

2 ej 00579



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO**

**Facultad de Química  
Departamento de Ingeniería Química**

**" EVALUACION DEL ESTADO TRANSIENTE EN COLUMNAS  
DE DESTILACION BINARIA "**

**T E S I S**

Que para obtener el Grado de:

**MAESTRO EN INGENIERIA QUIMICA**

( Procesos )

**P r e s e n t a**

**MARIO ACOSTA FLORES**

México, D. F.

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**

1990



## **UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso**

### **DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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

## I N D I C E

CAPITULO 1.	Pags.
INTRODUCCION.	1
1.1 Modelo general de destilación.	2
1.2 Modelo simple de quinto nivel.	3
1.3 Estabilidad de los modelos planteados.	5
1.4 Antecedentes del trabajo.	12
1.5 Pautas a seguir en el desarrollo del trabajo.	19
CAPITULO 2.	
ARRANQUE.	20
2.1 Modelo simplificado para el arranque.	20
2.2 Obtención de modelos analíticos.	21
2.3 Solución numérica de los modelos.	61
2.4 Comparación de resultados.	74
CAPITULO 3.	
ESTADO ESTACIONARIO PERTURBADO.	86
3.1 Modelo simplificado.	86
3.2 Obtención de un modelo analítico.	87
3.3 Solución numérica de los modelos.	126
3.4 Comparación de resultados.	141
CONCLUSION.	142
NOTACION.	143
BIBLIOGRAFIA.	144

## CAPITULO 1

## INTRODUCCION

Se entiende por estado transitorio de un sistema la situación en la que algunas o todas las condiciones de operación varían con el tiempo. Para el caso que nos interesa pueden existir, básicamente, dos situaciones: arranque y estado de perturbación de una o algunas de las condiciones de operación del estado estacionario.

En el arranque de una columna de destilación, inicialmente se llena el sistema con líquido de una determinada composición, sometiendo posteriormente la columna a reflujo total hasta alcanzar en el destilado la composición deseada, para después proceder a obtener producto y empezar a alimentar la mezcla a separar. Para separaciones difíciles, es decir, de volatilidad relativa cercana a la unidad, el tiempo necesario para alcanzar las condiciones deseadas puede ser muy grande, por lo que adquiere gran importancia su determinación para una planeación correcta del arranque total de un proceso.

Un estado de perturbación ocurre cuando algunas de las condiciones de operación varían debido a alteraciones de servicios (agua de enfriamiento, vapor, etc.), funcionamiento de equipos, alimentaciones, etc. Para asegurar que los productos satisfagan las condiciones deseadas, se implementan sistemas de control que compensen estas variaciones. La implementación de los sistemas de control requiere del conocimiento del comportamiento dinámico (desarrollo en el tiempo) de estos sistemas, de ahí que se dedique gran esfuerzo al estudio de este tónico.

## 1.1 Modelo general de destilación.

Para una etapa (n) cualquiera en equilibrio y retención de vapor despreciable (fig.1), se tiene las siguientes relaciones para C componentes:

a). C balances de materia (1 total y C-1 por componente):

$$dH_n/dt = F_n + V_{n-1} + L_{n+1} - S_n^V - S_n^L - L_n - V_n \quad (1.1)$$

$$d(H_n^i)/dt = F_n^i + V_{n-1}^i + L_{n+1}^i - (V_n^V + S_n^V) y_{i,n} - (L_n^L + S_n^L) x_{i,n}; \quad i=1, \dots, C-1 \quad (1.2)$$

b). Un balance de energía:

$$d(H_n^u)/dt = F_n h_n^F + V_{n-1} h_{n-1}^V + L_{n+1} h_{n+1}^L - (V_n + S_n^V) h_n^V - (L_n + S_n^L) h_n^L + Q_n \quad (1.3)$$

Este sistema de ecuaciones, junto con relaciones algebraicas de equilibrio de fases e hidrodinámicas, definen en una forma general el sistema.

