación	1
- Composición del flujo de alimentación.	c-1

Solución:

Balace de Materia.

(x) Promedio entre las condiciones del domo, alimentación y fondos.

Se calcula la distribución de los componentes en el domo y en el fondo de la columna utilizando la ecuación de Hengstebeck-Geddes (ec. 2.1) obteniéndose:

Componente	XD	XB
C1	0.49496	4.98 E-3
C2	0.40995	0.09
C3	0.09	0.41
C4	0.0051	0.495

con estos datos podemos establecer el siguiente balance de materia

Base : 100 lbmol/hr

componentes	z _i	d _i	b _i	x D _i	x B _i
C1	0.25	25	0	0.50	0
C2	0.25	20.5	4.5	0.41	0.09
C3	0.25	4.5	20.5	0.09	0.41
C4	0.25	0	25	0	0.50
		D=50	B=50	1.00	1.00

METODO RUFEM

2. Cálculo del número mínimo de platos teóricos por la ecuación de Fenske (2.10).

$$N_{min} = 4.09 \text{ etapas}$$

3. Cálculo del reflujo mínimo.

Calculando ϕ por el método de Ripps (12) (ecuaciones (2.21), (2.22), (2.23), (2.24), (2.25)).

$$\phi = 1.2917$$

y con la ecuación (2.19).

$$R_{min} = 0.46$$

4. Cálculo del número de etapas ideales.

Empleando las ecuaciones (2.74) ó las figuras (2.5) ó (2.6).

$$N = 7.38 \text{ platos.}$$

5. Localización del plato de alimentación.

Utilizando la ecuación (2.20).

$$\begin{aligned} m/p &= 1.027 \\ f &= 3.74 \quad p = 3.64 \end{aligned}$$

METODO DE CHANG

Se permite en el destilado una contaminación en el destilado de n-pentano del 9% y en los fondos también del 9% para el n-butano.

Suponiendo recuperaciones:

$$\begin{aligned} s1 &= d LK / f LK = 0.85 \\ s2 &= b HK / f Hk = 0.85 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d LK &= 0.85(0.25) = 0.2125 \\ d HK &= (1-0.85)(0.25) = 0.0375 \\ b LK &= (0.25 - 0.2125) = 0.0375 \\ b HK &= (0.25 - 0.0375) = 0.2125 \end{aligned}$$

determinando la distribución de los componentes por la ecuación de Henstebeck-Geddes (2.1).

Componente	bi	xBi	di	x Di
C1	0.1291	2.58E-3	24.8708	0.4974
C2	3.7500	0.0750	21.2500	0.4250
C3	21.2500	0.4250	3.7500	0.0750
C4	24.8670	0.4974	0.1325	2.65E-3
	<u>49.9961</u>		<u>50.0033</u>	

$$\begin{aligned} g1(s1,s2) &= 0.25 - 0.09 = 0.16 \\ g2(s1,s2) &= 0.25 - 0.09 = 0.16 \end{aligned}$$

el siguiente paso es la resolución de las ecuaciones diferenciales simultáneas:

$$\begin{bmatrix} g'_{1,1} & g'_{1,2} \\ g'_{2,1} & g'_{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta s1 \\ \Delta s2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -g1 \\ -g2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} -0.039 & -0.4609 \\ -0.461 & -0.03909 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta s1 \\ \Delta s2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.16 \\ -0.16 \end{bmatrix}$$

$$\Delta s1 = -0.03 \quad \Delta s2 = -0.03$$

derivadas se obtuvieron numéricamente como lo indican las ecuaciones (2.73).

Las nuevas recuperaciones son:

$$s1 = 0.85 - 0.03 = 0.82$$

$$s_2 = 0.85 - 0.03 = 0.82$$

con estas recuperaciones se efectúa otro cálculo análogo al anterior, obteniéndose la siguiente distribución:

Componente	x_D	x_B
C1	0.49495	4.98E-3
C2	0.40995	0.09
C3	0.09	0.41
C4	5.097E-3	0.49497

se procede a resolver las ecuaciones de Underwood por el método de Ripp (ecuaciones (2.21), (2.22), (2.23), (2.24), (2.25)).

$$\phi = 1.29275$$

y con la ecuación (2.19) se determina R_{\min} .

$$R_{\min} = 0.4502$$

$$R = 1.0$$

N_{\min} se calcula con la ecuación de Fenske (2.10).

$$N_{\min} = 4.0875$$

Usando el diagrama de Erbar-Madox (fig. 2.4) se obtiene

$$N = 7.4767$$

resultando como plato óptimo de alimentación (mediante la ecuación (2.20)).

$$f = 3.7383$$

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO
FES - CUAUTITLAN

TESIS DE LICENCIATURA:

FLORES FLORES RODOLFO
GARCIA RAMIREZ MARCELA MA. E.
VAZQUEZ MORENO FLAVIO SALVADOR

DIRECTOR DE TESIS:

ING. ELIGIO PASTOR RIVERO MTZ.

DESTILACION MULTICOMPONENTE

CALCULO DE N POR EL METODO DE KUFEM

NUMERO DE COMPONENTES = 4
BASE DE ALIMENTACION: 100 LBMOL/H
FLUJO DE DESTILADO = 50
RELACION DE REFLUJO = 1

DAR DATOS DE NO CLAVE LIGEROS :

COMPONENTE (1) :

Z = .25

X D = .50

VOLATILIDAD RELATIVA = 4.4636

DAR DATOS DEL CLAVE LIGERO :

Z = .25

X D = .41

X B = .09

VOLATILIDAD RELATIVA = 2.1000

DAR DATOS DEL CLAVE PESADO :

Z = .25

X D = .09

X B = .41

DAR DATOS DE NO CLAVE PESADOS :

COMPONENTE (4) :

Z = .25

X B = .50

VOLATILIDAD RELATIVA = .4731

DAR CONDICION TERMICA DE ALIMENTACION :

Q = 1.000

REFLUJO MINIMO = .46

NUMERO DE PLATOS MINIMO = 4.09

NUMERO DE PLATOS IDEALES = 7.38

PLATO DE ALIMENTACION DESDE EL FONDO = 3.69

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

FES - CUAUTITLAN

TESIS DE LICENCIATURA:

FLORES FLORES RODOLFO
GARCIA RAMIREZ MARCELA MA. E.
VAZQUEZ MORENO FLAVIO SALVADOR

DIRECTOR DE TESIS :

ING. ELIGIO PASTOR RIVERO MTZ.

DESTILACION MULTICOMPONENTE

METODO DE CHANG

NUMERO DE COMPONENTES= 4

COMPONENTE (1):

Z = .25

VOLATILIDAD RELATIVA= 4.4636

COMPONENTE (2):

Z = .25

VOLATILIDAD RELATIVA = 2.1000

COMPONENTE (3):

Z = .25

VOLATILIDAD RELATIVA= 1.0000

COMPONENTE (4):

Z = .25

VOLATILIDAD RELATIVA= 0.4731

NUMERO DEL C.L.= 2

NUMERO DEL C.P.= 3

CONDICIONES TERMICAS DE ALIMENTACION= 1.00

R/R MIN = 2.2212

ESPECIFICACIONES:

X DK= 0.09

X BK= 0.09

RECUPERACIONES SUPUESTAS

D LK/F LK = .85

B HK/F HK = .85

RESULTADOS :

D LK/F LK = .82 B HK/F HK = .82

DISTRIBUCION DE LOS COMPONENTES:

XD (1)= .484949386
XD (2)= .409954931
XD (3)= .089998372
XD (4)= 5.09727076E-03

XB (1)=4.98358559E-03
XB (2)= .0900012258
XB (3)= .410045474
XB (4)= .494969785

R MIN = .4502 R = 1.0001

ETAPAS TEORICAS :

N MIN = 4.0875 N = 7.4767

PLATO OPTIMO DE ALIMENTACION
DESDE EL FONDO = 3.7384

METODO DE UNDERWOOD

1. Zona de rectificación.

Usando la ecuación (2.27) se calcula ϕ para
 $0 < \phi < \alpha_{HK}$ y $\alpha_{HK} < \phi < \alpha_{LK}$

obteniéndose

$$\begin{aligned}\phi_1 &= 1.4973 \\ \phi_2 &= 0.8678\end{aligned}$$

Zona de agotamiento.

con la ecuación (2.28) se determina ϕ' para
 $\phi' > \alpha_{LK}$ y $\alpha_{HK} < \phi' < \alpha_{LK}$.

con lo que se tiene

$$\begin{aligned}\phi'_1 &= 2.2235 \\ \phi'_2 &= 1.2163\end{aligned}$$

2. Calcular las composiciones en el punto de alimentación para un número infinito de etapas.

La composición para el propano se calcula por medio de la ecuación (2.29) y la composición del n-hexano por la (2.30)

$$x_{HNK, \infty} = 0.2727 \quad x_{LNK, \infty} = 0.1926$$

$$x_{LNK, \infty} + x_{HNK, \infty} = 0.4653$$

$$x_{C2, f} + x_{C3, f} = 1 - 0.4653$$

$$x_{C2, f} + x_{C3, f} = 1 - 0.4653 = 0.5347 \quad (2.32)$$

$$x_{C2} / x_{C3} = 1.0$$

con los datos anteriores

$$x_{LK} = 0.26735$$

$$x_{HK} = 0.26735$$

3. Obtener el número de etapas en las secciones de rectificación y agotamiento.

A partir de las ecuaciones (2.33) y (2.34).

$$m = 4.0164$$

$$p = 1.909$$

$$N = 5.9254$$

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

FES - CUAUTITLAN

TESIS DE LICENCIATURA:

FLORES FLORES RODOLFO
GARCIA RAMIREZ MARCELA MA. E.
VAZQUEZ MORENO FLAVIO SALVADOR

DIRECTOR DE TESIS:

ING. ELIGIO PASTOR RIVERO MTZ.

DESTILACION MULTICOMPONENTE

METODO DE UNDERWOOD

FLUJO DE ALIMENTACION = 100
FLUJO DE DESTILADO = 50
RELACION DE REFLUJO = 1
CONDICION TERMICA DE ALIMENTACION = 1
NUMERO DE COMPONENTES = 4
NUMERO DE NO CLAVES LIGEROS = 1
DAR DATOS DE NO CLAVES LIGEROS

COMPONENTE (1) :

Z = .25

XD = .50

VOLATILIDAD RELATIVA = 4.4536

DAR DATOS DE CLAVE LIGERO :

Z = .25

XD = .41

XB = .09

VOLATILIDAD RELATIVA = 2.1000

DAR DATOS DE CLAVE PESADO :

Z = .25

XD = .09

XB = .41

DAR DATOS DE NO CLAVES PESADOS

COMPONENTE (4) :

Z = .25

XD = .50

VOLATILIDAD RELATIVA = 0.4731

X(1)=1.49730894

X(2)= .867755107

Y(1)= 2.22354782

Y(2)= 1.21629235

NUMERO DE ETAPAS:
RECTIFICACION = 4.01642104
AGOTAMIENTO = 1.90905554
TOTALES = 5.92547658

METODO DE BROWN-MARTIN

En este problema se tiene
 $(x_{LK} / x_{HK})_F = 1$

a) Cálculo en la zona de rectificación.

Primeramente se supondrá $R_{min} = 0.9$, con lo que

$$(L/V)_{min} = R_{min} / (R+1) = 0.4736 = K_{HK}$$

Para este valor de K_{HK} y $P = 300$ psias

$$K_{\text{etano}} = 2.15$$

$$K_{\text{propano}} = 0.98$$

$$T = 155 \text{ F (Diagrama de De Priester)}$$

Utilizando (2.79) se obtiene la composición del líquido

$$x_{\text{etano}} = 0.157$$

$$x_{\text{propano}} = 0.4262$$

por lo tanto :

$$x_{\text{n-butano}} = 1 - (0.157 + 0.4262) = 0.4168$$

De aquí:

$$(x_{LK} / x_{HK}) = 1.022$$

Con suposiciones similares de R_{min} se obtiene la siguiente tabla:

R_{min}	(x_{LK} / x_{HK})
0.90	1.022
0.92	0.9898
0.95	0.9582
0.98	0.914

Graficando estos valores se obtiene para :

$$(x_{LK} / x_{HK}) = 1 \quad R_{min} = 0.9118$$

b) Cálculo en la zona de agotamiento.

Suponiendo $R_{min} = 0.5$

$$L = R_{min} D = 25$$

$$V = 75 = V'$$

$$L' = L + qF = 25 + 100 = 125$$

$$(L'/V') = 1.6667 = K_{LK}$$

Del diagrama de De Priester (apéndice A, fig. A-2)

$$x_i = B x_{iB} / (B K_i + L'(1-K_i))$$

iB

componente	K_i	$x_i F$
n-Butano	0.98	0.398
n-Pentano	0.57	0.3039

por lo tanto x propano = 0.2981

$$(x_{LK} / x_{HK}) = 0.748$$

Continuando en la misma forma:

R_{min}	(x_{LK} / x_{HK})
0.5	0.7486
0.6	0.9032
0.7	1.2715
0.72	1.3202

Para

$$(x_{LK} / x_{HK}) = 1.0$$

$$R_{min} = 0.63$$

(ver gráfica anexa)

Se selecciona el valor mayor de $R_{min} = 0.9118$

Cálculo de N_{min} .

Utilizando la ecuación de Fenske (ec. 2.10).

$$N_{min} = 4.087 \text{ etapas.}$$

Con los datos:

$$R_{min} = 0.9118$$

$$R = 1.00$$

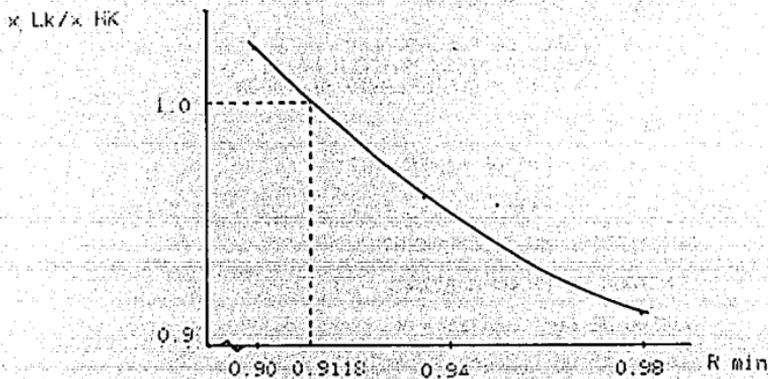
$$N_{min} = 4.087$$

Se obtiene del diagrama de Gilliland:

$$N = 12.75 \text{ etapas.}$$

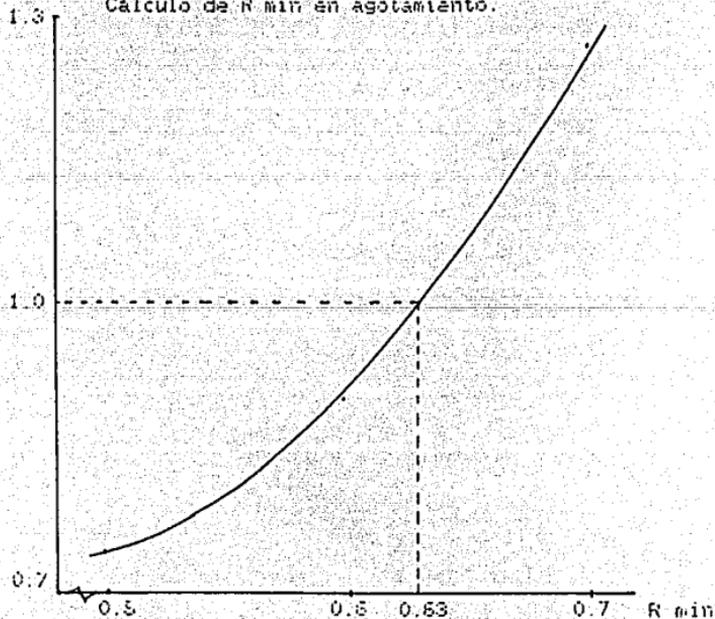
Método de Brown-Martin

Cálculo de R_{min} en rectificación.



x_{LK}/x_{HK}

Cálculo de R_{min} en agotamiento.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO
FES - CUAUTITLAN

TESIS DE LICENCIATURA:

FLORES FLORES RODOLFO
GARCIA RAMIREZ MARCELA MA. E.
VAZQUEZ MORENO FLAVIO SALVADOR

DIRECTOR DE TESIS:

ING. ELIGIO PASTOR RIVERO MTZ.

DESTILACION MULTICOMPONENTE

METODO DE BROWN-MARTIN

NUMERO DE COMPONENTES = 4

NUMERO DE NO CLAVES LIGEROS = 1

DATOS DE NO CLAVES LIGEROS:

COMPONENTE (1) :

Z = .25

XD = .50

VOLATILIDAD RELATIVA = 4.4636

DATOS DEL CLAVE LIGERO :

Z = .25

XD = .41

XB = .09

VOLATILIDAD RELATIVA = 2.10

DATOS DEL CLAVE PESADO :

Z = .25

XD = .09

XB = .41

DATOS DE NO CLAVES PESADOS :

COMPONENTE (4) :

Z = .25

XB = .50

VOLATILIDAD RELATIVA = 0.4731

FLUJO DE ALIMENTACION = 100

FLUJO DE DESTILADO = 50

CONDICION TERMICA DE ALIMENTACION = 1.00

DE UN VALOR DE R MIN :

70.30

A LA TEMPERATURA DE K (HK) = 47.0684711 DE 100

SIGUIENTES VALORES DE K(i) :

47.0684711

?2.15
K(2) =
?0.98
XF LK/XF HK = 1.0224533 R= .3

DE UN VALOR DE R MIN
?0.92
A LA TEMPERATURA DE K (HK) = .47916667 DE LOS
SIGUIENTES VALORES DE K(I) ...
K(1) =
?2.20
K(2) =
? .985
XF LK/XF HK = .985796323 R= .92

DE UN VALOR DE R MIN :
?0.95
A LA TEMPERATURA DE K (HK) = .487179487 DE LOS
SIGUIENTES VALORES DE K(I) ...
K (1) =
?2.25
K (2) =
? .93
XF LK/XF HK = .988208512 R= .95

DE UN VALOR DE R MIN
?0.98
A LA TEMPERATURA DE K (HK) = .494949495 DE LOS
SIGUIENTES VALORES DE K(I) ...
K (1)
?2.28
K (2)
?1.00
XF LK/XF HK = 1

RESULTADOS PARA RECTIFICACION :

R MIN = .911771235

DE UN VALOR DE R MIN :
?0.50
CON EL VALOR DE K (LK) = 1.6667 DE LOS SIGUIENTES
VALORES DE K(I) ...

K(3) =
?0.98

K(4) =
?0.57

XF LK/XF HK = 0.748609979

DE UN VALOR DE R MIN :
?0.60
CON EL VALOR DE K (LK) = 1.605 DE LOS SIGUIENTES
VALORES DE K(I) :

K(3) =
?0.94

K(4) =
?0.54

XF LK/XF HK = .903248287 R = .6

DE UN VALOR DE RMIN :

? .7

CON EL VALOR DE K (LK) = 1.58023529 DE LOS
SIGUIENTES VALORES DE K(I)

K(3) =

? .84

K(4) =

? .49

XF LK/XF HK = 1.27157694 R = .7

DE UN VALOR DE RMIN :

? 0.72

CON EL VALOR DE K (LK) = 1.58139535 DE LOS
SIGUIENTES VALORES DE K(I)

K(3) =

? .83

? .48

XF LK/XF HK = 1.32021795 R = .72

RESULTADOS EN AGOTAMIENTO :

PARA XF LK/XF HK = 1

R MIN = .632956555

RAZON DE REFLUJO = 1.000

RESULTADOS :

R MIN = .911771235

R = 1.00

N MIN = 4.087535

N = 12.7500

METODO DE COLBURN

1. Suponiendo $(L/V)_{\min} = 0.64 = K_{HK}$, los valores de K_i a partir de K_{HK} y $P = 300$ psias son:

Zona de rectificaci3n:

componente	K_i
a) Propano	2.7
b) n-Butano	1.27
c) n-Pentano	0.64

Si $(L'/V')_{\min} = 2.2059 = K_{LK}$ de manera an6loga...

Zona de agotamiento:

componente	K_i
b) n-Butano	2.2
c) n-Pentano	1.2
d) n-Hexano	0.7

2. Composiciones aproximadas en la zona superior de composici3n constante.

Empleando las ecuaciones (2.83), (2.84), donde ahora los subndices "c" y "d" corresponden a "b" y "c" respectivamente se tiene:

$$\begin{aligned}(L \times a)_m &= 6.0527 \\ (L \times b)_m &= 14.5064\end{aligned}$$

3. De manera an6loga empleando las ecuaciones (2.86) y (2.87) se obtienen las composiciones aproximadas en la zona inferior de composici3n constante:

$$\begin{aligned}(L \times c)_p &= 40.2774 \\ (L \times b)_m &= 35.0353\end{aligned}$$

4. Para la zona superior:

a) $(\alpha_{bc} - 1)\alpha_{bc} / \alpha_{ac} = 0.8846$ (ec. 2.88)

b) Con la figura 2.9 leyendo para C_m se obtiene:
 $C_a = 1.2$

c) Empleando la ecuaci3n 2.39
 $(C L \times)_m = 7.2632$

5. Para la zona inferior:

a) $(\alpha_{bc} - 1)\alpha_{dc} = 0.4861$

b) Con la figura 2.9 leyendo para C_p se tiene:
 $C_p = 1.2$

c) Con la ecuaci3n (2.91) se obtiene:
 $(C K/K_c L \times)_p = 24.5247$

6. Con los c6lculos anteriores se llega a las siguientes relaciones (ver ecs. (2.92), (2.93), (2.94)):

$$\begin{aligned}(L \ x b)_p &= (L \ x c)_m - 53.7536 \\ L_p &= (L \ x b)_p + 75.3127 \\ L_m &= (L \ x c)_m + 70.5591\end{aligned}$$

Si $(L \ x c)_m = 66.948$, empleando las tres relaciones anteriores y resolviendo para (2.95) se obtiene:

$$(L/V)_{\min, \text{cal}} = 0.636 \sim 0.64$$

$$(L'/V')_{\min, \text{cal}} = 2.2984 \sim 2.2059$$

Haciendo un promedio entre los valores supuestos y los calculados tenemos:

$$(L/V)_{\min} = 0.6401$$

$$(L'/V')_{\min} = 2.2521$$

Con lo que $R_{\min} = 1.7798$. Como este valor es mayor que el R especificado no será útil con fines de comparación, por lo que se omitirá en la tabla 4.1.

Si únicamente con fines de ejemplificación se toma la misma relación R/R_{\min} del método de Chang tendríamos ...

$$R = 3.8671$$

Finalmente, tras obtener N_{\min} y utilizar la gráfica de Gilliland, se tendrían los siguientes resultados:

$$N_{\min} = 4.4523 \text{ etapas.}$$

$$N = 6.23 \text{ etapas.}$$

METODO DE LEWIS-MATHESON

Constantes para determinar la constante de equilibrio (de apéndice A tabla A-1).

Componente	² a1 (10)	⁵ a2 (10)	⁸ a3 (10)	¹² a4 (10)
C3	-14.5124	53.6389	-5.3051	-173.5833
n-C4	-14.1817	36.8663	16.5214	-248.2344
n-C5	-7.5435	2.0584	59.1383	-413.1240
n-C6	1.1507	-33.8858	97.7954	-542.3594

Zona de rectificación :

Se evalúa la temperatura de punto de rocío con las composiciones en el destilado, obteniéndose las composiciones del líquido en el plato 1.

comp.	di	xDi	Ki	x 1,i	l 1,i	v 2,i	y 2,i
C3	25.0	0.50	1.8770	0.2664	13.320	38.320	0.3832
n-C4	20.5	0.41	0.8324	0.4925	24.625	45.125	0.4512
n-C5	4.5	0.09	0.3733	0.2410	12.05	16.550	0.1655
n-C6							

$$T_r = T(1) = 219.1961 \text{ F}$$

Los flujos individuales $v_{2,i}$ se obtuvieron con (3.12) y las $y_{2,i}$ con (3.13). Con estas composiciones en el vapor se calcula la temperatura de punto de rocío, calculándose las composiciones del líquido en el plato 2.

Se continúa en la misma forma hasta llegar al plato tres donde:

$$(x_{LK} / x_{HK})_3 = 0.925 < (x_{LK} / x_{HK})_F = 1.0$$

Por lo que el plato tres es el de alimentación.

Zona de agotamiento:

El cálculo se inicia calculando la composición del vapor que abandona el rehervidor.

$$T_{burb} = T(1) = 366.3488 \text{ F}$$

Comp.	x Bi	Ki	y 1,i	v' 1,i	l' 2,i	x 2,i
n-C4	0.09	2.077	0.1869	18.69	23.19	0.1544
n-C5	0.41	1.170	0.4797	47.97	68.47	0.4560
n-C6	0.50	0.670	0.3350	33.50	58.50	0.3896

Los flujos individuales del vapor se obtienen con la ecuación (3.14) y los del líquido en la siguiente etapa con (3.15).

Con las fracciones mol en el líquido se calculan las composiciones del vapor en el punto de burbuja y se prosigue de acuerdo a la secuencia señalada.

En el plato 6
 $(x_{LK} / x_{HK}) = 1.33 > (x_{LK} / x_{HK})_F = 1.0$

El plato de alimentación de acuerdo a la secuencia de agotamiento es el sexto.

Se obtienen, en total, las siguientes etapas:

- Rectificación	2
- Agotamiento (incluyendo el rehevador)	5
- Plato de alimentación	1
N TOTAL	8

Los flujos individuales en domo y fondos se corrigen con las ecuaciones de Bonner.

$$\Delta d_{LK} = - \frac{0.40797 - 0.40252}{\frac{0.40797}{20.5} + \frac{0.40252}{4.5}} \quad (\text{ec. (3.17)})$$

$$\Delta d_{LK} = -0.4984$$

$$d_{LK} = 20.5 - 0.4984 = 20.4501$$

$$b_{LK} = 4.5 + 0.4984 = 4.5498$$

Las nuevas composiciones de los componente clave son en el domo:

$$x_{DLK} = d_{LK} / d_i = 0.4109$$

$$x_{DHK} = 0.1048$$

De manera similar se efectúa el cálculo para los componentes clave en el fondo, obteniéndose:

$$x_{BLK} = 0.089$$

$$x_{BHK} = 0.3951$$

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

FES - CUAUTITLAN

TESIS DE LICENCIATURA:

FLORES FLORES RODOLFO
GARCIA RAMIREZ MARCELA MA. E.
VAZQUEZ MORENO FLAVIO SALVADOR

DIRECTOR DE TESIS :

ING. ELIGIO PASTOR RIVERO MTZ.

DESTILACION MULTICOMPONENTE

METODO DE LEWIS-MATHESON

NUMERO DE COMPONENTES =4
NUMERO DE NO CLAVES LIGEROS =1

COMPONENTE:1

Z = .25
XD = .50
A1 = -14.5124E-2
A2 = 53.6389E-5
A3 = -5.3051E-8
A4 = -173.5833E-12

CLAVE LIGERO:

Z = .25
XD = .41
XB = .09
A1 = -14.1817E-2
A2 = 36.8663E-5
A3 = 16.5214E-8
A4 = -248.2384E-12

CLAVE PESADO:

Z = .25
XD = .09
XB = .41
A1 = -7.5435E-2
A2 = 2.0584E-5
A3 = 59.1383E-8
A4 = -413.1240E-12

COMPONENTE:4

Z = .25
XB = .50
A1 = 1.1507E-2
A2 = -33.8858E-5
A3 = 97.7954E-8
A4 = -542.3594E-12

F=100
PRESION (PSIAS)=300

TEMPERATURA DE LA ALIMENTACION (F) = 247.8374

CONDICION TERMICA DE ALIMENTACION = 1.0000001

D = 50

RELACION DE REFLUJO = 1

ZONA DE RECTIFICACION :

T D, SUPUESTA (F) = 221.95

ETAPA : 1

T(1) = 219.1961

X(1,1) = .265394951

X(1,2) = .492564535

X(1,3) = .241071984

ETAPA : 2

T(2) = 239.617598

X(2,1) = .18055211

X(2,2) = .459542962

X(2,3) = .359839059

ETAPA : 3

T(3) = 250.444932

X(3,1) = .151019212

X(3,2) = .40797258

X(3,3) = .441022558

ETAPA DE ALIMENTACION = 3

ZONA DE AGOTAMIENTO.

T B, SUPUESTA (F) = 364.9

ETAPA: 1 (REHERVIDOR)

X(1,2) = .09

X(1,3) = .41

X(1,4) = .50

T(1) = 368.348821

ETAPA: 2

X(2,2) = .163537941

X(2,3) = .456438315

X(2,4) = .379924215

T(2) = 347.24094

ETAPA : 3

X(3,2) = .223789501

X(3,3) = .458824502

X(3,4) = .318385897

T(3) = 332.158236

ETAPA : 4

X(4,2) = .292656297
X(4,3) = .429007615
X(4,4) = .278336103
T(4) = 320.531426

ETAPA : 5

X(5,2) = .353471257
X(5,3) = .391193032
X(5,4) = .255335731
T(5) = 311.765931

ETAPA : 6

X(6,2) = .402521573
X(6,3) = .355240092
X(6,4) = .242238435

PLATO DE ALIMENTACION = 6

ETAPAS TOTALES.

RECTIFICACION : 2
AGOTAMIENTO : 5
ALIMENTACION : 1
N TOTAL = 8

COMPOSICION EN EL DOMO :

X D (1) = .5
X D (2) = .41099658
X D (3) = .104875529

COMPOSICION EN FONDOS :

X B (2) = .0890030196
X B (3) = .395124472
X B (4) = .5

METODO DE AKERS-WADE

Zona de rectificación:

Se evalúa la temperatura del punto de rocío en el domo :
 $T_r = 219.2 \text{ F}$

Empleando la ecuación (3.21) se obtiene:

$$(x \text{ 1/x HK})_m = 1.1728 \quad \text{con } \bar{\alpha} = 4.7370$$

$$(x \text{ 2/x HK})_m = 2.1052 \quad \bar{\alpha} = 2.1639$$

$$(x \text{ 3/x HK})_m = 1.0000 \quad \bar{\alpha} = 1.0000$$

$$\underline{4.2728}$$

Por lo tanto:

$$x_{C3} = 0.2741$$

$$x_{n-C4} = 0.4921$$

$$x_{n-C5} = 0.2337$$

Para el siguiente plato $x_{Di} = x_{n-1,i}$, de esta manera para el plato 2:

Componente	x_{Di}
C3	0.2741
n-C4	0.4921
n-C5	0.2337

y así sucesivamente se continúa hasta que la relación

$$(x \text{ LR/x HK})_{\text{calc}} \leq (x \text{ LR/x HK})_F$$

para este caso:

$$(x \text{ LR/x HK})_{\text{calc}} \leq 1$$

condición que se alcanza en el plato número 3, por lo cual la etapa de alimentación es la número 3 y hay en la zona de rectificación dos etapas.

Zona de agotamiento:

Se evalúa la temperatura del punto de burbuja en el fondo:
 $T_{\text{burb}} = 366.65 \text{ F}$

componente	$\bar{\alpha}_i$	x_{Bi}	y_i
n-C4	1.9225	0.09	0.1853
n-C5	1.0	0.41	0.4796
n-C6	0.5205	0.50	0.3350

para el plato 1:

$$(y \text{ n-C4/y HK})_p = 0.6467$$

$$(y \text{ n-C5/ } y \text{ HK})_p = 1.0000$$

$$(y \text{ n-C6/ } y \text{ HK})_p = 0.4448$$

$$\underline{2.1098}$$

Por lo tanto:

$$y \text{ n-C4} = 0.3092$$

$$x \text{ n-C4} = 0.1535$$

$$y \text{ n-C5} = 0.4781$$

$$x \text{ n-C5} = 0.4564$$

$$y \text{ n-C6} = 0.2126$$

$$x \text{ n-C6} = 0.3900$$

$$(x \text{ LK/ } x \text{ HK}) = 0.3363$$

El procedimiento se continúa de manera análoga a la zona de rectificación hasta que :

$$(x \text{ LK/ } x \text{ HK}) \text{ calc } \geq 1$$

en base a esto se obtiene que en el plato 5 de agotamiento se alcanza la condición antes establecida, por lo que el número de etapas en la zona de agotamiento es igual a cuatro.

Por lo tanto el número de etapas totales es:

- Zona de rectificación	2
- Zona de agotamiento	4
- Alimentación	1
- Rehervidor	1
N Total	8

Con el fin de evitar trabajar con fracciones en el número de etapas, estas fueron ajustadas a números enteros, por tal motivo las condiciones alcanzadas son diferentes a las establecidas. La corrección se realiza por el método de Bonner presentado en el ejemplo anterior.

Componente	x D	x B
C3	0.5000	"
n-C4	0.4071	0.0929
n-C5	0.1086	0.3913
n-C6	"	0.5000

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FES - CUAUTITLÁN

TESIS DE LICENCIATURA:

FLORES FLORES RODOLFO
GARCIA RAMIREZ MARCELA MA. E.
VAZQUEZ MORENO FLAVIO SALVADOR

DIRECTOR DE TESIS :

ING. ELIGIO PASTOR RIVERO MTZ.

DESTILACION MULTICOMPONENTE

METODO DE AKERS-WADE

NUMERO DE COMPONENTES =4
NUMERO DE NO CLAVES LIGEROS =1

COMPONENTE:1

Z = .25
XD = .50
A1 = -14.5124E-2
A2 = 53.8389E-5
A3 = -5.3051E-8
A4 = -173.5833E-12

CLAVE LIGERO:

Z = .25
XD = .41
XB = .09
A1 = -14.1817E-2
A2 = 36.8663E-5
A3 = 16.5214E-8
A4 = -248.2384E-12

CLAVE PESADO:

Z = .25
XD = .09
XB = .41
A1 = -7.5435E-2
A2 = 2.0554E-5
A3 = 59.1360E-8
A4 = -413.1240E-12

COMPONENTE:4

Z = .25
WB = .50
A1 = 1.1507E-2
A2 = -03.8658E-5
A3 = 97.7954E-8
A4 = -542.3594E-12

F = 100

$$(y \text{ n-C5/ } y \text{ HK})p = 1.0000$$

$$(y \text{ n-C6/ } y \text{ HK})p = 0.4448$$

$$\underline{2.1098}$$

Por lo tanto:

$$y \text{ n-C4} = 0.3092 \quad x \text{ n-C4} = 0.1535$$

$$y \text{ n-C5} = 0.4781 \quad x \text{ n-C5} = 0.4564$$

$$y \text{ n-C6} = 0.2126 \quad x \text{ n-C6} = 0.3900$$

$$(x \text{ LK/ } x \text{ HK}) = 0.3363$$

El procedimiento se continúa de manera análoga a la zona de rectificación hasta que :

$$(x \text{ LK/ } x \text{ HK}) \text{ calc } \geq 1$$

en base a esto se obtiene que en el plato 5 de agotamiento se alcanza la condición antes establecida, por lo que el número de etapas en la zona de agotamiento es igual a cuatro.

Por lo tanto el número de etapas totales es:

- Zona de rectificación	2
- Zona de agotamiento	4
- Alimentación	1
- Rehervidor	1
N Total	8

Con el fin de evitar trabajar con fracciones en el número de etapas, estas fueron ajustadas a números enteros, por tal motivo las condiciones alcanzadas son diferentes a las establecidas. La corrección se realiza por el método de Bonner presentado en el ejemplo anterior.

Componente	x D	x B
C3	0.5000	~
n-C4	0.4071	0.0929
n-C5	0.1086	0.3913
n-C6	~	0.5000

PRESION (PSIAS) = 300
TEMPERATURA DE ALIMENTACION (F) = 247.8374

CONDICION TERMICA DE ALIMENTACION = 1.0000001

T D, SUPUESTA (F) = 219.2

T D (F) = 219.2

T B, SUPUESTA (F) = 366.35

T B (F) = 366.35

D = 50

RELACION DE REFLUJO = 1.

ZONA DE RECTIFICACION .

PLATO : 1

X(1,1) = .274142978

X(1,2) = .492105625

X(1,3) = .233751398

PLATO : 2

X(2,1) = .180766196

X(2,2) = .461127243

X(2,3) = .358106561

PLATO : 3

X(3,1) = .144522687

X(3,2) = .404843335

X(3,3) = .450633978

ETAPA DE ALIMENTACION = 3

ZONA DE ASOTAMIENTO .

PLATO : 1

X(1,2) = .153537811

X(1,3) = .456438112

X(1,4) = .390024076

PLATO : 2

X(2,2) = .236136489

X(2,3) = .485412247

X(2,4) = .308451266

PLATO : 3

X(3,2) = .31286517

X(3,3) = .420421863

X(3,4) = .266712967

PLATO : 4

X(4,2) = .375461857

X(4,3) = .378129247

X(4,4) = .246408296

X(S,2) = .421802141
X(S,3) = .341907928
X(S,4) = .236289932

PLATO DE ALIMENTACION = 5

EFAPAS TOTALES :
RECTIFICACION : 2
AGOTAMIENTO : 4
ALIMENTACION : 1
REHEVADOR : 1

TOTAL : 8

COMPOSICIONES DE PRODUCTOS :

FORMO.

XD (1) = .5
XD (2) = .407011197
XD (3) = .108614395

FORMOS.