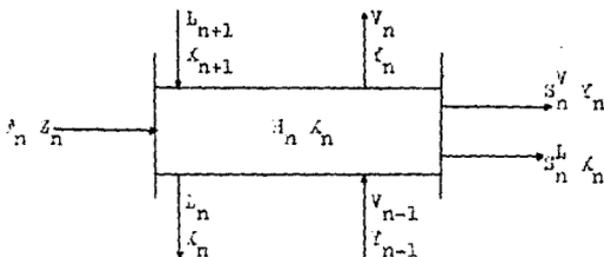


FIG. 1

De acuerdo a Doherty y Perkins (1934), existen cinco niveles de simplificación bien definidos que son convenientes para clasificar los trabajos numéricos y analíticos en esta área. El primer nivel toma en cuenta los balances de materia total (1.1) y por componente (1.2) y el balance de energía (1.3). El segundo hace uso de los balances de materia (1.1) y (1.2), despreciando el término de acumulación en el balance de energía (1.3). El tercero utiliza el balance de materia por componentes (1.2) y el balance de energía (1.3), despreciando el término de acumulación del balance de materia total (1.1). El cuarto nivel toma en cuenta únicamente el balance de materia por componente (1.2), los términos de acumulación de los balances de materia total y de energía, (1.1) y (1.3), son despreciados. Finalmente, el quinto nivel, además de tener las características del cuarto, mantiene los flujos internos constantes.

En este trabajo se adopta el quinto nivel como primera opción por ser el más característico en un buen número de casos, proporcionando información confiable sobre su comportamiento dinámico.

## 1.2 Modelo simple de quinto nivel.

Bajo las condiciones siguientes se llega a un modelo simple de quinto nivel:

- a). El vapor que abandona una etapa se encuentra en equilibrio con el líquido en esa etapa.  
Implica que el líquido está bien mezclado y la eficiencia es la unidad.
- b). La retención de vapor es despreciable.  
Situación válida para bajas presiones.

c). Retenciones líquidas constantes e iguales para toda etapa. También, retenciones líquidas del condensador y reatoridior constantes.

d). flujos de vapor y líquido constantes.

Aproximación buena si los calores latentes de los dos componentes son semejantes y si las pérdidas de calor y los cambios de temperatura de plato a plato son despreciables.

Se puede simplificar aún más el tratamiento si se dan las siguientes condiciones adicionales:

a). Una sola corriente de alimentación como líquido saturado.

b). Operación de condensador total.

c). Sometiendo a perturbación solo una de las variables de operación que pueden estar sujetas a este efecto (flujo y composición de alimentación, flujo de vapor, reflujo, flujo de agua de enfriamiento, etc.).

Si se dan las anteriores condiciones se obtiene:

Condensador:

$$H_c dX_{N+2}/dt = VY_{N+1} - VX_{N+2} \quad (1.4)$$

Sección de enriquecimiento:

$$HdX_n/dt = VY_{n-1} - VY_n + LX_{n+1} - LX_n; n=f+1, \dots, N+1 \quad (1.5)$$

Plato de alimentación:

$$HdX_f/dt = VY_{f-1} - VY_f + LX_{f+1} - LX_f + FX_f \quad (1.6)$$

Sección de azotamiento:

$$HdX_m/dt = VY_{m-1} - VY_m + (L+S)X_{m+1} - (L+S)X_m; m=2, \dots, f-1 \quad (1.7)$$

Reservioir:

$$H_R dX_1/dt = -VY_1 + (L+S)X_2 - (L+S-V)X_1 \quad (1.8)$$

1.3 Estabilidad de los modelos planteados.

A partir del modelo de cuarto nivel representado por la ecuación (1.2), y tomando la relación de equilibrio:

$$Y_{i,n} = K_{i,n} X_{i,n} \quad (1.9)$$

se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones:

Reservidor:

$$\begin{aligned} d(H_1 X_{i,1})/dt &= L_2 X_{i,2} - V_1 K_{i,1} X_{i,1} - I_1 X_{i,1} + J_1 Z_{i,1} \\ &= -(L_1 + V_1 K_{i,1}) X_{i,1} + I_2 X_{i,2} + J_1 Z_{i,1} \\ d(\varphi_{i,1})/dt &= -(L_1 + V_1 K_{i,1}) \varphi_{i,1} / H_1 + L_2 \varphi_{i,2} / H_2 + J_1 \Delta_{i,1} \end{aligned} \quad (1.10)$$