XB (2) = .0929688029
XB (3) = .391385604
XB (4) = .5

METODO DE THIELE-GEDES

Se ha encontrado, después de varias pruebas, que la torre que cumple con las especificaciones requeridas es aquella con :

$$N = 10 \text{ (incluyendo condensador total)}$$

$$f = 5 \text{ (plato óptimo de alimentación)}$$

Para iniciar el cálculo es necesario suponer un perfil de temperaturas entre la temperatura del condensador (donde el líquido se encuentra en el punto de burbuja) y la temperatura del rehervidor. El perfil de temperaturas supuesto es el siguiente:

Etapa	Temperatura (R)
0	643
1	682
2	706
3	721
4	732
5	752
6	769
7	786
8	803
9	825

Inicialmente se suponen flujos molares internos constantes:

$$L_0 = R D = 50 \qquad L_0 = L_1 = L_2 = \dots = L_4$$

$$V_1 = D(R+1) = 100 \qquad V_1 = V_2 = V_3 = V_4 = V_5$$

$$L'_5 = L_4 + qF = 150 \qquad L'_5 = L'_6 = \dots = L'_9$$

$$V'_6 = V_5 - qF = 100 \qquad V'_6 = V'_7 = \dots = V'_9$$

El uso de ecuaciones anidadas para resolver la matriz tridiagonal se muestra a continuación para las dos primeras etapas de rectificación y agotamiento.

comp. L_0/D $v_{li}/d_i = L_0/D+1$ K_{li} (682R) $A_{li} = L_1/K_{li}V_1$

1	1	2.0	1.90996	0.26178
2	1	2.0	0.85225	0.58668
3	1	2.0	0.38464	1.29992
4	1	2.0	0.17242	2.89993

comp. $l_{li}/d_i = A_{li}(v_{li}/d_i)$ $v_{2i}/d_i = l_{li}/d_i+1$ K_{2i} (706 R)

1	0.52357	1.52357	2.199
2	1.17336	2.17336	1.031
3	2.59984	3.59984	0.4892
4	5.79985	6.79985	0.2306

comp.	$A_{2i} = L^2/K_{2i} V^2$	$l_{2i}/d_i = A_{2i} (v_{2i}/d_i)$
1	0.22737	0.34642
2	0.48496	1.0540
3	1.0221	3.67965
4	2.16839	14.74470

En agotamiento:

comp.	K_9 (825 R)	$S_9 i =$ $K_9 i V^9 / B$	$K_8 i$ (803 R)	$S_8 i =$ $K_8 i V^8 / L^8$
1	3.6270	7.2540	3.38331	2.25541
2	2.0479	4.0948	1.85602	1.23735
3	1.16159	2.32317	1.02609	0.68406
4	0.66414	1.32828	0.56941	0.37961

comp.	l_{8i}/b_i $= S_9 i + 1$	v_{8i}/b_i $= S_8 i (v_{8i}/b_i)$
1	8.2540	18.6123
2	5.0948	6.3046
3	3.32317	2.27325
4	2.32828	0.88384

continuando con el mismo procedimiento y empleando (3-46)

comp.	$(b_i/d_i)_{ca}$
1	4.795E-3
2	0.20797
3	5.50614
4	107.51579

A continuación debe calcularse el valor de θ con el método de Newton, encontrándose que si se inicia con un valor inicial de $\theta = 1$ se llega rápidamente a un valor de ...
 $\theta = 0.95224$

Con los valores de $(d_i)_{ca}$ es posible conocer la composición en cada plato y determinar un nuevo perfil de temperaturas mediante cálculos de temperatura de puntos de burbuja.

Los flujos molares internos son recalculados con las ecuaciones de la (3-58) a la (3.62) y las entalpías se obtienen mediante correlaciones (ver apéndice A, tabla A-2).

El proceso se repite hasta que el valor absoluto de $(\theta-1) \leq 1E-3$. Los resultados pueden ser observados en la corrida siguiente.

JRUN

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

JPR FES - CUAUTITLAN

TESIS DE LICENCIATURA:

FLORES FLORES RODOLFO
GARCIA RAMIREZ MARCELA MA. E.
VAZQUEZ MORENO FLAVIO SALVADOR

DIRECTOR DE TESIS :

ING. ELIGIO PASTOR RIVERA

DESTILACION MULTICOMPONENTE
METODO THETA

NUMERO DE ETAPAS = 10
NUMERO DEL PLATO DE ALIMENTACION = 5
NUMERO DE COMPONENTES = 4

COMPONENTE (1) :

X ALIM = .25

CONSTANTES PARA CALCULO DE K:

A1 = -14.5124E-2

A2 = 53.6389E-5

A3 = -5.3051E-8

A4 = -173.5833E-12

CONSTANTES PARA CALCULO DE HV Y HL :

C1 = -14.5

C2 = .198

C3 = -2.9048E-4

E1 = 81.7959

E2 = 389.8192E-4

E3 = 36.4709E-6

COMPONENTE (2) :

X ALIM = .25

CONSTANTES PARA CALCULO DE K:

A1 = -14.1817E-2

A2 = 36.8663E-5

A3 = 16.5214E-8

A4 = -248.2384E-12

CONSTANTES PARA CALCULO DE HV Y HL :

C1 = -20.2981

C2 = .23

C3 = -3.8663E-4

E1 = 152.6679

E2 = -1153.4842E-4

E3 = 146.6412E-6

COMPONENTE (3) :

X ALIM = .25

CONSTANTES PARA CALCULO DE K:

A1 = -7.5435E-2

A2 = 2.0584E-5

A3 = 59.1383E-8

A4 = -413.124E-12

CONSTANTES PARA CALCULO DE HV Y HL :

C1= -24.3715

C2= 2.5636E-1

C3= -4.6499E-4

E1= 128.9015

E2= 2.0509E-4

E3= 64.5015E-6

COMPONENTE (4) :

X ALIM = .25

CONSTANTES PARA CALCULO DE K:

A1 = 1.1507E-2

A2 = -33.8858E-5

A3 = 97.7954E-8

A4 = -542.3594E-12

CONSTANTES PARA CALCULO DE HV Y HL :

C1= -23.8704

C2= .2676

C3= -4.4197E-4

E1= 85.8349

E2= 1522.3917E-4

E3= -34.0186E-6

PRESION (PSIAS) = 300

TEMPERATURA DE LA ALIMENTACION (R) = 707.8374

CONDICION TERMICA DE ALIMENTACION = 1.00000011

FLUJO DE ALIMENTACION = 100

FLUJO DEL DESTILADO = 50.0

RELACION DE REFLUJO = 1

COMPONENTE (3) :

X ALIM = .25

CONSTANTES PARA CALCULO DE K:

A1 = -7.5435E-2

A2 = 2.0584E-5

A3 = 59.1383E-8

A4 = -413.124E-12

CONSTANTES PARA CALCULO DE HV Y HL :

C1= -24.3715

C2= 2.5636E-1

C3= -4.6499E-4

E1= 128.9015

E2= 2.0509E-4

E3= 64.5015E-6

COMPONENTE (4) :

X ALIM = .25

CONSTANTES PARA CALCULO DE K:

A1 = 1.1507E-2

A2 = -33.8858E-5

A3 = 97.7954E-8

A4 = -542.3594E-12

CONSTANTES PARA CALCULO DE HV Y HL :

C1= -23.8704

C2= .2676

C3= -4.4197E-4

E1= 85.8349

E2= 1522.3917E-4

E3= -34.0186E-6

PRESION (PSIAS) = 300

TEMPERATURA DE LA ALIMENTACION (R) = 707.8374

CONDICION TERMICA DE ALIMENTACION = 1.00000011

FLUJO DE ALIMENTACION = 100

FLUJO DEL DESTILADO = 50.0

RELACION DE REFLUJO = 1

PERFIL DE TEMPERATURAS (R)

T(0)= 643.352618
T(1)= 681.957154
T(2)= 705.758664
T(3)= 721.095459
T(4)= 732.661095
T(5)= 751.59692
T(6)= 768.783253
T(7)= 785.671896
T(8)= 803.953238
T(9)= 824.909424

COMPOSICIONES :

XD(1)= .497114439
XD(2)= .411421997
XD(3)= .0855811011
XD(4)= 5.88250556E-03

XB(1)= 2.63832338E-03
XB(2)= .0884165037
XB(3)= .414583418
XB(4)= .494361755

TABLA 4.1
 RESULTADOS DEL PROBLEMA 4.1
 (METODOS CORTOS)

Método	Rmin	R	Nmin	N	f
KUFEM	0.46	1.0	4.09	7.38	3.69
Chang	0.4502	1.0	4.088	7.477	3.74
Underwood	/	1.0	/	5.925	1.91
Brown -Martin	0.9118	1.0	4.088	12.750	6.38

Método	x D			
	C3	n-C4	n-C5	n-C6
KUFEM	0.5000	0.4100	0.0900	~
Chang	0.4949	0.4099	0.0899	5 E-3
Underwood	0.5000	0.4100	0.0900	~
Brown -Martin	0.5000	0.4100	0.0900	~

Metodo	x B			
	C3	n-C4	n-C5	n-C6
KUFEM	~	0.0900	0.4100	0.5000
Chang	4.9E-3	0.0900	0.4100	0.4949
Underwood	~	0.0900	0.4100	0.4949
Brown -Martin	*	0.0900	0.4100	0.4949

TABLA 4.1
(Continuación)

MÉTODOS RIGUROSOS

Método	R	N	f
(etapa a etapa)			
Lewis-Matheson	1.0	8.0	6.0
Akers-Wade	1.0	8.0	5.0
(aproximación sucesiva)			
Thiele-Geddes (Theta)	1.0	9.0	6.0

Metodo	C3	$\frac{x D}{n-C4}$	n-C5	n-C6
(etapa a etapa)				
Lewis-Matheson	0.5000	0.41099	0.1048	~
Akers-Wade	0.5000	0.4070	0.1086	
(aprox. sucesiva)				
Thiele-Geddes (Theta)	0.4971	0.4114	0.0855	5.8E-3

Metodo	C3	$\frac{x B}{n-C4}$	n-C5	n-C6
(etapa a etapa)				
Lewis-Matheson	~	0.089	0.3951	0.5000
Akers-Wade	~	0.0929	0.3913	0.5000
(aprox. sucesiva)				
Thiele-Geddes (Theta)	2.6E-3	0.0884	0.4143	0.4943

4.2 Problema propuesto 2.

Se desea fraccionar la siguiente mezcla:

Componente	z_i	$\bar{\alpha}_i$
C H 2 6	0.33885	9.09
C H 3 8	0.29269	3.18
C H 4 10	0.16367	1.00
C H 5 12	0.1059	0.3667
C H 6 14	0.09889	0.1367

TF= 554.836 R
(líquido saturado)

en dos productos, la corriente del destilado tendrá una contaminación máxima de 4.33% mol de butano y la de fondos 11.6145 % mol de propano . La columna operará con una relación de reflujo de 0.3394 y una presión de 300 psias. Base de alimentación : 100 lbmol/h .

TABLA 4.2
RESULTADOS DEL PROBLEMA 2.

MÉTODOS CORTOS (x)

Método	R _{min}	R	N _{min}	N	f
KUFEM	0.07	0.3394	2.89	6.09	2.75
Chang	0.0724	0.3512	2.8939	6.1461	2.7767
Underwood	/	0.3394	/	3.6058	1.097

Método	x D				
	C2	C3	n-C4	n-C5	n-C6
KUFEM	0.5521	0.1161	0.0433	~	~
Chang	0.5496	0.4050	0.0432	0.0018	0.0098
Underwood	0.5521	0.4042	0.0433	~	~

Método	x B				
	C2	C3	n-C4	n-C5	n-C6
KUFEM	~	0.1161	0.3542	0.2729	0.2554
Chang	7.5E-3	0.1160	0.3528	0.2694	0.2541
Underwood	~	0.1161	0.3542	0.2729	0.2554

(x) Para Brown-Martin $R_{\min} = 0.4049$ y para Colburn $R_{\min} = 0.9474$, por lo que no es posible establecer una comparación con los otros métodos ($R_{\min \text{ calc}} > R$ especificado).

TABLA 4.2
 (Continuación)
 METODOS RIGUROSOS

Método	R	N	f
(etapa a etapa)			
Lewis-Matheson	0.3394	6.0	5.0
Akers-Wade	0.3394	5.0	3.0
(aproximación sucesiva)			
Thiele-Geddes (Theta)	0.3394	11.0	6.0

Método	C2	C3	$\frac{x}{n}$ D n-C4	n-C5	n-C6
(etapa a etapa)					
Lewis					
-Matheson	0.5521	0.4013	0.0487	~	~
Akers-Wade	0.5521	0.4036	0.0479	~	~
(aprox. sucesiva)					
Thiele-Geddes (Theta)	0.5521	0.4040	0.0434	3.3E-4	5.8E-3

Método	C2	C3	$\frac{x}{n}$ B n-C4	n-C5	n-C6
(etapa a etapa)					
Lewis					
-Matheson	~	0.1205	0.3456	0.2729	0.2554
Akers-Wade	~	0.1170	0.3468	0.2729	0.2554
(aprox. sucesiva)					
Thiele-Geddes	1.3E-3	0.1163	0.3539	0.2729	0.2553

4.3 Problema propuesto 3.

Se desea fraccionar la siguiente mezcla:

Componente	z_i	$\bar{\alpha}_i$
1. C ₂ H ₄	0.02	14.73
2. C ₂ H ₆	0.21	9.182
3. C ₃ H ₈	0.18	3.014
4. n-C ₄ H ₁₀	0.25	1.000
5. n-C ₅ H ₁₂	0.34	0.2565

$$TF = 136.6393 R$$

$$q = 1.0$$

en dos corrientes mediante destilación. Se requiere para la corriente del destilado una contaminación de n-C₄H₁₀ de 4.9% como máximo y en los fondos se admite un 3.4% como contaminación máxima de C₃H₈. La torre operará con una relación de reflujo de 2.2 y a una presión de 500 psias. Flujo de alimentación = 100 lbmol/h. La mezcla de alimentación se introducirá en el plato óptimo. Estimar el número de platos ideales.

TABLA 4.3
 RESULTADOS DEL PROBLEMA 3.
 METODOS CORTOS

Método	Rmin	R	Nmin	N	f
KUFEM	0.31	2.2	4.09	5.31	2.67
Chang	0.3102	2.2	4.091	5.344	2.682
Underwood	/	2.2	/	4.679	2.35
Brown					
-Martin	0.8457	2.2	4.091	6.236	3.12
Colburn	1.60	2.2	4.091	8.254	4.12

Método	$\times D$				
	C-1	C-2	C-3	C-4	C-5
KUFEM	0.049	0.512	0.39	0.049	~
Chang	0.0487	0.5117	0.3902	0.0489	2.7E-4
Underwood	0.049	0.512	0.39	0.049	~
Brown					
-Martin	0.049	0.512	0.39	0.049	~
Colburn	0.049	0.512	0.39	0.049	~

Método	$\times B$				
	C-1	C-2	C-3	C-4	C-5
KUFEM	~	~	0.034	0.39	0.576
Chang	6.4E-6	4.6E-4	0.0339	0.3895	0.5759
Underwood	~	~	0.034	0.39	0.576
Brown					
-Martin	~	~	0.034	0.39	0.576
Colburn	~	~	0.034	0.39	0.576

TABLE 4.3
(Continuación)

MÉTODOS RIGUROSOS

Método	R	N	f
(etapa a etapa)			
Lewis-Natheson	2.2	8.0	6.0
Akers-Wade	2.2	7.0	4.0
(aprox. sucesiva)			
Thiele-Geddes (Theta)	2.2	11.0	6.0

Método	$\times D$				
	C-1	C-2	C-3	C-4	C-5
(etapa a etapa)					
Lewis-Natheson	0.045	0.512	0.3924	0.0676	*
Akers-Wade	0.049	0.512	0.3817	0.0675	*
(aprox. sucesiva)					
Thiele-Geddes (Theta)	0.0487	0.5118	0.4054	0.0337	2.2E-4

Método	$\times b$				
	C-1	C-2	C-3	C-4	C-5
(etapa a etapa)					
Lewis-Natheson	*	*	0.0392	0.377	0.576
Akers-Wade	*	*	0.0357	0.377	0.576
(aprox. sucesiva)					
Thiele-Geddes (Theta)	7E-6	2.2E-4	0.0233	0.4002	0.5761

CAPITULO 5

CONCLUSIONES

5.1 Discusión de los métodos cortos.

Al observar los diversos resultados en los problemas propuestos los métodos cortos que proporcionan el número de etapas más aproximado al dado por el método riguroso de Thiele-Geddes (THETA) son los de KUFEM y Chang. Únicamente en el caso del problema tres, los métodos que determinan un mejor número de etapas son los de Brown-Martin y Colburn, pero esta aproximación sólo es aparente, ya que la relación R/R_{\min} es menor que la utilizada en los otros métodos. Una de las causas de esta divergencia es que mientras que los métodos de Chang y KUFEM la determinación del número de etapas y del reflujo mínimo es independiente del conocimiento de las composiciones en el plato de alimentación y en la zona de composición constante, en los métodos de Brown-Martin y Colburn la exactitud del cálculo depende fuertemente de la estimación de estas composiciones, y del hecho de suponerlas, para los componentes clave como iguales a las de la alimentación es sumamente criticable y origina que los reflujos mínimos obtenidos sean mucho mayores que los verdaderos. En el caso del método de Underwood si bien se intenta evitar este inconveniente mediante estimaciones en la zona de composición constante éstas no dejan de ser aproximaciones no válidas para la generalidad de los sistemas.

Entre las principales causas de error de los métodos cortos está el de suponer flujos molares internos constantes, escasa dependencia de las volatilidades relativas con la temperatura, distribuciones aproximadas de los componentes a lo largo de la columna y despreciar el efecto de la caída de presión por plato en los equilibrios líquido-vapor.

Los métodos de Chang y KUFEM son sumamente rápidos y el cálculo de los parámetros β es sencillo si se recurre al método de Ripps, no presentando inconvenientes graves en la convergencia de valores. El método de Underwood requiere un número de cálculos cuatro veces mayor que los métodos anteriores y el método modificado de Ripps no es tan efectivo como el utilizado por Chang y KUFEM, pues cuando el reflujo es pequeño (cercano a R_{\min}) las raíces pueden convergir a un mismo valor. En el caso de los métodos de Brown-Martin y Colburn el enorme tiempo utilizado para pruebas los hace poco competentes con otros métodos.

Por lo tanto, los métodos que presentan un mayor número de ventajas son los de KUFEM y Chang, recomendándose el primero para problemas en que se especifican las recuperaciones y el segundo cuando se establecen purezas en el destilado y fondos. Todas estas características han hecho de ellos los métodos de uso más común como lo confirman Smith (13) y Marinou-Kouris

(9). Lo anterior queda resumido en la tabla 5.1 .

5.2 Discusión de los métodos rigurosos.

De acuerdo a los resultados presentados en las tablas 4.1, 4.2, 4.3, los métodos rigurosos etapa a etapa pueden presentar grandes variaciones con el método riguroso de aproximación sucesiva de Thiele-Geddes. Esto se debe principalmente a que los métodos de Lewis-Matheson y Akers-Wade suponen (al igual que los métodos cortos) flujos molares internos constantes lo cual se aleja de la realidad. Otra suposición muy discutible es el de considerar como plato de alimentación aquel que tenga la misma relación de componentes clave que la alimentación lo cual implicaría que no existe una gran variación entre la temperatura del plato de alimentación y la temperatura de alimentación, lo cual sólo es cierto en contados casos. Más aún, en estos métodos se llega a platos con distintas composiciones y temperatura dependiendo si el cálculo se efectúa en la zona de rectificación o de agotamiento y a esos platos se les identifica como el mismo plato (el de alimentación).

A éstas muy criticables suposiciones el método de Akers-Wade añade el considerar constantes las volatilidades relativas en las zonas de rectificación y agotamiento, lo cual sólo es cierto cuando no existe en la columna un perfil de temperaturas muy pronunciado.

Existen algunos casos donde las composiciones en el vapor y en el líquido son semejantes en alguna de las etapas haciendo que la temperatura del plato y de los platos consecuentes no varíe notablemente según el método de Lewis-Matheson lo que origina un número grande de etapas, siendo preferible en éste caso la utilización del método de Akers-Wade. El método de Thiele-Geddes no presenta éste tipo de problemas.

Por lo anterior los métodos de Lewis-Matheson y Akers-Wade sólo se recomiendan para aquellos problemas de destilación multicomponente donde el número de etapas requeridas no sea muy grande.

El método de Thiele-Geddes está basado en un análisis bastante riguroso de los sistemas de destilación multicomponente por lo que ofrece resultados muy exactos y permite fácilmente hacer pruebas para localizar el plato óptimo de alimentación o modificar el número de etapas en rectificación y agotamiento, hasta alcanzar los requerimientos especificados. Un requisito para alcanzar la convergencia es suponer un perfil de temperaturas razonable al cual puede obtenerse conociendo las temperaturas en el condensador y en los fondos de la torre. Tal vez el principal inconveniente de éste método es que requiere un tiempo de cálculo relativamente grande y gran capacidad de memoria en la computadora utilizada.

De acuerdo a Smith (13) el método riguroso más utilizado

actualmente es el de Thiela-Geddes, utilizando el promotor de convergencia THETA.

Un resumen de esta discusión puede verse en la tabla 5.2 .

TABLA 5.1
COMPARACION ENTRE METODOS CORTOS

METODO:	KUFEM.
SUPOSICIONES BASICAS:	-Flujos molares internos constantes. -Poca variación de α respecto a T.
INDICACIONES DE LA BIBLIOGRAFIA:	-Muy recomendable (ref. 9 y 11), éi de uso más común.
CONCLUSIONES EN BASE A EJEMPLOS DE APLICACION:	-Muy rápido. -Mejor aproximación a un método riguroso. -Cálculo de R_{min} aceptable. -Empleado cuando se especifican recuperaciones.
METODO:	Chang.
SUPOSICIONES BASICAS:	-Mismas que KUFEM.
INDICACIONES DE LA BIBLIOGRAFIA:	-Uno de los métodos más recientes , recomendado por ref. 2.
CONCLUSIONES EN BASE A EJEMPLOS DE APLICACION:	-El más rápido. -Muy buen cálculo de distribución de los componentes. -Cálculo de R_{min} aceptable. -Empleado cuando se especifican purezas. -Aproximación con un método riguroso en forma similar a KUFEM.
METODO:	Underwood.
SUPOSICIONES BASICAS:	-Además de las de KUFEM considera que la composición del plato de alimentación es semejante a la zona de composición constante.
INDICACIONES DE LA BIBLIOGRAFIA:	

TABLA 5.1
(CONTINUACION)

CONCLUSIONES EN BASE
A EJEMPLOS DE
APLICACION:

- Cálculo de parámetros ϕ complicado.
- Más tardado que KUFEM.
- Falla cuando el reflujo de operación es parecido a el reflujo mínimo (1.2, 1.5 R_{min}).
- Inexacto.

METODO:

Brown-Martin.

SUPOSICIONES BASICAS:

- Relación de componentes clave en el plato de alimentación igual a la de la alimentación.
- α casi constante en la columna.
- Flujos molares internos constantes.

INDICACIONES DE LA
BIBLIOGRAFIA:

- Da valores de R_{min} superiores a los verdaderos (ref. 15).

CONCLUSIONES EN BASE
A LOS EJEMPLOS DE
APLICACION:

- Lento.
- Cálculo por prueba y error de R_{min} que requiere gran número de datos.
- R_{min} muy grande.
- Resultados inexactos.

METODO:

Colburn.

SUPOSICIONES BASICAS:

- Flujos molares internos constantes.
- Poca variabilidad de α en rectificación y en agotamiento.
- Relación de componentes clave en el plato de alimentación igual a la de alimentación.

INDICACIONES DE LA
BIBLIOGRAFIA:

- Valores de R_{min} superiores a los verdaderos (ref. 15).
- Factores C_m y C_p basados en un número reducido de problemas (ref. 11).

CONCLUSIONES EN BASE
A EJEMPLOS DE
APLICACION:

- Muy lento.
- Cálculo por prueba y error de R_{min} que requiere gran cantidad de cálculos.
- Inexactitudes en la lectura de C_m y C_p .

TABLA 5.1
(CONTINUACION)

- Rmin muy grande.
- Resultados inexactos.
- Los resultados obtenidos por prueba y error no muestran una tendencia uniforme en su variación.

TABLE 5.2
COMPARACION ENTRE METODOS RIGUROSOS

METODO:	Lewis-Matheson.
SUPOSICIONES BASICAS:	-Flujos molares internos constante. -Relación de componentes clave en el plato de alimentación igual a la de la alimentación.
INDICACIONES DE LA BIBLIOGRAFIA:	-Se menciona que no es muy bueno el criterio para identificar el plato de alimentación (ref. 11).
CONCLUSIONES EN BASE A EJEMPLOS DE APLICACION:	-Rápido. -Buena determinación de composiciones en los productos. -Buen perfil de temperaturas. -Falla cuando el sistema requiere un gran número de etapas.
METODO:	Akers-Wade.
SUPOSICIONES BASICAS:	-Además de las de Lewis-Matheson, considera α 's constantes en rectificación y agotamiento.
INDICACIONES DE LA BIBLIOGRAFIA:	-Conveniente en determinaciones rápidas (ref. 8).
CONCLUSIONES EN BASE A EJEMPLOS DE APLICACION:	-Muy rápido. -Presenta ventajas cuando hay puntos de pliegue. -Conveniente para columnas con pocos platos y perfil de temperaturas no muy pronunciado.
METODO:	Thiele-Geddes. (Método de convergencia θ)
SUPOSICIONES BASICAS:	-Flujos molares de composición constante.
INDICACIONES DE LA BIBLIOGRAFIA:	-El más conveniente y más preciso (ref. 4,5,6,11,13,14,15). -Presenta métodos alternativos de convergencia (ref. 1,14).

TABLA 5.2

(CONTINUACION)

**CONCLUSIONES EN BASE
A EJEMPLOS DE
APLICACION:**

- Muy preciso.
- Permite cambiar fácilmente el número de etapas en rectificación y agotamiento hasta ajustar las especificaciones establecidas.
- Requiere suponer un perfil de temperaturas razonable.
- Es más conveniente iniciar el cálculo del promotor de convergencia con $\theta = 1$.
- Relativamente lento.
- Columnas con un gran número de etapas ó componentes requieren gran capacidad de memoria en el equipo de cómputo.
- El cálculo de los flujos internos mediante balances de materia y entalpía permite obtener resultados muy precisos.

5.3 Guía de diseño.

En base a la solución de diversos problemas, además de los expuestos anteriormente, se propone la siguiente secuencia de diseño para determinar el número de etapas en destilación multicomponente.

1. Si en el problema se especifican recuperaciones, utilizar el método de KUFEM para obtener reflujo mínimo (y en base a éste determinar el reflujo de operación), número total de etapas, localización del plato óptimo de alimentación. Si se especifican purezas utilizar el método de Chang.

2. Determinar la temperatura del condensador (temperatura del punto de burbuja en el caso del condensador total, temperatura del punto de rocío en el caso de condensador parcial) y la temperatura del punto de burbuja en los fondos. En base a ellas, suponer un perfil de temperaturas en la columna (puede ser lineal).

3. Con los datos obtenidos por el método corto y el perfil de temperaturas asumido, efectuar el cálculo de composiciones en el domo y en el fondo por el método de Thiele-Geddes (THETA). Observar si cumple con las especificaciones.

4. De no cumplir la columna con las especificaciones dadas modificar la localización del plato de alimentación ó aumentar el número de etapas totales hasta encontrar una columna que cumpla con lo establecido.

Los programas presentados en este trabajo fueron elaborados en lenguaje BASIC y ejecutados en una computadora APPLE II.

En problemas donde se especifican recuperaciones puede recurrirse al programa de KUFEM (habiéndose elaborado previamente una estimación de la distribución de los componentes y un balance de materia). Los datos de entrada son: número de componentes, base de alimentación, flujo de destilado, relación de reflujo, número de componentes no clave ligeros, composición de la alimentación, domo y fondos de cada uno de los componentes así como su volatilidad relativa y su condición térmica de alimentación. El tiempo estimado de ejecución es cercano a un minuto.

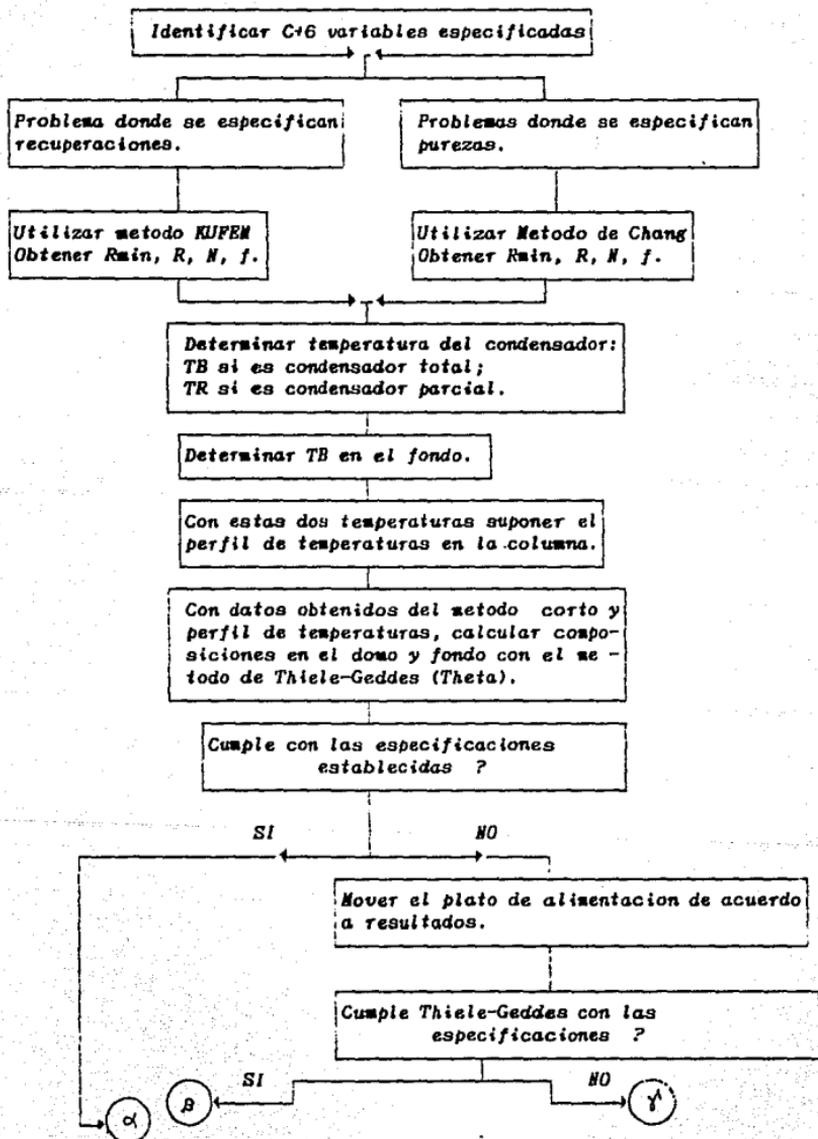
El programa de Chang se utiliza al especificarse purezas y requiere únicamente como datos composición en la alimentación y volatilidades relativas de cada componente, condición térmica de alimentación, las purezas especificadas y dos recuperaciones supuestas. Los tiempos de ejecución son menores que los empleados por KUFEM.

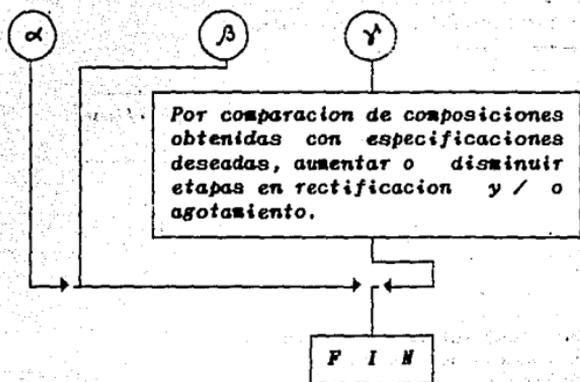
Una vez que se han obtenido el número de etapas, plato de alimentación óptimo y relación de reflujo (recomendado 1.05 a 1.1 veces el reflujo mínimo) puede utilizarse el programa de

Thiele-Geddes (THETA). Además de los datos anteriores deben proporcionarse el número de componentes, composiciones en la alimentación, presión en la columna, temperatura de la alimentación y constantes para calcular constantes de equilibrio líquido-vapor, entalpías de la fase líquido-vapor. Deberá también suministrarse el perfil supuesto de temperatura. El programa calculará la condición térmica de alimentación y finalmente dará el perfil verdadero de temperatura y las composiciones de los productos en el domo y fondo.

Con el propósito de cumplir con las especificaciones deberán efectuarse pruebas modificando primeramente la localización del plato de alimentación y de no bastar esto, deberán modificarse el número de etapas de acuerdo al criterio del diseñador, hasta cumplir las especificaciones. Este proceso es tardado debido al número de pruebas, datos necesarios en gran número y a la misma lentitud de convergencia del método (en los ejemplos propuestos el tiempo de corrida osciló entre cinco y quince minutos). Una limitación del programa es que para torres de más de diez componentes o de quince platos se necesita una asignación de memoria superior a setenta y cuatro K, por lo que su uso en microcomputadoras es limitado. Sin embargo, es posible efectuar algunas pequeñas modificaciones para cambiar el tipo de BASIC utilizado en el programa e introducirlo en una computadora PC donde la asignación de mayor memoria es sencilla y ésta restricción quedaría completamente eliminada.

Un diagrama de bloques de la guía es presentado a continuación.





**Listado de programas de los métodos seleccionados
para la guía de diseño.**

KUPFM

CHANG

**THIELE-GRODES
(THETA)**

JPR#0
JLIST

```
5 HOME
8 PRINT
10 PRINT " UNIVERSIDAD NACIONAL
    AUTONOMA"
20 PRINT " DE MEXICO"
24 PRINT " FES - CUAUTIL
    AN"
25 PRINT
26 PRINT " *****"
28 PRINT
30 PRINT " TESIS DE LICENCIATUR
    A:"
31 PRINT
32 PRINT " FLORES FLORES
    RODOLFO"
34 PRINT " GARCIA RAMIREZ
    MARCELA MA. E. "
36 PRINT " VAZQUEZ MORENO
    FLAVIO SALVADOR "
38 PRINT
40 PRINT " DIRECTOR DE TESIS:"
42 PRINT
44 PRINT " ING. ELIGIO PASTOR RI
    VERO MTZ."
45 PRINT
46 PRINT " *****"

47 PRINT
48 PRINT " DESTILACION MULTICO
    MPONENTE"
60 PRINT
62 PRINT
70 DEF FN R(X) = INT (X * 100 +
    .5) / 100
100 PRINT "CALCULO DE N POR EL M
    ETODO KUFEM"
110 PRINT
120 INPUT " NUMERO DE COMPONENTE
    S = ";C
125 PRINT " BASE DE ALIMENTACION
    : 100 LBMOL/H"
130 INPUT " FLUJO DE DESTILADO =
    ";D
140 B = 100 - D
150 INPUT " RELACION DE REFLUJO
    = ";R
160 PRINT " NUMERO DE COMPONENTE
    S "
165 INPUT " NO CLAVE LIGEROS = "
    ;C1
170 PRINT
180 DIM F(C)
190 DIM D(C)
200 DIM B(C)
210 DIM A(C)
220 PRINT " D4% DATOS DE NO CLAV
    E LIGEROS ;"
230 FOR J = 1 TO C1
240 PRINT " COMPONENTE (";J;") ;
```

```

"
250 INPUT " Z = "; F(J)
260 INPUT " X D = "; D(J)
270 INPUT " VOLATILIDAD RELATIVA
= "; A(J)
280 PRINT
290 NEXT J
300 PRINT " DAR DATOS DEL CLAVE
LIGERO : "
310 INPUT " Z = "; F(C1 + 1)
320 INPUT " X D = "; D(C1 + 1)
330 INPUT " X B = "; B(C1 + 1)
340 INPUT " VOLATILIDAD RELATIVA
= "; A(C1 + 1)
350 PRINT
360 PRINT " DAR DATOS DEL CLAVE
PESADO : "
370 INPUT " Z = "; F(C1 + 2)
380 INPUT " X D = "; D(C1 + 2)
390 INPUT " X B = "; B(C1 + 2)
400 A(C1 + 2) = 1.00
410 PRINT
420 PRINT " DAR DATOS DE NO CLAV
E PESADOS : "
430 FOR J = (C1 + 3) TO C
440 PRINT " COMPONENTE (" ; J ; " ) :
"
450 INPUT " Z = "; F(J)
460 INPUT " X B = "; B(J)
470 INPUT " VOLATILIDAD RELATIVA
= "; A(J)
480 NEXT J
490 PRINT
500 M1 = LOG ( D(C1 + 1) * B(C1 +
2) / ( D(C1 + 2) * B(C1 + 1) )
) / LOG ( A(C1 + 1) )
505 DIM T(20)
510 PRINT " DAR CONDICION TERMIC
A DE ALIMENTACION : "
520 INPUT " Q = "; Q
525 HOME
530 GOSUB 800
540 FOR J = 1 TO C
550 S = S + A(J) * D(J) / ( A(J) -
X)
560 NEXT J
570 P1 = S - '
580 Z = (R - R1) / (R + 1) ^ 0.
5668
590 N = (.75 - .75 * Z + N1) / (
- .75 + .75 * Z)
600 W = 0.206 * LOG ( B * F(C1 +
2) / ( D * F(C1 + 1) ) * B(C1
+ 1) / D(C1 + 2) ) ^ 2) / LOG
(10)
610 P = N / (1 + 10 ^ W)
620 PRINT
630 PRINT " REFLUJO MINIMO = "; CN
R(R1)
640 PRINT " NUMERO DE PLATOS MIN
IMO = "; FN R(N1)

```

```

650 PRINT " NUMERO DE PLATOS IDE
ALES = "; FN R(N)
660 PRINT " PLATO DE ALIMENTACIO
N (DESDE EL FONDO) = "; FN R
(P)
670 PRINT
700 END
800 T(1) = (A(C1 + 1) + A(C1 + 2)
) / 2
810 Z1 = 0
830 FOR I = 1 TO C
840 Z1 = (A(I) * F(I) / (A(I) - T
(1))) + Z1
850 NEXT I
860 F = Z1 - (1 - Q)
870 G = (A(C1 + 2) * F(C1 + 2) /
(A(C1 + 2) - T(1))) - F
880 U(1) = A(C1 + 2) * (1 - F(C1 +
2) / G)
890 T(2) = U(1)
900 FOR J = 2 TO 20
910 Z1 = 0
920 FOR I = 1 TO C
930 Z1 = A(I) * F(I) / (A(I) - T(
J)) + Z1
940 NEXT I
950 F = Z1 - (1 - Q)
960 G = (A(C1 + 2) * F(C1 + 2) /
(A(C1 + 2) - T(J))) - F
970 U(J) = A(C1 + 2) * (1 - F(C1 +
2) / G)
980 Z2 = (U(J) - U(J - 1)) / (T(J
) - T(J - 1))
990 T(J + 1) = T(J) + (U(J) - T(J
)) / (1 - Z2)
1000 IF ABS (T(J + 1) - T(J)) <
1E - 4 THEN 1020
1010 NEXT J
1020 Y = T(J + 1)
1030 RETURN