Etapas n cualquiera:

$$\begin{aligned} d(X_{i,n})/dt &= V_{n-1} K_{i,n-1} X_{i,n-1} + L_{n+1} X_{i,n+1} - (L_n + S_n^V) K_{i,n} X_{i,n} \\ &\quad - (L_n + S_n^L) X_{i,n} + J_n Z_{i,n} ; n=2,3,\dots,N+1 \\ d(\varphi_{i,n})/dt &= V_{n-1} K_{i,n-1} \varphi_{i,n-1} / H_{n-1} - (L_n + S_n^L + (V_n + S_n^V) K_{i,n}) \varphi_{i,n} / H_n \\ &\quad + L_{n+1} \varphi_{i,n+1} / H_{n+1} + J_n \Delta_{i,n} ; n=2,3,\dots,N+1 \end{aligned} \quad (1.11)$$

Condensador total:

$$\begin{aligned} d(H_{N+2} X_{i,N+2})/dt &= V_{N+1} K_{i,N+1} X_{i,N+1} - (L_{N+2} + S_{N+2}^L) X_{i,N+2} + J_{N+2} \Delta_{i,N+2} \\ d(\varphi_{i,N+2})/dt &= V_{N+1} K_{i,N+1} \varphi_{i,N+1} / H_{i,N+1} - (L_{N+2} + S_{N+2}^L) \varphi_{i,N+2} / H_{N+2} \\ &\quad + J_{N+2} \Delta_{i,N+2} \end{aligned} \quad (1.12)$$

donde:  $\varphi_{i,n} = H_n \chi_{i,n}$

El anterior sistema puede ser representado en forma vectorial:

$$d\bar{\varphi}_i/dt = \bar{A}_i \bar{\varphi}_i + \bar{F} \quad (1.13)$$

donde:

$$\bar{\varphi}_i = \begin{bmatrix} \varphi_{i,1} \\ \varphi_{i,2} \\ \vdots \\ \varphi_{i,n} \\ \vdots \\ \varphi_{i,N+1} \\ \varphi_{i,N+2} \end{bmatrix} \quad \bar{F} = \begin{bmatrix} f_{1,1} \\ f_{2,1} \\ \vdots \\ f_{n,1} \\ \vdots \\ f_{N+1,1} \\ f_{N+2,1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{i,1} \\ f_{i,2} \\ \vdots \\ f_{i,n} \\ \vdots \\ f_{i,N+1} \\ f_{i,N+2} \end{bmatrix}$$

$$\bar{A}_i = \begin{bmatrix} -(L_1 + v_1 K_{i,1})/H_1 & L_2/H_2 & & & \\ v_1 K_{i,1}/H_1 & -(L_2 + S_2^L + (v_2 + S_2^V) K_{i,2})/H_2 & L_3/H_3 & & \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ 0 & v_{n-1} K_{i,n-1}/H_{n-1} & -(L_n + S_n^L + (v_n + S_n^L) K_{i,n})/H_n & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ 0 & \cdot & \cdot & v_{N+1} K_{i,N+1}/H_{N+1} & -(L_{N+2} + S_{N+2}^L)/H_{N+2} \end{bmatrix}$$



Un sistema es dinámicamente estable si su respuesta con o sin perturbaciones permanece dentro de límites definidos o se aproxima asintóticamente a un determinado nivel de referencia. De acuerdo a Himmelblau y Bischoff (1968), un sistema representado por ecuaciones diferenciales ordinarias lineales con la matriz  $\bar{A}(t)=\bar{A}$ , esto es, con coeficientes constantes, es estable si y solo si las raíces del polinomio  $\det(\bar{A}-\lambda\bar{I})$ , tienen partes reales negativas (los valores propios deben ser negativos o con partes reales negativas). Si existe al menos una raíz con parte real positiva, el sistema no será estable.