```

JLIST

```
5 HOME
8 PRINT
10 PRINT " UNIVERSIDAD NACIONAL
    AUTONOMA "
20 PRINT "          DE MEXICO
    "
22 PRINT
24 PRINT "          FES - CUAUTITL
    AN "
25 PRINT
26 PRINT "          ****"
28 PRINT
30 PRINT " TESIS DE LICENCIATUR
    A: "
31 PRINT
32 PRINT "          FLORES FLORES
    RODOLFO "
34 PRINT "          GARCIA RAMIREZ
    MARCELA MA. E. "
36 PRINT "          VAZQUEZ MORENO
    FLAVIO SALVADOR "
38 PRINT
40 PRINT " DIRECTOR DE TESIS : "
42 PRINT
44 PRINT " ING. ELIGIO PASTOR RI
    VERO MTZ."
45 PRINT
46 PRINT "          ****"
47 PRINT
48 PRINT " DESTILACION MULTICO
    MPONENTE "
50 PRINT
60 PRINT TAB( 8)" METODO DE CHA
    NG "
65 PRINT
70 DEF FN R(X) = INT (X * 1E4 +
    0.5) / 1E4
200 DIM W(20)
210 DIM X(20)
220 DIM Y(20)
230 DIM F(20)
240 DIM D(20)
250 DIM B(20)
260 DIM A(20)
270 DIM H(20,20)
275 DIM T(20)
280 INPUT "NUMERO DE COMPONENTES
    = ";C
285 HOME
290 FOR J = 1 TO C
295 PRINT
300 PRINT "COMPONENTE (";J;"):"
310 INPUT "Z = ";W(J)
320 INPUT "VOLATILIDAD RELATIVA=
    ";A(J)
330 F(J) = W(J) * 100
340 NEXT J
350 PRINT
360 INPUT "NUMERG DEL C.L.= ";K1
370 INPUT "NUMERO DEL C.P.= ";K2
```

```

380 PRINT
390 INPUT "CONDICIONES TECNICAS
DE ALIMENTACION= ";Q
400 INPUT "R/R MIN= ";P2
410 PRINT
420 PRINT "ESPECIFICACIONES: "
430 INPUT "X DM= ";X
440 INPUT "X BLK= ";Y
450 PRINT
460 PRINT "RECUPERACIONES SUPUES
TAS "
470 INPUT " D LK/F LK = ";S(1)
480 INPUT " B HK/F HK = ";S(2)
490 PRINT
495 HOME
500 FOR K = 1 TO 50
510 GOSUB 1100
540 IF ABS (E(1)) < = 1E - 4 THEN
560
550 GOTO 570
580 IF ABS (E(2)) < = 1E - 4 THEN
750
570 G(1) = E(1)
580 G(2) = E(2)
590 FOR J = 1 TO 2
600 S(J) = S(J) + 1E - 5
610 GOSUB 1100
620 FOR I = 1 TO 2
630 H(I,J) = (E(I) - G(I)) / 1E -
5
640 NEXT I
650 S(J) = S(J) - 1E - 5
660 NEXT J
670 D20 = H(1,1) * H(2,2) - H(1,2)
* H(2,1)
680 S3 = (G(2) * H(1,2) - G(1) *
H(2,2)) / D20
690 S4 = (G(1) * H(2,1) - G(2) *
H(1,1)) / D20
700 S(1) = S(1) + S3
705 IF (S(1) < 1) THEN 710
707 S(1) = 0.9999
710 S(2) = S(2) + S4
715 IF (S(2) < 1) THEN 720
717 S(2) = 0.9999
720 NEXT K
730 PRINT "NO HAY CONVERGENCIA "
740 GOTO 1000
750 N1 = LOG ((X(K1) / Y(K1)) *
(Y(K2) / X(K2))) / LOG (A(K
1))
760 GOSUB 1400
770 Z3 = 0
780 FOR I = 1 TO C
790 Z3 = Z3 + A(I) * X(I) / (A(I)
- F)
800 NEXT I

```

```

810 R1 = Z3 - 1
820 R = R2 * R1
830 X = (R - R1) / (R + 1)
840 Y = 1 - EXP ((1 + 54.4 * X) *
      (X - 1) / ((11 + 117.2 * X) *
      X ^ .5))
845 PRINT " RESULTADOS : "
850 N = (N1 + Y) / (1 - Y)
852 PRINT
854 PRINT " D LK/F LK = "; FN R(
      S(1)); " B HK/F HK = "; FN R
      (S(2))
856 PRINT
860 PRINT "DISTRIBUCION DE LOS C
      OMPONENTES: "
865 PRINT
870 FOR I = 1 TO C
880 PRINT "XD (;I;)" = ";X(I)
890 NEXT I
900 PRINT
910 FOR I = 1 TO C
920 PRINT "XB (;I;)" = ";Y(I)
930 NEXT I
940 PRINT
950 PRINT " R MIN = "; FN R(R1);
      " R = "; FN R(R)
960 PRINT
970 PRINT " ETAPAS TEORICAS : "
975 PRINT
980 PRINT " N MIN = "; FN R(N1);
      " N = "; FN R(N)
990 GOSUB 1650
1000 END
1100 REM CALCULO DE GEDDES
1110 D(K1) = S(1) * F(K1)
1120 B(K1) = F(K1) - D(K1)
1130 D(K2) = (1 - S(2)) * F(K2)
1140 B(K2) = F(K2) - D(K2)
1150 C1 = LOG (D(K2) / B(K2))
1160 C2 = LOG ((D(K1) / B(K1)) *
      (B(K2) / D(K2))) / LOG (A(K
      1))
1165 Z1 = 0
1167 Z2 = 0
1170 FOR I = 1 TO C
1180 IF I = K1 THEN 1220
1190 IF I = K2 THEN 1220
1200 B(I) = F(I) / (1 + EXP (C1 +
      C2 * LOG (A(I))))
1210 D(I) = F(I) - B(I)
1220 Z1 = Z1 + D(I)
1230 Z2 = Z2 + B(I)
1240 NEXT I
1250 FOR I = 1 TO C
1260 X(I) = D(I) / Z1
1270 Y(I) = B(I) / Z2
1280 NEXT I
1290 E(1) = X(K2) - Y
1300 E(2) = Y(K1) - Y
1310 PRINT

```

```

1400 T(1) = (A(K1) + A(K2)) / 2
1410 Z1 = 0
1420 FOR I = 1 TO C
1430 Z1 = Z1 + A(I) * U(I) / (A(I)
) - T(1))
1440 NEXT I
1450 F20 = Z1 - (1 - Q)
1460 G20 = (A(K2) * W(K2) / (A(K2)
) - T(1))) - F20
1470 U(1) = A(K2) * (1 - W(K2) /
G20)
1480 T(2) = U(1)
1490 FOR J = 2 TO 50
1500 Z1 = 0
1510 FOR I = 1 TO C
1520 Z1 = Z1 + (A(I) * W(I) / (A(I)
) - T(J))
1530 NEXT I
1540 F20 = Z1 - (1 - Q)
1550 G20 = (A(K2) * W(K2) / (A(K2)
) - T(J))) - F20
1560 U(J) = A(K2) * (1 - W(K2) /
G20)
1570 Z2 = (U(J) - U(J - 1)) / (T(
J) - T(J - 1))
1580 T(J + 1) = T(J) + (U(J) - T(
J)) / (1 - Z2)
1590 IF ABS (T(J + 1) - T(J)) <
1E - 5 THEN 1610
1600 NEXT J
1610 F = T(J + 1)
1620 RETURN
1650 REM CALCULO DEL PLATO OPTI
MO DE ALIMENTACION
1660 D = 0
1670 B = 0
1680 FOR I = 1 TO C
1690 D = D + D(I)
1700 B = B + B(I)
1710 NEXT I
1720 W = 0.206 * LOG (B * W(K2) /
(D * W(K1)) * (Y(K1) / X(K2)
) ^ 2) / LOG (10)
1730 P = N / (1 + 10 ^ W)
1750 PRINT
1760 PRINT "PLATO OPTIMO DE ALIM
ENTACION"
1780 PRINT "DESDE EL FONDO = "; FN
R(P)
1800 RETURN

```

JPR#0
JLIST

```
5 HOME
8 PRINT
10 PRINT " UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTONOMA "
20 PRINT " DE MEXICO
"
22 PRINT
24 PRINT " FES - CUAUTIL
AN "
25 PRINT
26 PRINT " ****"
28 PRINT
30 PRINT " TESIS DE LICENCIATUR
A: "
31 PRINT
32 PRINT " FLORES FLORES
RODOLFO "
34 PRINT " GARCIA RAMIREZ
MARCELA MA. E. "
36 PRINT " VAZQUEZ MORENO
FLAVIO SALVADOR "
38 PRINT
40 PRINT " DIRECTOR DE TESIS : "

42 PRINT
44 PRINT " ING. ELIGIO PASTOR
RIVERA "
45 PRINT
46 PRINT " ****"
47 PRINT
48 PRINT " DESTILACION MULTICO
MPONENTE "
50 PRINT " METODO THETA
"

100 PRINT
140 INPUT " NUMERO DE ETAPAS = "
;N
150 INPUT " NUMERO DEL PLATO DE
ALIMENTACION= ";F1
160 INPUT " NUMERO DE COMPONENTE
S = ";C
200 DIM Z(C)
210 DIM C(10,C)
220 DIM L(N,C + 1)
230 DIM V(N,C + 1)
240 DIM B(C)
250 DIM D(C)
260 DIM A(F1,C)
270 DIM S(N,C)
280 DIM K(N + 1,C)
290 DIM W(F1,C)
300 DIM P(F1,C)
310 DIM N(N,C)
320 DIM C(N,C)
330 DIM T(K)
340 DIM E(C)
350 DIM Y(N + 1,C)
360 DIM Y(N + 1,C)
```

```

370 DIM H(2 * N + 2,C)
370 PRINT
400 FOR I = 1 TO C
410 PRINT
420 PRINT " COMPONENTE (";I;")
      :
430 INPUT " X ALIM = ";Z(I)
440 PRINT " CONSTANTES PARA CAL
      CULO DE K: "
450 INPUT " A1 = ";C(1,I)
460 INPUT " A2 = ";C(2,I)
470 INPUT " A3 = ";C(3,I)
480 INPUT " A4 = ";C(4,I)
490 PRINT
500 PRINT " CONSTANTES PARA CAL
      CULO DE HV Y HL : "
510 INPUT " C1= ";C(5,I)
520 INPUT " C2= ";C(6,I)
530 INPUT " C3= ";C(7,I)
540 PRINT
550 INPUT " E1= ";C(8,I)
560 INPUT " E2= ";C(9,I)
570 INPUT " E3= ";C(10,I)
580 NEXT I
590 PRINT
600 INPUT "PRESION (PSIAS) = ";P

610 INPUT "TEMPERATURA DE LA ALI
      MENTACION (R) = ";T5
615 GOSUB 2600
618 PRINT
620 INPUT "FLUJO DE ALIMENTACION
      = ";F
630 INPUT "FLUJO DEL DESTILADO =
      ";D
640 B = F - D
660 INPUT "RELACION DE REFLUJO =
      ";R
670 V(1,C + 1) = D * (R + 1)
680 L(1,C + 1) = R * D
720 PRINT
730 FOR J = 1 TO N
740 READ T(J)
745 IF J = 1 THEN 780
750 FOR I = 1 TO C
760 K(J,I) = (C(1,I) + C(2,I) * T
      (J) + C(3,I) * T(J) ^ 2 + C(
      4,I) * T(J) ^ 3) ^ 3 * T(J)
770 NEXT I
780 NEXT J
795 T = T5
790 FOR J = 2 TO F1 - 1
800 L(J,C + 1) = L(J - 1,C + 1)
810 V(J,C + 1) = V(J - 1,C + 1)
820 NEXT J
830 V(F1,C + 1) = V(F1 - 1,C + 1)
      - (1 - Q) * F
840 L(F1,C + 1) = L(F1 - 1,C + 1)
      + Q * F
850 V(F1 + 1,C + 1) = V(F1,C + 1)

```

```

860 FOR J = F1 + 1 TO N
870 L(J,C + 1) = L(J - 1,C + 1)
875 IF J = N THEN 890
880 V(J + 1,C + 1) = V(J,C + 1)
890 NEXT J
895 L(N,C + 1) = B
900 FOR I = 1 TO C
910 W(1,I) = R + 1
920 P(1,I) = R
930 NEXT I
940 FOR J = 2 TO F1
950 FOR I = 1 TO C
960 W(J,I) = P(J - 1,I) + 1
970 A(J,I) = L(J,C + 1) / (K(J,I)
    * V(J,C + 1))
980 P(J,I) = A(J,I) * W(J,I)
990 NEXT I
1000 NEXT J
1020 FOR I = 1 TO C
1025 N(N,I) = 1
1030 S(N,I) = K(N,I) * V(N,C + 1)
    / L(N,C + 1)
1040 N(N - 1,I) = S(N,I) + 1
1050 NEXT I
1060 FOR K = 1 TO (N - F1)
1070 J = N - K
1080 FOR I = 1 TO C
1090 S(J,I) = K(J,I) * V(J,C + 1)
    / L(J,C + 1)
1100 Q(J,I) = S(J,I) * N(J,I)
1110 N(J - 1,I) = S(J,I) * N(J,I)
    + 1
1120 NEXT I
1130 NEXT K
1140 FOR I = 1 TO C
1150 E(I) = (P(F1 - 1,I) + X(N +
    1,I) * Q / Z(I)) / (Q(F1,I) +
    Y(N + 1,I) * (1 - Q) / Z(I))

1170 NEXT I
1180 U1 = 1
1190 FOR K = 1 TO 20
1200 S1 = 0
1210 S2 = 0
1220 FOR I = 1 TO C
1230 D(I) = F * Z(I) / (1 + U1 *
    E(I))
1250 S1 = S1 + D(I)
1260 S2 = S2 + F * Z(I) * E(I) /
    (1 + U1 * E(I)) ** 2
1270 NEXT I
1280 G = S1 - D
1290 G1 = - U2
1300 U2 = U1 - G / G1
1310 IF ABS(U2 - U1) < 1E - 4 THEN
    1340
1320 U1 = U2
1330 NEXT K
1340 PRINT THETA

```

```

1345 FOR I = 1 TO C
1350 X(1,I) = D(I) / D
1360 NEXT I
1370 J = 1
1380 GOSUB 3100
1400 FOR J = 2 TO F1
1410 S1 = 0
1420 FOR I = 1 TO C
1430 L(J,I) = P(J,I) * D(I)
1450 S1 = S1 + L(J,I)
1460 NEXT I
1470 FOR I = 1 TO C
1480 X(J,I) = L(J,I) / S1
1490 NEXT I
1500 GOSUB 3100
1510 NEXT J
1530 FOR I = 1 TO C
1540 B(I) = F * Z(I) - D(I)
1550 NEXT I
1560 FOR J = F1 + 1 TO N
1570 S1 = 0
1575 S2 = 0
1580 FOR I = 1 TO C
1590 L(J,I) = N(J,I) * B(I)
1595 V(J,I) = S(J,I) * L(J,I)
1600 S1 = S1 + L(J,I)
1605 S2 = S2 + V(J,I)
1610 NEXT I
1620 FOR I = 1 TO C
1630 X(J,I) = L(J,I) / S1
1634 Y(J,I) = V(J,I) / S2
1640 NEXT I
1660 GOSUB 3100
1670 NEXT J
1700 FOR J = 1 TO N
1710 FOR I = 1 TO C
1720 H(J,I) = (C(5,I) + C(6,I) *
T(J) + C(7,I) * T(J) ^ 2) ^
2
1730 H(J + N,I) = (C(8,I) + C(9,I)
) * T(J) + C(10,I) * T(J) ^
2) ^ 2
1740 NEXT I
1750 NEXT J
1800 S1 = 0
1830 FOR I = 1 TO C
1840 S1 = S1 + (H(N + 2,I) - H(1,
I)) * X(1,I)
1860 NEXT I
1870 Q2 = (L(1,C + 1) + D) * S1
1900 FOR J = 2 TO F1 - 2
1910 S1 = 0
1920 S2 = 0
1940 FOR I = 1 TO C
1950 S1 = S1 + (H(J + N + 1,I) -
H(1,I)) * X(1,I)
1960 S2 = S2 + (H(J + N + 1,I) -
H(J,I)) * X(J,I)
1970 NEXT I
1980 L(J,C + 1) = (Q2 - D * S1) /
S2
1990 V(J + 1,C + 1) = L(J,C + 1) +

```

```

D
2000 NEXT J
2010 S1 = 0
2020 S2 = 0
2030 S3 = 0
2040 FOR I = 1 TO C
2050 S1 = S1 + (H(F1 + N, I) - H(
, I) * X(1, I)
2060 S2 = S2 + (H(F1 + N, I) - H(2
* N + 2, I) * Y(N + 1, I)
2070 S3 = S3 + (H(F1 + N, I) - H(F
1 - 1, I) * X(F1 - 1, I)
2080 NEXT I
2090 L(F1 - 1, C + 1) = (Q2 - D *
S1 + F * (1 - D) * S2) / S3
2100 V(F1, C + 1) = L(F1 - 1, C + 1
) + D - F * (1 - D)
2110 S1 = 0
2120 S2 = 0
2140 FOR I = 1 TO C
2150 S1 = S1 + H(N, I) * X(N, I)
2160 S2 = S2 + H(1, I) * X(1, I)
2170 NEXT I
2180 Q3 = B * S1 + D * S2 + Q2 -
(F * (1 - Q) * H2 + F * Q *
H1)
2200 FOR J = F1 TO N - 1
2210 S1 = 0
2220 S2 = 0
2230 FOR I = 1 TO C
2240 S1 = S1 + (H(N, I) - H(J, I)) *
X(N, I)
2250 S2 = S2 + (H(J + N + 1, I) -
H(J, I)) * Y(J + 1, I)
2260 NEXT I
2270 V(J + 1, C + 1) = (Q3 - D * S
1) / S2
2280 L(J, C + 1) = V(J + 1, C + 1) +
B
2290 NEXT J
2300 IF ABS (U1 - 1) < 1E - 3 THEN
2330
2310 T = T(F1)
2320 GOTO 940
2330 PRINT
2335 PRINT "PERFIL DE TEMPERATUR
AS (R)"
2340 FOR J = 1 TO N
2350 PRINT " T("; J - 1; ") = "; T
(J)
2360 NEXT J
2370 PRINT
2390 PRINT " COMPOSICIONES : "
2400 FOR I = 1 TO C
2410 PRINT " XA("; I; ") = "; X(1, I)
2420 NEXT I
2430 PRINT
2440 FOR I = 1 TO C
2450 PRINT " XB("; I; ") = "; X(N, I)
2460 NEXT I