Para el sistema de cuarto nivel planteado  $\bar{A}_1=\bar{A}_1(\bar{X})$  es dependiente de la composición, sin embargo, de acuerdo a Mah et al. (1962), esto no tiene efecto sobre las características de estabilidad señaladas anteriormente.

Si se desarrolla el polinomio  $P_{N+2}(\lambda)$  representado por  $\det(\bar{A}_1-\lambda\bar{I})$ , tomando en cuenta los elementos de la última columna, se tendrá el valor del determinante  $P_{N+2}(\lambda)$ , y si se omiten el último renglón y la última columna, se obtendrá desarrollando otro polinomio  $P_{N+1}(\lambda)$ , y así sucesivamente, esto nos lleva a obtener la siguiente secuencia de polinomios:

$$P_{N+2}(\lambda) = (-a_{N+2, N+2} - \lambda)P_{N+1}(\lambda) - a_{N+1, N+2} a_{N+2, N+1} P_N(\lambda)$$

$$P_{N+1}(\lambda) = (-a_{N+1, N+1} - \lambda)P_N(\lambda) - a_{N, N+1} a_{N+1, N} P_{N-1}(\lambda)$$

$$P_n(\lambda) = (-a_{nn} - \lambda)P_{n-1}(\lambda) - a_{n-1, n} a_{n, n-1} P_{n-2}(\lambda)$$

$$P_2(\lambda) = (-a_{22} - \lambda)P_1(\lambda) - a_{12}a_{21}P_0(\lambda)$$

$$P_1(\lambda) = (-a_{11} - \lambda)P_0(\lambda)$$

$$P_0(\lambda) = 1$$

La secuencia de polinomios anterior es de las llamadas de Sturm, para las que se sabe que el número de raíces reales ( $V$ ) de una  $f(x)$  entre  $x=a$  y  $x=b$  es igual a  $V(a)-V(b)$ , donde  $V(a)$  y  $V(b)$  son el número de cambios de signo a  $x=a$  y  $x=b$ , respectivamente.

Waindson (1966) efectúa el análisis para el caso general de una matriz con los elementos negativos en la diagonal principal y los restantes positivos. Con la notación anterior seguida se tiene:

	$\lambda \rightarrow -\infty$	$\lambda \rightarrow +\infty$
$P_0(\lambda) = 1$	>	>
$P_1(\lambda) = (-a_{11} - \lambda)P_0(\lambda)$	<	>
$P_2(\lambda) = (-a_{22} - \lambda)P_1(\lambda) - a_{12}a_{21}P_0(\lambda)$	>	>
$P_3(\lambda) = (-a_{33} - \lambda)P_2(\lambda) - a_{23}a_{32}P_1(\lambda)$	<	>
.		
$P_n(\lambda) = (-a_{nn} - \lambda)P_{n-1}(\lambda) - a_{n-1,n}a_{n,n-1}P_{n-2}(\lambda)$	>	>
	<	>
.		
$P_{N+1}(\lambda) = (-a_{N+1,N+1} - \lambda)P_N(\lambda) - a_{N,N+1}a_{N+1,N}P_{N-1}(\lambda)$	>	>
	<	>

$$P_{N+2}(\lambda) = (-a_{N+2, N+2} - \lambda) P_{N+1}(\lambda) - a_{N+1, N+2} a_{N+2, N+1} P_N(\lambda) \quad \begin{cases} > 0 & N \text{ par} & > 0 \\ < 0 & N \text{ non} & > 0 \end{cases}$$

El número de cambios para  $\lambda \rightarrow \infty$  es igual a  $(N+2)$ , mientras que para  $\lambda \rightarrow -\infty$  es de cero, por lo que el número de raíces reales (valores propios reales) es igual a  $(N+2)$ .

A partir del desarrollo seguido por Acrivos y Amundson (1955), para que los valores propios sean negativos, se requiere que:

$$\Delta_1 = -a_{11} < 0$$

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} -a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & -a_{22} \end{vmatrix} > 0$$

$$\Delta_3 = \begin{vmatrix} -a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & -a_{22} & a_{23} \\ 0 & a_{32} & -a_{33} \end{vmatrix} < 0$$

Este desarrollo es equivalente para cuando  $\lambda=0$ , por lo que se tendrá la siguiente sucesión de polinomios:

$$P_0 = 1 \quad > 0$$

$$P_1 = -a_{11} P_0 \quad < 0$$

$$P_2 = -a_{22} P_1 - a_{12} a_{21} P_0 \quad > 0$$

$$P_3 = -a_{33} P_2 - a_{23} a_{32} P_1 \quad < 0$$

$$P_n = -a_{nn} P_{n-1} - \sum_{i=1}^{n-1} a_{ni} P_{i-1}$$

&gt; J n par

&lt; J n non

$$P_{N+1} = -a_{N+1,N+1} P_N - \sum_{i=1}^N a_{N+1,i} P_{i-1}$$

&gt; J N non

&lt; J N par

$$P_{N+2} = -a_{N+2,N+2} P_{N+1} - \sum_{i=1}^N a_{N+2,i} P_{i-1}$$

&gt; J N par

&lt; J N non

#### 1.4 Antecedentes del trabajo.

Básicamente todos los anteriores trabajos trataron de evaluar modelos analíticos partiendo de versiones simplificadas del modelo de quinto nivel. Siendo el arranque una operación a reflujo constante, las expresiones resultantes se simplifican aún más, ya que  $V=L$  y  $F=0$ . A partir del sistema de ecuaciones (1.4)-(1.8) se llega a las siguientes ecuaciones:

Condensador:

$$PdX_{N+2}/dT = Y_{N+1} - X_{N+2} = K_{N+1}X_{N+1} - X_{N+2} \quad (1.13)$$

Plato n:

$$dX_n/dT = Y_{n-1} - Y_n + X_{n+1} - X_n = K_{n-1}X_{n-1} - (1+K_n)X_n + X_{n+1} \quad (1.14)$$

Rehervidor:

$$QdX_1/dT = -Y_1 + X_2 = -K_1X_1 + X_2 \quad (1.15)$$

Condición inicial:

$$X_n = X_{in} ; T=0$$

Donde:  $T = Lt/H$

$$P = H_c/H$$

$$Q = H_r/H$$

De la discusión dada por Pratt (1967), los trabajos de Davidson (1956), Jaswon y Smith (1954), Berg y James (1943), Jackson y Pigford (1947) y Marshal y Pigford (1947), se basaron en el siguiente modelo, aún más simplificado que el anteriormente desarrollado:

Ecuación principal:

$$dX_n/dT = Y_{n-1} - Y_n + X_{n+1} - X_n$$

Condiciones a la frontera:

a).  $Y_N = X_{N+1}$  ;  $n = N + 1$

b).  $X_1 - Y_0 = QdX_0/dT$  ;  $n = 0$

Condición inicial:

$$X_n = X_{in} ; T = 0$$

La simplificación efectuada fue suponer retención en el condensador despreciable, con lo que se elimina el efecto transiente en la primera condición de frontera. Otra simplificación resulta si se considera que la retención del reservidor es muy grande de tal modo que su composición permanezca prácticamente constante, de lo que resulta:

$$X_1 = Y_0 = \text{cte.}$$

El problema que siempre se presenta es que el sistema es no lineal por la relación de equilibrio, por lo que antes de intentar una solución analítica, se debe proceder a linearizar el sistema. Marshal y Pigford (1947) obtuvieron una solución analítica usando la siguiente relación de equilibrio:

$$Y = \alpha X$$

que es válida a concentraciones bajas. Esta relación permite la linearización del sistema, por lo que es factible encontrar una solución analítica:

$$X_{n+1}/X_0 = \alpha^{N+1} - \exp(-\beta T)$$

esta ecuación es obtenida si solo se considera el primer término transiente de una solución a partir de un tratamiento del sistema en diferencias finitas o por medio de vectores y matrices, como será discutido posteriormente. Las constantes A y B están relacionadas al primer valor propio del sistema, que es obtenido a partir de una ecuación trascendental o a partir del determinante del sistema por prueba y error. Davidson (1956) describe un método más simple para obtener las constantes en base a una analogía mecánica. Joswon y Smith (1954) dan una solución que tiene la forma de series de funciones de Bessel  $I_n$ , cuya utilidad es algo dudosa por la suposición que una perturbación solo tiene efecto hasta que ha pasado a través de la columna cuando es reflejada.