```

```

2500 END
2500 REM SUBROUTINE FLASH
2620 FOR I = 1 TO C
2630 K(1,I) = (C(1,I) + C(2,I) *
      T5 + C(3,I) * T5 ^ 2 + C(4,I)
      ) * T5 ^ 3) ^ 3 * T5
2640 NEXT I
2650 Q1 = 0.5
2660 FOR K = 1 TO 23
2670 S1 = 0
2680 S2 = 0
2690 FOR I = 1 TO C
2700 S1 = S1 + Z(I) * (K(1,I) - 1
      ) / (K(1,I) - Q1 * (K(1,I) -
      1))
2710 S2 = S2 + Z(I) * ((K(1,I) -
      1) / (K(1,I) - Q1 * (K(1,I) -
      1))) ^ 2
2720 NEXT I
2730 G = S1
2740 Q1 = S2
2750 Q = Q1 - G / Q1
2760 IF ABS(Q - Q1) < 1E - 4 THEN
2800
2770 Q1 = Q
2780 NEXT K
2800 PRINT "CONDICION TERMICA DE
      ALIMENTACION = "; Q
2805 PRINT
2810 S2 = 0
2815 S1 = 0
2840 FOR I = 1 TO C
2850 X(N + 1, I) = Z(I) / (Q + (1 -
      Q) * K(1, I))
2860 Y(N + 1, I) = K(1, I) * X(N +
      1, I)
2870 H(2 * N + 1, I) = (C(5, I) + C
      (6, I) * T5 + C(7, I) * T5 ^ 2
      ) ^ 2
2880 H(2 * N + 2, I) = (C(8, I) + C
      (9, I) * T5 + C(10, I) * T5 ^
      2) ^ 2
2890 S1 = S1 + H(2 * N + 1, I) * X
      (N + 1, I)
2900 S2 = S2 + H(2 * N + 2, I) * Y
      (N + 1, I)
2910 NEXT I
2920 H2 = S2
2930 H1 = S1
3000 RETURN
3100 REM SUBROUTINA TEMP. DE BUR
      BUJA
3110 T1 = T(J)
3120 FOR K = 1 TO 23
3130 S1 = 0
3140 S2 = 0
3150 FOR I = 1 TO C
3160 K(J, I) = (C(1, I) + C(2, I) *
      T1 + C(3, I) * T1 ^ 2 + C(4, I)
      ) * T1 ^ 3) ^ 3 * T1
3170 K(J + 1, I) = S * T1 * (C(1, I)

```

```
      ) + C(2,I) * T1 + C(3,I) * T
      1 ^ 2 + C(4,I) * T1 ^ 3) ^ 2
      * (C(2,I) + 2 * C(3,I) * T1
      + 3 * C(4,I) * T1 ^ 2) + K(
      J,I) / T1
3180 S1 = S1 + K(J,I) * X(J,I)
3190 S2 = S2 + K(J + 1,I) * X(J,I)
      )
3200 NEXT I
3220 G = S1 - 1
3230 G1 = S2
3240 T2 = T1 - G / G1
3250 IF ABS (T2 - T1) < 1E - 3 THEN
      3290
3260 T1 = T2
3270 NEXT K
3290 T(J) = T2
3300 RETURN
```

5.4 Limitaciones y alcance de la guía.

En los dos métodos cortos y el método riguroso propuesto se ha asumido que se conoce el comportamiento del sistema con la temperatura y la presión por lo que si se diseña la separación de componentes donde no se dispone de información para estimar propiedades como constantes de equilibrio líquido-vapor y entalpías la guía no sería aplicable. Además se ha supuesto que la caída de presión por plato es despreciable y que no influye en los equilibrios, lo cual, sólo es cierto a presiones elevadas.

Las aplicaciones más complejas de la destilación multicomponente se realizan en el campo de la refinación de petróleo, en el que los productos son mezclas de cientos de hidrocarburos, tantos que su identidad y número real no pueden determinarse fácilmente. Las columnas de destilación para estos productos no pueden diseñarse mediante los métodos propuestos sino que deben basarse en estudios de laboratorio en equipo a pequeña escala.

APENDICE

A

DATOS DE EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR Y ENTALPIA

Figura A-1 Diagrama de DePriester. Intervalo de bajas temperaturas

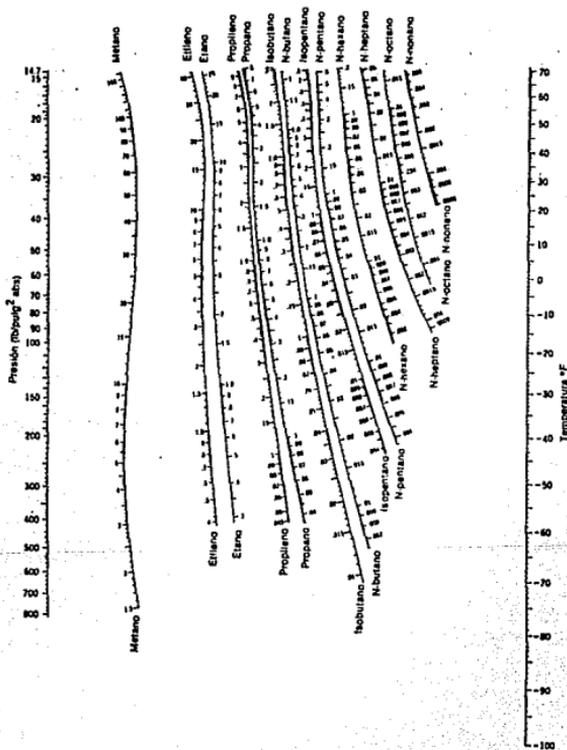


Figura A-2 Diagramas de DePriester. Intervalo de temperaturas elevadas.

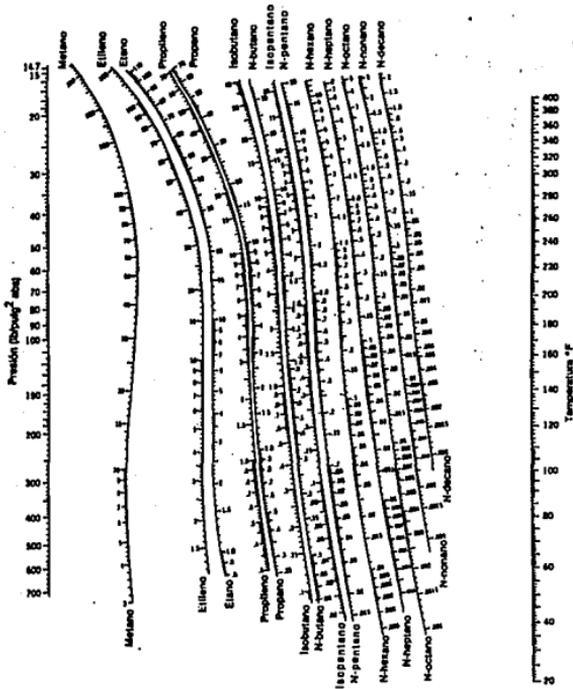


Figura A-3 Nomograma de Hadden-Grayson.

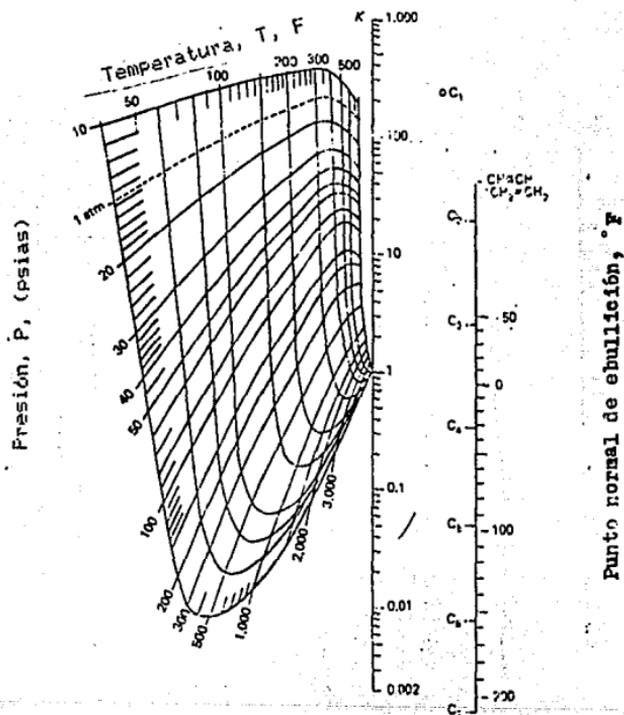


Tabla A-1 Datos para constantes de equilibrio liquido-vapor.

$$P = 300 \text{ lb/pulg}^2 \text{ abs. } (K/T)^{1/2} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 \quad (T \text{ en } ^\circ\text{R})$$

Componente	$a_1 \times 10^2$	$a_2 \times 10^2$	$a_3 \times 10^6$	$a_4 \times 10^{11}$
CH ₄	32.718139	-9.6951405	6.9229334	-47.361298
C ₂ H ₆	-5.177995	62.124576	-37.562082	8.0145501
C ₃ H ₈	-9.8400210	67.545943	-37.459290	-9.0732459
C ₄ H ₁₀	-25.096770	102.39287	-75.221710	153.84709
C ₅ H ₁₂	-14.512474	53.638924	-5.3051604	-173.98129
i-C ₄ H ₁₀	-10.104481	21.400418	38.564266	-353.65419
i-C ₅ H ₁₂	-18.967651	61.239667	-17.891649	-90.855512
n-C ₆ H ₁₄	-14.181715	36.866353	16.521412	-248.23843
i-C ₆ H ₁₄	-7.5488400	3.2623431	58.307340	-414.92323
n-C ₇ H ₁₆	-7.5435390	2.0584231	59.138344	-413.12409
n-C ₈ H ₁₈	1.1506919	-33.885839	97.795401	-542.35941
n-C ₉ H ₂₀	5.5692758	-30.705967	112.17338	-574.89330
n-C ₁₀ H ₂₂	7.1714400	-52.608330	103.72034	-496.46551
400	2.5278960	-17.311330	33.502879	-126.23039
500	3.3123291	-16.652384	24.310911	-64.148982

Tabla A-2 Datos para entalpías.

$$P = 300 \text{ lb/pulg}^2 \text{ abs. } (h_f)^{1/2} = c_{11} + c_{12} T + c_{13} T^2 \quad (T \text{ en } ^\circ\text{R})$$

$$(H_f)^{1/2} = e_{11} + e_{12} T + e_{13} T^2 \quad (T \text{ en } ^\circ\text{R}). \text{ Btu/lb mol}$$

Componente	c_1	$c_2 \times 10$	$c_3 \times 10^4$	e_1	$e_2 \times 10^4$	$e_3 \times 10^4$
CH ₄	-17.899210	1.7395763	-3.7596114	44.445874	501.04559	7.3207219
C ₂ H ₆	-7.2915000	1.5411962	-1.6088376	56.79638	615.93154	2.4088730
C ₃ H ₈	-8.4857000	1.6284636	-1.9498601	61.334520	588.75430	11.9486654
C ₄ H ₁₀	-12.427900	1.8834652	-2.4839140	71.828480	658.55130	11.299585
C ₅ H ₁₂	-14.500060	1.9802223	-2.9048837	81.795910	389.81919	36.470900
i-C ₄ H ₁₀	-16.553450	2.161865	-3.1476209	139.17444	-822.39488	120.39298
i-C ₅ H ₁₂	-16.5534050	2.1618650	-3.1476209	147.65414	-1185.2942	152.87778
n-C ₆ H ₁₄	-20.898110	2.3005743	-3.8663417	152.66798	-1153.4842	146.64125
i-C ₆ H ₁₄	-23.356440	2.5017453	-4.3917897	130.96679	-197.98604	82.549947
n-C ₇ H ₁₆	-24.371540	2.5636200	-4.6499694	128.90152	2.0309603	64.501496
n-C ₈ H ₁₈	-23.870410	2.6768089	-4.4197793	85.834950	1522.3917	-34.018395
n-C ₉ H ₂₀	-25.314530	2.8246389	-4.5418718	94.682620	1479.5387	-19.105299
n-C ₁₀ H ₂₂	-22.235050	2.8478429	-3.8850819	106.32806	1328.3949	1.6230733
400	-203.32192	6.3932857	-21.611909	72.378160	1893.3822	-59.003314
500	1.9205300	3.0179232	-2.2183809	138.49658	1497.8171	18.641269

Tabla A-3 Datos para constantes de equilibrio líquido-vapor.

$$P = 50 \text{ lb/pulg}^2 \text{ abs.}; (k_i/T)^{1/3} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 \quad (T \text{ en } ^\circ\text{R})$$

Componente	$a_1 \times 10^4$	$a_2 \times 10^3$	$a_3 \times 10^6$	$a_4 \times 10^9$
CH ₄	5.097584	0.2407971	-0.5376841	0.2354444
C ₂ H ₆	-7.578061	3.602315	-3.955079	1.456571
C ₃ H ₈	-0.1246870	4.932274	-5.430016	2.036879
n-C ₄ H ₁₀	-6.460362	2.319527	-2.058817	0.6341839
n-C ₅ H ₁₂	-8.381815	2.952740	-2.949674	1.053882
n-C ₆ H ₁₄	-2.634813	-0.5820756	0.0990418	-0.2293738
n-C ₇ H ₁₆	-0.4456271	0.2688671	1.065180	-0.5817661
500	9.139924	-3.573887	4.539999	-1.810713

Tabla A-4 Datos para constantes de equilibrio líquido-vapor.

$$P = 400 \text{ lb/pulg}^2 \text{ abs.}; (K_i/T)^{1/3} = a_{1i} + a_{2i} T + a_{3i} T^2 + a_{4i} T^3 \quad (T \text{ en } ^\circ\text{R})$$

Componente	$a_1 \times 10^4$	$a_2 \times 10^3$	$a_3 \times 10^6$	$a_4 \times 10^9$
CH ₄	-3.2551482	2.3553786	-3.1371170	1.3397973
C ₂ H ₆	-2.7947232	1.4124232	-1.4582948	0.50974162
C ₃ H ₈	-2.7980091	1.1811943	-1.0935041	0.35180421
i-C ₄ H ₁₀	2.3209137	0.87122379	-0.66100972	0.1667774
n-C ₄ H ₁₀	-2.3203344	0.83753226	-0.61774360	0.15243376
i-C ₅ H ₁₂	-0.6981454	0.099962037	0.39689556	-0.29076073
n-C ₅ H ₁₂	0.37103008	-0.36257004	0.99113800	-0.54441110
500	1.9642644	-0.87121972	1.0386630	-0.39478662

APENDICE

B

PROGRAMAS DE DESTILACION MULTICOMPONENTE POR COMPUTADORA

UNDERWOOD

BROWN-MARTIN

LEWIS-MATHESON

AKERS-WADE

JPR#0
JLIST

```
5 40ME
8 PRINT
10 PRINT " UNIVERSIDAD NACIONAL
    AUTONOMA"
20 PRINT " DE MEXICO"
22 PRINT
24 PRINT " FES - CUAUTITL
    AN "
25 PRINT
26 PRINT " **** "
28 PRINT
30 PRINT " TESIS DE LICENCIATUR
    A: "
31 PRINT
32 PRINT " FLORES FLORES
    RODOLFO"
34 PRINT " GARCIA RAMIREZ
    MARCELA MA. E. "
36 PRINT " VAZQUEZ MORENO
    FLAVIO SALVADOR "
38 PRINT
40 PRINT " DIRECTOR DE TESIS: "
42 PRINT
44 PRINT " ING. ELIGIO PASTOR RI
    VERO MTZ."
46 PRINT
46 PRINT " **** "
47 PRINT
48 PRINT " DESTILACION MULTICO
    MPONENTE"
50 PRINT
60 PRINT TAB( 8) "METODO DE UNDE
    RWOOD"
65 PRINT
120 DIM E(20)
130 DIM U(20)
140 DIM T(20)
150 DIM A(20)
160 DIM B(20)
170 DIM D(20)
180 DIM F(20)
200 INPUT "FLUJO DE ALIMENTACION
    = ";F
210 INPUT "FLUJO DE DESTILADO =
    ";D
220 B = F - D
230 INPUT "RELACION DE REFLUJO =
    ";R
240 INPUT "CONDICION TERMICA DE
    ALIMENTACION = ";Q
250 L = R * D
260 V = L + D
270 VI = V - (1 - Q) * F
280 LI = L + Q * F
290 INPUT "NUMERO DE COMPONENTES
    = ";C
300 INPUT "NUMERO DE NO CLAVES L
```

```

IGEROS = ";C1
310 PRINT "DAR DATOS DE NO CLAVE
+ LIGEROS"
320 FOR J = 1 TO C1
330 PRINT
340 PRINT "COMPONENTE (";J;")"
350 INPUT "Z = ";F(J)
360 INPUT "XD = ";D(J)
370 INPUT "VOLATILIDAD RELATIVA
= ";A(J)
380 NEXT J
390 PRINT
400 PRINT "DAR DATOS DEL CLAVE L
IGERO"
410 PRINT
420 INPUT "Z = ";F(C1 + 1)
430 INPUT "XD = ";D(C1 + 1)
440 INPUT "XB = ";B(C1 + 1)
450 INPUT "VOLATILIDAD RELATIVA
= ";A(C1 + 1)
460 PRINT
470 PRINT "DAR DATOS DEL CLAVE P
ESADO"
480 PRINT
490 INPUT "Z = ";F(C1 + 2)
500 INPUT "XD = ";D(C1 + 2)
510 INPUT "XB = ";B(C1 + 2)
520 A(C1 + 2) = 1
530 PRINT
540 PRINT "DAR DATOS DE NO CLAVE
E PESADOS"
550 FOR J = C1 + 3 TO C
560 PRINT
565 PRINT "COMPONENTE (";J;") :
"
570 INPUT "Z = ";F(J)
590 INPUT "XB = ";B(J)
600 INPUT "VOLATILIDAD RELATIVA
= ";A(J)
610 NEXT J
620 PRINT
630 X(1) = (A(C1 + 2) + A(C1 + 1)
) / 2
640 X(2) = (A(C1 + 2) + A(C1 + 3)
) / 2
650 GOSUB 1000
660 Y(1) = (A(C1) + A(C1 + 1)) /
2
670 Y(2) = (A(C1 + 1) + A(C1 + 2)
) / 2
680 GOSUB 1300
690 FOR J = 1 TO C1
700 P(J) = (D(J) / 9) / (A(J) / X
(2) - 1)
710 S1 = S1 + P(J)
720 NEXT J
730 FOR J = C1 + 3 TO C
740 P(J) = (D(J) * B / L1) / (( -
A(J) / Y(1))
750 S2 = S2 + P(J)
760 NEXT J