Berg y James (1943) resuelven la linearización del sistema empleando la relación:

$$X' = X/(1-X)$$

en lugar de fracciones mol, que es más confiable que la simplificación  $Y=\alpha X$ .

Jackson y Pigford (1956) son los primeros en utilizar la sustitución de términos en diferencias finitas por diferenciales, dando por resultado una ecuación diferencial parcial en un plato n cualquiera y en el tiempo. Este punto de ataque será discutido posteriormente, pero sin hacer simplificaciones en las condiciones de frontera como lo hacen estos autores, ya puntualizado anteriormente.

A partir de un planteamiento vectorial-matricial del sistema de ecuaciones planteado antes, Acrivos y Amundson (1956) evaluaron expresiones analíticas para absorbedores y extracto-

res para casos donde se adopta la simple relación de equilibrio  $y=dX$ , que permite linealizar el sistema. Partiendo de las ecuaciones 1.13-1.15, se obtiene lo siguiente:

Plato N:

$$dX_N/dT = X_{N+1} - (1+\alpha)X_N + \alpha X_{N-1} \quad (1.16)$$

Plato n:

$$dX_n/dT = X_{n+1} - (1+\alpha)X_n + \alpha X_{n-1} ; n=1,2,\dots,N \quad (1.17)$$

Plato 1:

$$dX_1/dT = X_2 - (1+\alpha)X_1 + Y_0 \quad (1.18)$$

En forma vectorial queda como sigue:

$$d\bar{X}/dT = \bar{A}\bar{X} + \bar{b} \quad (1.19)$$

donde:

$$\bar{X} = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_N \end{bmatrix} \quad \bar{b} = \begin{bmatrix} Y_0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ X_{N+1} \end{bmatrix}$$

$$\bar{A} = \begin{bmatrix} -(1+\alpha) & 1 & & & & \\ & -(1+\alpha) & 1 & & & \\ & & -(1+\alpha) & 1 & & \\ & & & \vdots & \ddots & \\ & & & & \vdots & \\ & & & & & -(1+\alpha) & 1 \\ & & & & & & -(1+\alpha) \end{bmatrix}$$

Desarrollando el determinante de  $(\bar{A}-\lambda\bar{I})$  de acuerdo a Amundson (1966) se obtiene el siguiente polinomio:

$$P_n(\lambda) = (-\alpha-1-\lambda)P_{n-1}(\lambda) - \alpha P_{n-2}(\lambda)$$

$$P_1(\lambda) = -\alpha-1-\lambda$$

$$P_0(\lambda) = 1$$

que a final de cuentas es una ecuación en diferencias de segundo orden, que puede ser resuelta dando la siguiente solución para  $\lambda_n$ :

$$\lambda_n = -\alpha-1-(4\alpha)^{1/2}\cos(\pi n/(N+1)) ; n=1,2,\dots,N$$

y junto con la solución del sistema vectorial definen completamente el sistema:

$$\bar{X} = \left( \sum_{j=1}^N e^{\lambda_j T} \Lambda_{dj} (\lambda_j \bar{I} - \bar{A}) / \prod_{i \neq j} (\lambda_j - \lambda_i) \right) (\bar{A}^{-1} \bar{b} + \bar{x}_{in}) - \bar{A}^{-1} \bar{b}$$

Otro método o procedimiento de solución es el de diferencias finitas utilizado por Lapidis y Lundson (1950) también para absorbedores y extractores. Primero se hace uso de la transformada de Laplace para eliminar la dependencia con el tiempo y posteriormente proceder a resolver el sistema en diferencias finitas en  $n$ . El problema también se reduce a encontrar los valores propios del sistema, como es señalado por Davison (1963).

En este punto es conveniente mencionar que a partir del advenimiento de las computadoras analógicas en los 50's y de las digitales en los 60's, prácticamente ya no se hicieron intentos de encontrar modelos analíticos, pues esto necesariamente implica llevar a cabo simplificaciones drásticas de linealización, por tanto se prefirió resolver los modelos no lineales por métodos numéricos, que antes no era posible por lo laborioso. La tendencia general ahora se enfoca a la implementación de métodos numéricos que disminuyan el tiempo de cómputo con resoluciones óptimas de los sistemas. Sin embargo, se siguió utilizando el modelo de quinto nivel con fines cualitativos de tendencias o comportamientos de estos sistemas en estado transitorio. Así, por ejemplo, Rose et al (1956) utilizaron computadoras digitales y analógicas para evaluar tiempos de equilibrio para perturbaciones en la composición de alimentación para diferentes volatilidades y reflujos. Mizuno et al (1972) lo utilizan para evaluar las características de asimetría, esto es, si existe una perturbación en un sentido, exig

tirá una respuesta en el tiempo diferente a la que se produciría si la perturbación es en sentido contrario.

En un intento por simplificar los sistemas multicomponentes, Osborne (1971) aproxima términos en diferencias por diferenciales, obteniendo ecuaciones diferenciales parciales, que a final de cuentas se resuelven por integración numérica.

Finalmente, algunos trabajos en años recientes y debido a la gran capacidad de las computadoras modernas, hacen uso de los modelos de nivel superior, como es el caso de Morris y Svrcek (1981) que toman en cuenta los cambios en retención, flujos y entalpías a lo largo de toda la columna, incluso para el caso de no equilibrio. Thomas (1981) también plantea los modelos considerando variaciones en la retención de vapor, cosa que la gran mayoría de autores consideran despreciable.

Una excelente recopilación y discusión de trabajos sobre los diferentes niveles es dada por Doherty y Perkins (1982).

Para fines cualitativos de estudio de la dinámica de sistemas de destilación se utiliza con bastante frecuencia la linealización por medio de expansiones en series de Taylor tomando solamente los términos lineales, siendo esta aproximación válida para pequeñas desviaciones del estado estacionario. Posteriormente se verá en más detalle este aspecto. En gran cantidad de textos de dinámica y control se sigue este procedimiento para evaluar la respuesta de estos sistemas cuando son perturbados, de tal modo, que permita visualizarse en forma analítica su comportamiento, por ejemplo, Douglas (1980), Franks (1972) y Luyben (1981) dan una discusión bastante profunda sobre este tema.

### 1.5 Pautas a seguir en el desarrollo del trabajo.

En este trabajo se perturbará la concentración de alimentación y el reflujo, esperándose que a partir de los resultados obtenidos por estos efectos se pueda generalizar a los casos donde se involucren otras condiciones de operación.

Del modelo de quinto nivel establecido se obtendrán las expresiones particulares para cada uno de los casos a tratar: arranque y estado estacionario perturbado.

Para el arranque se linearizará bajo la suposición de volatilidades cercanas a la unidad y/o concentraciones pequeñas. Esto nos permitirá cubrir rangos de validez donde una o las dos condiciones anteriores se satisficgan, obteniendo así una mayor extensión.

Para el estado estacionario perturbado se linearizará para condiciones cercanas o en la vecindad del estado estacionario, expandiendo en series de Taylor y truncando hasta los términos lineales. De esta manera es como se procede corrientemente en el estudio dinámico de estos sistemas.

El establecimiento de los rangos de validez de los sistemas linearizados se hará obteniendo el error relativo del valor obtenido de la solución numérica de los modelos no lineales.

La idea de este procedimiento es partir de lo más sencillo posible, y de los resultados obtenidos, concluir sobre lo más complejo.