```

```

770 M = (D(C1 + 1) * D / V + B(C1
+ 1) * B / V1) / (D(C1 + 2)
* D / V + B(C1 + 2) * B / V
1)
780 P(C1 + 2) = (1 - S1 - S2) / (
1 + M)
790 P(C1 + 1) = M * P(C1 + 2)
800 FOR J = 1 TO 2
810 FOR I = 1 TO C
820 W(J) = W(J) + (A(I) * P(I) /
(A(I) - X(J)))
830 E(J) = E(J) + (A(I) * P(I) /
(A(I) - Y(J)))
840 NEXT I
850 NEXT J
860 N1 = LOG ( ABS (W(1) / W(2))
) / LOG (X(2) / X(1))
870 N2 = LOG (E(2) / E(1)) / LOG
(Y(2) / Y(1))
880 N = N1 + N2
890 PRINT
900 PRINT "NUMERO DE ETAPAS:"
910 PRINT "RECTIFICACION =" ; N1
920 PRINT "AGOTAMIENTO =" ; N2
930 PRINT "TTOTALES =" ; N
940 END
1000 FOR K = 1 TO 2
1010 T(1) = X(K)
1020 Z1 = 0
1030 FOR J = 1 TO (C1 + 2)
1040 Z1 = A(I) * D(I) * D / (A(I)
- T(1)) + Z1
1050 NEXT I
1060 F = Z1 - V
1070 G = A(C1 + K) * D(C1 + K) *
D / (A(C1 + K) - T(1)) - F
1080 U(1) = A(C1 + K) * (1 - D(C1
+ K) * D / G)
1090 T(2) = U(1)
1100 FOR J = 2 TO 25
1110 Z1 = 0
1120 FOR I = 1 TO (C1 + 2)
1130 Z1 = Z1 + A(I) * D(I) * D /
(A(I) - T(J))
1140 NEXT I
1150 F = Z1 - V
1160 G = A(C1 + K) * D(C1 + K) *
D / (A(C1 + K) - T(J)) - F
1170 U(J) = A(C1 + K) * (1 - D(C1
+ K) * D / G)
1180 Z2 = (U(J) - U(J - 1)) / (T(
J) - T(J - 1))
1190 T(J + 1) = T(J) + ((U(J) - T
(J)) / (1 - Z2))
1200 IF ABS (T(J + 1) - T(J)) <
!E - 5 THEN 1220
1210 NEXT J
1220 X(K) = T(J + 1)
1230 NEXT K
1240 PRINT " X(1) = "; X(1)

```

```

1250 PRINT " X(2)= ";X(2)
1255 PRINT
1260 RETURN
1300 FOR K = 1 TO 2
1310 T(1) = Y(K)
1320 Z1 = 0
1330 FOR I = (C1 + 1) TO C
1340 Z1 = A(I) * B(I) * B / (A(I)
- T(1)) + Z1
1350 NEXT I
1360 F = Z1 + V1
1370 G = A(C1 + K) * B(C1 + K) *
B / (A(C1 + K) - T(1)) - F
1380 U(1) = A(C1 + K) * (1 - B(C1
+ K) * B / G)
1390 T(2) = U(1)
1400 FOR J = 2 TO 25
1410 Z1 = 0
1420 FOR I = (C1 + 1) TO C
1430 Z1 = Z1 + A(I) * B(I) * B /
(A(I) - T(J))
1440 NEXT I
1450 F = Z1 + V1
1460 G = A(C1 + K) * B(C1 + K) *
B / (A(C1 + K) - T(J)) - F
1470 U(J) = A(C1 + K) * (1 - B(C1
+ K) * B / G)
1480 Z2 = (U(J) - U(J - 1)) / (T(
J) - T(J - 1))
1490 T(J + 1) = T(J) + (U(J) - T(
J)) / (1 - Z2)
1500 IF ABS (T(J + 1) - T(J)) <
1E - 5 THEN 1520
1510 NEXT J
1520 Y(K) = T(J + 1)
1530 NEXT K
1540 PRINT " Y(1)= ";Y(1)
1550 PRINT " Y(2)= ";Y(2)
1570 RETURN

```

```

1PR#0
JLIST
.
5 HOME
8 PRINT
10 PRINT " UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTONOMA"
20 PRINT " DE MEYI
CO "
24 PRINT " FES - CUAU
TITLAN"
25 PRINT
26 PRINT " **** "

28 PRINT
30 PRINT " TESIS DE LICENCIATUR
A: "
31 PRINT
32 PRINT " FLORES FLORES
RODOLFO "
34 PRINT " GARCIA RAMIREZ
MARCELA MA. E. "
36 PRINT " VAZQUEZ MORENO
FLAVIO SALVADOR "
38 PRINT
40 PRINT " DIRECTOR DE TESIS: "
42 PRINT
44 PRINT " ING. ELIGIO PASTOR RI
VERO MTZ."
45 PRINT
46 PRINT " **** "
47 PRINT
48 PRINT " DESTILACION MULTICOM
PONENTE "
50 PRINT
60 PRINT TAB( A)"METODO DE BROW
N-MARTIN"
65 PRINT
180 DIM F(20)
182 DIM D(20)
184 DIM B(20)
186 DIM A(20)
188 DIM K(20)
190 DIM X(20)
192 DIM O(20)
195 PRINT
200 INPUT " NUMERO DE COMPONENTE
S = ";C
210 PRINT
220 INPUT " NUMERO DE NO CLAVES
LIGEROS = ";C1
230 PRINT
240 PRINT " DATOS DE COMPONENTES
NO CLAVE LIGEROS:"
250 FOR C = 1 TO C1
255 PRINT
260 PRINT " COMPONENTE (";J;") :
"
270 INPLT " Z = ";F(J)
280 INPUT " X0 = ";O(J)
290 INPUT " VOLATILIDAD RELATIVA
= ";A(J)
300 NEXT J

```

```

310 PRINT
320 PRINT " DATOS DEL CLAVE LIGE
RD : "
330 INPUT " Z = ";F(C1 + 1)
340 INPUT " XD = ";D(C1 + 1)
350 INPUT " XB = ";B(C1 + 1)
360 INPUT " VOLATILIDAD RELATIVA
= ";A(C1 + 1)
370 PRINT
380 PRINT " DATOS DEL CLAVE PESA
DO : "
390 INPUT " Z = ";F(C1 + 2)
400 INPUT " XD = ";D(C1 + 2)
410 INPUT " XB = ";B(C1 + 2)
420 A(C1 + 2) = 1.00
430 PRINT
440 PRINT " DATOS DE NO CLAVES P
ESADOS : "
450 FOR J = (C1 + 3) TO C
455 PRINT
460 PRINT " COMPONENTE (";J;") :
"
470 INPUT " Z = ";F(J)
480 INPUT " XB = ";B(J)
490 INPUT " VOLATILIDAD RELATIVA
= ";A(J)
500 NEXT J
510 PRINT
520 O = F(C1 + 1) / F(C1 + 2)
525 INPUT " FLUJO DE ALIMENTACION
N = ";F
530 INPUT " FLUJO DE DESTILADO =
";D
540 B = F - D
560 INPUT " CONDICION TECNICA DE
ALIMENTACION = ";Q
570 GOSUB 1000
580 GOSUB 1400
590 IF (T2 > T3) THEN GOTO 620
600 R1 = T3
610 GOTO 630
620 R1 = T2
630 N1 = LOG ((D(C1 + 1) / B(C1 +
1)) * (B(C1 + 2) / D(C1 + 2)
)) / LOG (A(C1 + 1))
640 INPUT " RAZON DE REFLUJO = "
;R
650 X = (R - R1) / (R + 1)
660 Y = 1 - EXP ((1 + 54.4 * X) *
(X - 1) / ((1 + 117.2 * X) *
X ^ 0.5))
670 N = (N1 + Y) / (1 - Y)
680 PRINT " RESULTADOS : "
690 PRINT
700 PRINT " F MIN = ";F1
800 PRINT " R = ";R
910 PRINT
920 PRINT " N MIN = ";N1
930 PRINT " N = ";N
940 PRINT
950 END
1000 FOR J = 1 TO 4
1010 PRINT

```

```

1020 PRINT " DE UN VALOR DE R =1
N : "
1030 INPUT R(J)
1040 L1 = R(J) * D
1050 E = 1 / (1 + 1 / R(J))
1060 PRINT " A LA TEMPERATURA DE
K (HK) = "E;" DE LOS SIGUIE
NTES VALORES DE K(I) ... "
1070 S = 0
1080 FOR I = 1 TO (C1 + 1)
1090 PRINT " K ("I;") = "
1100 INPUT K(I)
1110 X(I) = D * D(I) / (K(I) * D +
L1 * (K(I) - 1))
1120 S = S + X(I)
1130 NEXT I
1140 X(C1 + 2) = 1 - S
1150 IF (X(C1 + 2) < 0) THEN 121
0
1160 O(J) = X(C1 + 1) / X(C1 + 2)
1170 PRINT " X LK/X HK = "O(J);
" R = "R(J)
1180 IF (O(J) > (O + 1)) THEN 12
10
1190 IF (O(J) < (O - 1)) THEN 12
10
1200 GOTO 1230
1210 PRINT " VALOR FUERA DE RANG
O. NO ES ACEPTABLE "
1220 GOTO 1010
1230 NEXT J
1240 T2 = 0
1250 FOR I = 1 TO 4
1260 P1 = 1
1270 P2 = 1
1280 FOR J = 1 TO 4
1290 IF I = J THEN 1320
1300 P1 = P1 * (O - O(J))
1310 P2 = P2 * (O(I) - O(J))
1320 NEXT J
1330 T2 = T2 + P1 * R(I) / P2
1340 NEXT I
1350 PRINT " PARA XF LK /XF HK =
"O
1352 PRINT
1354 PRINT " RESULTADOS PARA RE
CTIFICACION : "
1355 PRINT
1360 PRINT " R MIN =
"IT2
1370 RETURN
1400 REM CALCULO EN FONDOS
1410 FOR J = 1 TO 4
1420 PRINT
1430 PRINT " DE UN VALOR DE R MI
N : "
1440 INPUT P(J)
1450 L2 = R(J) * D + D * "
1460 Q2 = L2 - B

```

```

1470 K(C1 + 1) = L2 / V2
1472 PRINT " CON EL VALOR DE K (
LK) = ";K(C1 + 1);" DE LOS S
IGUIENTES VALORES DE K(I): "

1474 PRINT
1480 S = 0
1490 FOR I = (C1 + 2) TO C
1492 PRINT
1494 PRINT " K (":I;":) = "
1496 INPUT K(I)
1500 X(I) = B * B(I) / (B * K(I) +
L2 * (1 - K(I)))
1505 PRINT
1510 S = S + X(I)
1520 NEXT I
1530 X(C1 + 1) = 1 - S
1540 IF (X(C1 + 1) < 0) THEN 1600
0
1550 Q(J) = X(C1 + 1) / X(C1 + 2)
1560 PRINT " XF LK/XF HK = ":Q(J
);" R = ";R(J)
1570 IF (Q(J) > (C + 1)) THEN 1600
00
1580 IF (Q(J) < (C - 1)) THEN 1600
00
1590 GOTO 1610
1600 PRINT " VALOR FUERA DE RANG
O, NO ES ACEPTABLE "
1610 GOTO 1420
1620 NEXT J
1630 T3 = 0
1640 FOR I = 1 TO 4
1650 P1 = 1
1660 P2 = 1
1670 FOR J = 1 TO 4
1680 IF (I = J) THEN 1710
1690 P1 = P1 * (C - Q(J))
1700 P2 = P2 * (Q(I) - C(J))
1710 NEXT J
1720 T3 = T3 + P1 * R(I) / P2
1730 NEXT I
1732 PRINT
1734 PRINT " RESULTADO EN ADJUSTE
AJUSTO : "
1736 PRINT
1740 PRINT " RANGA XF LK/XF HK =
":Q
1750 PRINT " R MEN =
":T3
1760 RETURN

```

JFR#0
JLIST

```
5 HOME
8 PRINT
10 PRINT " UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTONOMA "
20 PRINT " DE MEXICO
"
22 PRINT
24 PRINT " FES - CUAUTIL
AN "
25 PRINT
26 PRINT " ****"
28 PRINT
30 PRINT " TESIS DE LICENCIATUR
A: "
31 PRINT
32 PRINT " FLORES FLORES
RODOLFO "
34 PRINT " GARCIA RAMIREZ
MARCELA MA. E. "
36 PRINT " VAZQUEZ MORENO
FLAVIO SALVADOR "
38 PRINT
40 PRINT " DIRECTOR DE TESIS : "

42 PRINT
44 PRINT " ING. ELIGIO PASTOR
RIVERO MTZ."
45 PRINT
46 PRINT " ****"
47 PRINT
48 PRINT " DESTILACION MULTICO
MPONENTE "
50 PRINT
60 PRINT TAB( 5)"METODO DE LEWI
S-MATHESON"
200 DIM K(20)
205 DIM H(15)
210 DIM T(20)
220 DIM B(5,20)
230 DIM C(5,20)
240 DIM D(5,20)
250 DIM E(20,20)
260 DIM U(20)
270 DIM W(20,20)
280 DIM X(20,20)
290 DIM Y(20,20)
300 DIM Z(10,20)
310 DIM L(20,20)
320 DIM V(20,20)
340 PRINT
350 INPUT "NUMERO DE COMPONENTES
=";C
360 INPUT "NUMERO DE NO CLAVES L
IGEROS =" ;U
370 FOR I = 1 TO U
380 PRINT
390 PRINT "COMPONENTE: ";I
```

```

400 INPUT "Z =" ; Z (1, I)
410 INPUT "XD =" ; Z (4, I)
420 INPUT "A1 =" ; C (1, I)
430 INPUT "A2 =" ; C (2, I)
440 INPUT "A3 =" ; C (3, I)
450 INPUT "A4 =" ; C (4, I)
460 NEXT I
480 PRINT
490 PRINT "CLAVE LIGERO:"
500 INPUT "Z =" ; Z (1, U + 1)
510 INPUT "XD =" ; Z (4, U + 1)
520 INPUT "XB =" ; Z (5, U + 1)
530 INPUT "A1 =" ; C (1, U + 1)
540 INPUT "A2 =" ; C (2, U + 1)
550 INPUT "A3 =" ; C (3, U + 1)
560 INPUT "A4 =" ; C (4, U + 1)
570 PRINT
580 PRINT "CLAVE PESADO:"
590 INPUT "Z =" ; Z (1, U + 2)
600 INPUT "XD =" ; Z (4, U + 2)
610 INPUT "XB =" ; Z (5, U + 2)
620 INPUT "A1 =" ; C (1, U + 2)
630 INPUT "A2 =" ; C (2, U + 2)
640 INPUT "A3 =" ; C (3, U + 2)
650 INPUT "A4 =" ; C (4, U + 2)
660 FOR I = U + 3 TO C
670 PRINT
680 PRINT "COMPONENTE:" ; I
690 INPUT "Z =" ; Z (1, I)
700 INPUT "XB =" ; Z (5, I)
710 INPUT "A1 =" ; C (1, I)
720 INPUT "A2 =" ; C (2, I)
730 INPUT "A3 =" ; C (3, I)
740 INPUT "A4 =" ; C (4, I)
745 NEXT I
750 PRINT
760 INPUT "F =" ; F
770 INPUT "PRESION (PSIAS) =" ; P
780 INPUT "TEMPERATURA DE ALIMEN
TACION (F) =" ; T1
790 GOSUB 2500
792 PRINT
795 PRINT "CONDICION TERMICA DE
ALIMENTACION =" ; Q
810 W = Z (2, U + 1) / Z (2, U + 2)
830 INPUT " D =" ; D
840 B = F - D
850 INPUT " RELACION DE REFLUJO="
";R
860 L = R * D
870 V = D * (1 + R)
880 L1 = L + Q * F
890 V1 = V - (1 - G) * F
895 PRINT
900 PRINT " ZONA DE RECTIFICACION
N : "
905 PRINT
910 INPUT " T D, SUPUESTA (F) =" ;
T3
915 T (1) = T3 + 460

```

```

920 FOR I = 1 TO U + 2
930 Y(1,I) = Z(4,I)
940 D(1,I) = D * Z(4,I)
950 NEXT I
960 FOR J = 1 TO 50
970 PRINT
980 PRINT " ETAPA : ";J
990 PRINT
1000 FOR K = 1 TO 50
1010 S1 = 0
1020 S2 = 0
1030 FOR I = 1 TO U + 2
1040 K(I) = (T(J) * (C(1,I) + C(2,
I) * T(J) + C(3,I) * T(J) ^
2 + C(4,I) * T(J) ^ 3) ^ 3) *
P / 300
1050 H(I) = (P / 300) * (3 * T(J)
* (C(1,I) + C(2,I) * T(J) +
C(3,I) * T(J) ^ 2 + C(4,I) *
T(J) ^ 3) ^ 2 * (C(2,I) + 2 *
C(3,I) * T(J) + 3 * C(4,I) *
T(J) ^ 2) + K(I) / T(J) * (3
00 / P))
1060 X(J,I) = Y(J,I) / K(I)
1070 W(J,I) = Y(J,I) * H(I) / K(I
)
1080 S1 = S1 + X(J,I)
1090 S2 = S2 + W(J,I)
1100 NEXT I
1110 F1 = S1 - 1
1120 G = - S2
1130 T = T(J) - F1 / G
1140 IF ABS(T - T(J)) < 1E - 2
THEN 1200
1150 T(J) = T
1160 NEXT K
1170 PRINT " FALTAN ITERACIONES
"
1200 PRINT " T(";J;") = ";T(J) -
460
1205 FOR I = 1 TO U + 2
1210 L(J,I) = L * X(J,I)
1220 V(J + 1,I) = L(J,I) + D(1,I)
1230 Y(J + 1,I) = V(J + 1,I) / V
1240 PRINT " X(";J;",";I;") = "
;X(J,I)
1250 NEXT I
1260 U(J) = X(J,U + 1) / X(J,U +
2)
1270 IF U(J) < W THEN 1300
1280 T(J + 1) = T(J)
1290 NEXT J
1295 PRINT " FALTAN ETAPAS DE CA
LCULO"
1300 FOR I = U + 1 TO U + 2
1310 E(1,I) = X(J,I)
1320 NEXT I
1330 N1 = J - 1
1340 PRINT " ETAPA DE ALIMENTACI

```

```

      CN = "J
1342 PRINT
1345 PRINT " ZONA DE AGOTAMIENTO
      "
1347 PRINT
1350 INPUT " T B,SUPUESTA (F) = "
      ;T4
1360 T(1) = T4 + 460
1365 PRINT
1375 PRINT " ETAPA: 1 (REHEPIDU
      R)"
1377 PRINT
1380 FOR I = U + 1 TO C
1390 X(1,I) = Z(5,I)
1400 PRINT " X(1,";I;") = ";X(1
      ,I)
1410 B(1,I) = Z(5,I) * B
1420 NEXT I
1430 FOR J = 1 TO 50
1440 FOR K = 1 TO 50
1450 S1 = 0
1460 S2 = 0
1470 FOR I = U + 1 TO C
1480 K(I) = (T(J) * (C(1,I) + C(2
      ,I) * T(J) + C(3,I) * T(J) ^
      2 + C(4,I) * T(J) ^ 3) ^ 3) *
      P / 300
1490 H(I) = (P / 300) * (S * T(J)
      * (C(1,I) + C(2,I) * T(J) +
      C(3,I) * T(J) ^ 2 + C(4,I) *
      T(J) ^ 3) ^ 2 * (C(2,I) + 2 *
      C(3,I) * T(J) + 3 * C(4,I) *
      T(J) ^ 2) + K(I) / T(J) * (S
      00 / P)
1500 Y(J,I) = X(I) * X(J,I)
1510 W(J,I) = H(I) * X(J,I)
1520 S1 = S1 + Y(J,I)
1530 S2 = S2 + W(J,I)
1540 NEXT I
1550 F1 = S1 - 1
1560 G = S2
1570 T = T(J) - F1 / G
1580 IF ABS (T - T(J)) < 1E - 2
      THEN 1620
1590 T(J) = T
1600 NEXT K
1610 PRINT "FALTAN ITERACIONES"
1620 PRINT " T(";J;") = ";T(J) -
      460
1622 PRINT
1623 PRINT " ETAPA : ";J + 1
1624 PRINT
1625 FOR I = U + 1 TO C
1630 V(J,I) = Y(J,I) * V1
1640 L(J + 1,I) = V(J,I) + B(1,I)
1650 X(J + 1,I) = L(J + 1,I) / L1
1660 PRINT " X(";J + 1;",";I;")
      = ";X(J + 1,I)
1670 NEXT I

```

```

1680 U(J) = X(J + 1,U + 1) / X(J +
1,U + 2)
1690 IF U(J) > W THEN 1730
1700 T(J + 1) = T(J)
1710 NEXT J
1730 FOR I = U + 1 TO U + 2
1740 E(2,I) = X(J + 1,I)
1750 NEXT I
1760 N2 = J
1765 PRINT
1770 PRINT " PLATO DE ALIMENTACI
ON = ";J + 1
1780 PRINT
1790 N = N1 + N2 + 1
1800 PRINT " ETAPAS TOTALES. "
1810 PRINT
1820 PRINT " RECTIFICACION : "
;N1
1830 PRINT " AGOTAMIENTO : "
;N2
1840 PRINT " ALIMENTACION :
1"
1860 PRINT " N TOTAL =
";N
1870 PRINT
1910 REM CALCULO DE XDS Y XBS
1920 FOR I = U + 1 TO U + 2
1930 D(2,I) = (E(1,I) - E(2,I)) /
(E(1,I) / (Z(4,I) * D) + E(2
,I) / (Z(5,I) * B))
1940 NEXT I
1960 FOR I = 1 TO C
1970 IF I = U + 1 THEN 2030
1980 IF I = U + 2 THEN 2030
1990 D(1,I) = Z(4,I) * D
2000 B(1,I) = Z(5,I) * B
2010 GOTO 2050
2030 D(1,I) = Z(4,I) * D + D(2,I)
2040 B(1,I) = Z(5,I) * B - D(2,I)
2050 NEXT I
2052 PRINT
2055 PRINT " COMPOSICION EN EL D
OMO : "
2057 PRINT
2060 FOR I = 1 TO U + 2
2070 Z(4,I) = D(1,I) / D
2080 PRINT
2090 PRINT " X D (";I;" ) = ";Z(4
,I)
2100 NEXT I
2110 PRINT
2115 PRINT " COMPOSICION EN FONDO
OS : "
2120 PRINT
2130 FOR I = U + 1 TO C
2140 Z(5,I) = B(1,I) / B
2150 PRINT
2160 PRINT " X B (";I;" ) = ";Z(5

```

```

,I)
2170 NEXT I
2300 END
2500 REM SUBROUTINA FLASH
2510 T = T1 + 460
2520 Q1 = 1
2530 FOR I = 1 TO C
2540 K(I) = (P / 300) * (T * (C(I
,I) + C(2,I) * T + C(3,I) *
T ^ 2 + C(4,I) * T ^ 3) ^ 3)

2550 NEXT I
2560 FOR J = 1 TO 30
2570 S1 = 0
2580 S2 = 0
2590 FOR I = 1 TO C
2600 S1 = S1 + K(I) * Z(1,I) / (K
(I) - Q1 * (K(I) - 1))
2610 S2 = S2 + K(I) * Z(1,I) * (1
- K(I)) / ((K(I) - Q1 * (K
I) - 1)) ^ 2)
2620 NEXT I
2630 F1 = S1 - 1
2640 G = - S2
2650 Q = Q1 - F1 / G
2660 IF ABS (Q1 - Q) < 1E-4 THEN
2700
2670 Q1 = Q
2680 NEXT J
2690 PRINT "FALTAN ITERACIONES"
2700 FOR I = 1 TO C
2710 Z(2,I) = Z(1,I) / (K(I) - Q *
(K(I) - 1))
2720 Z(3,I) = K(I) * Z(2,I)
2730 NEXT I
2740 RETURN

```

LIST

```
5 HOME
8 PRINT
10 PRINT " UNIVERSIDAD NACIONAL
    AUTONOMA "
20 PRINT " DE MEXICO
    "
22 PRINT
24 PRINT " FES - CUAUTIL
    AN "
25 PRINT
26 PRINT " *****
28 PRINT
30 PRINT " TESIS DE LICENCIATUR
    A: "
31 PRINT
32 PRINT " FLORES FLORES
    RODOLFO "
34 PRINT " GARCIA RAMIREZ
    MARCELA MA. E. "
36 PRINT " VAZQUEZ MORENO
    FLAVIO SALVADOR "
38 PRINT
40 PRINT " DIRECTOR DE TESIS : "

42 PRINT
44 PRINT " ING. ELIGIO PASTOR
    RIVERO MTZ."
45 PRINT
46 PRINT " *****
47 PRINT
48 PRINT " DESTILACION MULTICO
    Mponente "
50 PRINT
60 PRINT TAB( 5)"METODO DE AKER
    S-WADE "
200 DIM K(20)
210 DIM A(10,20)
220 DIM B(5,20)
230 DIM C(5,20)
240 DIM D(5,20)
250 DIM E(20,20)
260 DIM U(5,20)
270 DIM W(20,20)
280 DIM X(20,20)
290 DIM Y(20,20)
300 DIM Z(10,20)
340 PRINT
350 INPUT "NUMERO DE COMPONENTES
    =" ; C
360 INPUT "NUMERO DE NO CLAVES L
    IGEROS =" ; U
370 FOR I = 1 TO U
380 PRINT
390 PRINT "COMPONENTE: " ; I
400 INPUT "Z =" ; Z(1, I)
410 INPUT "XD =" ; Z(4, I)
420 INPUT "A1 =" ; C(1, I)
430 INPUT "A2 =" ; C(2, I)
440 INPUT "A3 =" ; C(3, I)
```

```

450 INPUT "A4 =" ; C(4,1)
460 NEXT I
480 PRINT
490 PRINT "CLAVE LIGERO:"
500 INPUT "Z =" ; Z(1,U + 1)
510 INPUT "XD =" ; Z(4,U + 1)
520 INPUT "XB =" ; Z(5,U + 1)
530 INPUT "A1 =" ; C(1,U + 1)
540 INPUT "A2 =" ; C(2,U + 1)
550 INPUT "A3 =" ; C(3,U + 1)
560 INPUT "A4 =" ; C(4,U + 1)
570 PRINT
580 PRINT "CLAVE PESADO:"
590 INPUT "Z =" ; Z(1,U + 2)
600 INPUT "XD =" ; Z(4,U + 2)
610 INPUT "XB =" ; Z(5,U + 2)
620 INPUT "A1 =" ; C(1,U + 2)
630 INPUT "A2 =" ; C(2,U + 2)
640 INPUT "A3 =" ; C(3,U + 2)
650 INPUT "A4 =" ; C(4,U + 2)
660 FOR I = U + 3 TO C
670 PRINT
680 PRINT "COMPONENTE:" ; I
690 INPUT "Z =" ; Z(1,I)
700 INPUT "XB =" ; Z(5,I)
710 INPUT "A1 =" ; C(1,I)
720 INPUT "A2 =" ; C(2,I)
730 INPUT "A3 =" ; C(3,I)
740 INPUT "A4 =" ; C(4,I)
745 NEXT I
750 PRINT
760 INPUT "F =" ; F
770 INPUT "PRESION (PSIAS) =" ; P
780 INPUT "TEMPERATURA DE ALIMEN
TACION (F) =" ; T1
790 GOSUB 2500
792 PRINT
795 PRINT "CONDICION TERMICA DE
ALIMENTACION =" ; Q
800 FOR I = 1 TO C
810 A(1,I) = K(I) / K(U + 2)
820 NEXT I
830 GOSUB 2700
840 FOR I = 1 TO U + 2
850 A(2,I) = K(I) / K(U + 2)
860 NEXT I
870 GOSUB 3020
880 FOR I = U + 1 TO C
890 A(3,I) = K(I) / K(U + 2)
900 NEXT I
910 FOR I = 1 TO U + 2
915 T(1) = T3 + 460
920 A(4,I) = (A(1,I) * A(2,I)) *
0.5
930 NEXT I
940 FOR I = U + 1 TO C
950 A(5,I) = (A(1,I) * A(3,I)) *
0.5
960 NEXT I
970 W = Z(2,U + 1) / Z(2,U + 2)
980 INPUT " D =" ; D

```

```

990 D = F - D
1000 INPUT " RELACION DE REFLUJO
      = ";R
1010 L = R * D
1020 V = D * (R + 1)
1030 LI = L + Q * F
1040 V1 = V - (1 - Q) * F
1042 PRINT
1044 PRINT " ZONA DE RECTIFICACI
      ON . "
1046 PRINT
1050 S = 0
1052 PRINT " PLATO : 1 "
1054 PRINT
1060 FOR I = 1 TO U + 2
1070 W(1,I) = (Z(4,I) / Z(4,U + 2
      )) / A(4,I)
1080 S = S + W(1,I)
1090 NEXT I
1100 FOR J = 1 TO U + 2
1110 X(1,I) = W(1,I) / S
1120 PRINT " X(1,";I;" ) = ";X(1,
      I)
1130 NEXT I
1140 FOR J = 2 TO 30
1142 PRINT
1145 PRINT " PLATO : ";J
1147 PRINT
1150 S = 0
1160 FOR I = 1 TO U + 2
1170 W(J,I) = (1 / A(4,I)) * (R *
      X(J - 1,I) + Z(4,I)) / (R *
      X(J - 1,U + 2) + Z(4,U + 2))
1180 S = S + W(J,I)
1190 NEXT I
1200 PRINT
1210 FOR I = 1 TO U + 2
1220 X(J,I) = W(J,I) / S
1230 PRINT " X(";J;" ," ; I;" ) = ";
      X(J,I)
1240 NEXT I
1250 IF W(J,U + 1) < W THEN 1280

1260 NEXT J
1280 N1 = J - 1
1290 U(1,U + 1) = X(J,U + 1)
1300 U(1,U + 2) = X(J,U + 2)
1305 PRINT
1310 PRINT " ETAPA DE ALIMENTACI
      ON = ";J
1315 PRINT
1320 PRINT " ZONA DE AGOTAMIENTO
      . "
1325 PRINT
1330 S = 0
1335 S1 = 0
1340 FOR I = U + 1 TO 5
1350 E(1,I) = A(S,I) * (V1 / B *
      Z(7,I) + Z(5,I)) / (V1 / B *

```

```

      Z(7,U + 2) + Z(5,U + 2))
1360 S = S + E(1,I)
1370 S1 = S1 + E(1,I) / A(5,I)
1380 NEXT I
1382 PRINT
1385 PRINT " PLATO : 1"
1387 PRINT
1390 FOR I = U + 1 TO C
1400 Y(1,I) = E(1,I) / S
1410 W(1,I) = E(1,I) / A(5,I)
1420 X(1,I) = W(1,I) / S1
1430 PRINT " X(1,";I;" ) = ";X(1,
I)
1440 NEXT I
1450 PRINT
1460 FOR J = 2 TO 30
1465 PRINT
1470 PRINT " PLATO : ";J
1475 PRINT
1480 S = 0
1485 S1 = 0
1490 FOR I = U + 1 TO C
1500 E(J,I) = A(5,I) * (V1 / B *
Y(J - 1,I) + Z(S,I)) / (V1 /
B * Y(J - 1,U + 2) + Z(S,U +
2))
1510 S = S + E(J,I)
1520 S1 = S1 + E(J,I) / A(5,I)
1525 NEXT I
1530 FOR I = U + 1 TO C
1540 Y(J,I) = E(J,I) / S
1550 W(J,I) = E(J,I) / A(5,I)
1560 X(J,I) = W(J,I) / S1
1570 PRINT " X(";J;" ," ;I;" ) = ";
X(J,I)
1580 NEXT I
1590 IF W(J,U + 1) > W THEN 1620

1600 NEXT J
1620 N2 = J - 1
1625 PRINT
1630 PRINT " PLATO DE ALIMENTACION
DN = ";J
1640 N = N1 + N2 + 2
1650 PRINT
1660 PRINT " ETAPAS TOTALES : "
1670 PRINT " RECTIFICACION : ";
N1
1680 PRINT " AGOTAMIENTO : ";
N2
1690 PRINT " ALIMENTACION : 1"
1700 PRINT " REHERVIDOR : 1
"
1705 PRINT
1710 PRINT " TOTAL : ";
N

```

```

1720 U(2,U + 1) = X(J,U + 1)
1740 U(2,U + 2) = X(J,U + 2)
1810 REM CALCULO DE XDS Y XBS
1820 FOR I = U + 1 TO U + 2
1830 S(2,I) = (U(1,I) - U(2,I)) /
(U(1,I) / (Z(4,I) * D) + U(2
,I) / (Z(5,I) * B))
1835 NEXT I
1840 FOR I = 1 TO C
1850 IF I = U + 1 THEN 1900
1855 IF I = U + 2 THEN 1900
1860 D(1,I) = Z(4,I) * D
1870 B(1,I) = Z(5,I) * B
1890 GOTO 1930
1900 D(1,I) = Z(4,I) * D + D(2,I)

1910 B(1,I) = Z(5,I) * B - D(2,I)

1930 NEXT I
1932 PRINT
1935 PRINT " COMPOSICIONES DE PR
ODUCTOS : "
1937 PRINT
1938 PRINT " DOMO."
1939 PRINT
1940 FOR I = 1 TO U + 2
1950 Z(4,I) = D(1,I) / D
1960 PRINT " XD (";I;) = ";Z(4
,I)
1970 NEXT I
1972 PRINT
1975 PRINT " FONDOS. "
1977 PRINT
1980 FOR I = U + 1 TO C
1990 Z(5,I) = B(1,I) / B
2000 PRINT " XB (";I;) = ";Z(5
,I)
2010 NEXT I
2050 END
2500 REM SUBROUTINA FLASH
2510 T = T1 + 460
2520 Q1 = 1
2530 FOR I = 1 TO C
2540 K(I) = (P / 300) * (T * (C(I
,I) + C(2,I) * T + C(3,I) *
T ^ 2 + C(4,I) * T ^ 3) ^ 3)
2550 NEXT I
2560 FOR J = 1 TO 30
2570 S1 = 0
2580 S2 = 0
2590 FOR I = 1 TO C
2600 S1 = S1 + K(I) * Z(1,I) / (K
(I) - Q1 * (K(I) - 1))
2610 S2 = S2 + K(I) * Z(1,I) * (1
- K(I)) / ((K(I) - Q1 * (K(
I) - 1)) ^ 2)
2620 NEXT I
2630 F1 = S1 - 1
2640 G = - S2
2650 Q = Q1 - F1 / G
2660 IF ABS(Q1 - Q) < 1E - 4 THEN

```

```

2700
2670 Q1 = Q
2680 NEXT J
2690 PRINT "FALTAN ITERACIONES"
2700 FOR I = 1 TO C
2710 Z(2,I) = Z(1,I) / (K(I) - Q *
(K(I) - 1))
2720 Z(3,I) = K(I) * Z(2,I)
2730 NEXT I
2740 RETURN
2760 REM SUBROUTINA TEMP. DE ROC
ID
2780 INPUT " T D, SUPUESTA (F) =
";T2
2790 T = T2 + 460
2800 FOR J = 1 TO 30
2810 S1 = 0
2820 S2 = 0
2830 FOR I = 1 TO U + 2
2840 K(I) = (P / 300) * (T * (C(1
,I) + C(2,I) * T + C(3,I) *
T ^ 2 + C(4,I) * T ^ 3) ^ 3)
2850 H(I) = (P / 300) * (3 * T *
(C(1,I) + C(2,I) * T + C(3,I)
) * T ^ 2 + C(4,I) * T ^ 3) ^ 2
+ 2 * (C(2,I) + 2 * C(3,I) * T
+ 3 * C(4,I) * T ^ 2) + K(I)
) / T * (300 / P)
2860 Z(6,I) = Z(4,I) / K(I)
2870 W(20,I) = Z(4,I) * H(I) / K(
I) ^ 2
2880 S1 = S1 + Z(6,I)
2890 S2 = S2 + W(20,I)
2900 NEXT I
2910 F1 = S1 - 1
2920 G = - S2
2930 T3 = T - F1 / G
2940 IF ABS (T - T3) < 1E - 2 THEN
2980
2950 T = T3
2960 NEXT J
2970 PRINT " FALTAN ITERACIONES
"
2990 T2 = T - 460
2990 PRINT " T D (F) = ";T2
3000 RETURN
3020 REM TEMP. DE BURBUJA
3030 INPUT " T B,SUPUESTA (F) =
";T3
3040 T = T3 + 460
3050 FOR J = 1 TO 30
3060 S1 = 0
3070 S2 = 0
3080 FOR I = U + 1 TO C
3090 K(I) = (P / 300) * (T * (C(1
,I) + C(2,I) * T + C(3,I) *
T ^ 2 + C(4,I) * T ^ 3) ^ 3)
3100 H(I) = (P / 300) * (3 * T *
(C(1,I) + C(2,I) * T + C(3,I)
) * T ^ 2 + C(4,I) * T ^ 3) ^ 2
+ 2 * (C(2,I) + 2 * C(3,I) * T
+ 3 * C(4,I) * T ^ 2) + K(I)

```

```
    ) / T * (300 / P))
3110 Z(7,I) = K(I) * Z(5,I)
3120 W(20,I) = H(I) * Z(5,I)
3130 S1 = S1 + Z(7,I)
3140 S2 = S2 + W(20,I)
3150 NEXT I
3160 F1 = S1 - 1
3170 G = S2
3180 T4 = T - F1 / G
3190 IF ABS (T4 - T) < 1E - 2 THEN
3230
3200 T = T4
3210 NEXT J
3220 PRINT " FALTAN ITERACIONES
"
3230 T3 = T - 460
3240 PRINT " T B (F)= ";T3
3250 RETURN
```

BIBLIOGRAFIA

1. Biardi G.E., Dente M., Pierucci S.J., Ranzi E.M., (1981). *Hydrocarbon Processing*, 179 (8) 79.
2. Chang H.Y., (1980). *Hydrocarbon Processing*, 59 (8): 79.
3. Hanson D.N. y Newman J., (1977): *Ind. Eng. Chem. Process. Des. Dev.*
4. Holland C.D., (1974). *Hydrocarbon Processing*, 53 (7): 148.
5. Holland C.D., (1981). "Fundamentals of multicomponent distillation", Mc Graw-Hill, USA.
6. Holland C.D., (1981). "Fundamentos y modelos de procesos de separación", Mc Graw-Hill, USA.
7. King C.J., (1980). "Separation processes", 2a edición, Mc Graw-Hill, USA.
8. Ludwig E.E. (1964) "Applied Process design for Chemical and Petrochemical plants", Gulf Pub. Co. Houston, Texas.
9. Marinos Kouris, D.S., (1981) *Chem. Eng.*, 88 (5): 83
10. Mc Cabe W.L. y Smith J.C., (1976) "Unit operations of Chemical Engineering", 3 a. ed., Mc Graw-Hill, Japón.
11. Perry y Chilton, (1982) "Manual del Ingeniero Químico", 2a. ed., Mc Graw-Hill, México.
12. Ripps. P.L. (1968) *Hydrocarbon Processing*, 47 (12): 84.
13. Smith B.D. (1963) "Design of equilibrium stages processes", Mc Graw-Hill, Nueva York.
14. Treybal R.E. (1980) "Operaciones de transferencia de masa", 2a edición, Mc Graw Hill, México.
15. Van Winkle N. (1967): "Distillation", Mc Graw-Hill, Nueva York.