## CAPITULO 2

## ARRANQUE

## 2.1 Modelo simplificado para el arranque.

A partir del modelo simple desarrollado, ecs. (1.4)-(1.8), y sabiendo que en el arranque se trabaja a reflujo total ( $V=L$  y  $\beta=0$ ), se llega al siguiente sistema de ecuaciones diferenciales:

Condensador:

$$H_c dX_{N+2}/dt = LY_{N+1} - LX_{N+2} \quad (2.1)$$

Plato n:

$$HdX_n/dt = LY_{n-1} - LY_n + LX_{n+1} - LX_n ; n=2,3,\dots,N \quad (2.2)$$

Rehervidor:

$$H_r dX_1/dt = -LY_1 + LX_2 \quad (2.3)$$

que junto con la ecuación de equilibrio (1.9) constituye el sistema total. Como condición inicial se tiene:  $X_n = X_{in}$  = composición inicial ;  $t=0$ .

Si el sistema se adimensionaliza haciendo:  $T=Lt/H$ ,  $P=H_c/H$  y  $Q=H_r/H$ , se obtiene:

Condensador:

$$PdX_{N+2}/dT = Y_{N+1} - X_{N+2} \quad (2.4)$$

Plato n:

$$dX_n/dT = Y_{n-1} - Y_n + X_{n+1} - X_n \quad (2.5)$$

Rehervidor:

$$QdX_1/dT = -X_1 + X_2 \quad (2.5)$$

Condición inicial:  $X_n = X_{in}$  ;  $T=0$

## 2.2 Obtención de modelos analíticos.

Si se reemplaza la ecuación de equilibrio (1.9) en las ecuaciones (2.4)-(2.6), de tal modo que se tenga el sistema solo en función de la composición del líquido, y si la volatilidad es cercana a la unidad y/o la composición es muy pequeña, se obtiene un conjunto de ecuaciones linealizadas:

Condensador:

$$PdX_{N+2}/dT = -X_{N+2} + \alpha X_{N+1} \quad (2.7)$$

Plato n:

$$dX_n/dT = X_{n+1} - X_n - \alpha X_n + \alpha X_{n-1} \quad (2.8)$$

Rehervidor:

$$QdX_1/dT = X_2 - \alpha X_1 \quad (2.9)$$

Mediante el uso de la transformada de Laplace, el sistema (2.7)-(2.9), se simplifica a un conjunto de ecuaciones en diferencias, que en principio es factible de resolver:

$$\bar{X}_{n+1} - (S+\alpha+1)\bar{X}_n + \alpha\bar{X}_{n-1} = -X_{in} \quad (2.10)$$

Condiciones a la frontera:

$$\alpha\bar{X}_{N+1} - (PS+1)\bar{X}_{N+2} = -PX_{in} ; n=N+2$$

$$\bar{X}_2 - (QS+\alpha)\bar{X}_1 = -QX_{in} ; n=1$$

Se obtendría la solución en función del parámetro S de la transformada, para después proceder a aplicar la antitransformada y obtener la solución en función de T. Por este procedimiento se han encontrado soluciones para casos de absorbedores y extractores (Lapidus y Amundson (1950)), donde las condiciones de frontera son constantes. Aquí el problema se complica, ya que las condiciones de frontera son funciones. A final de cuentas, el problema se reduce a evaluar los valores propios de un sistema de ecuaciones, como se procederá en el método vectorial (Davison (1963)).

Otro posible planteamiento consiste en aproximar términos en diferencias por diferenciales, usado por Jackson y Pigford (1956) y Osborne (1971). Los primeros obtienen soluciones para casos donde el rehervidor tiene capacidad infinita o pequeña. El segundo hace este planteamiento para dinámica de columnas de destilación multicomponente, más complicado que el que nos interesa y que a final de cuentas se resuelve, otra vez, numéricamente. Si se hace esta aproximación en las ecuaciones (2.7)-(2.9) por medio de las siguientes expresiones:

$$\partial^2 X / \partial n^2 = X_{n+1} - 2X_n + X_{n-1}$$

$$\partial X / \partial n = X_n - X_{n-1}$$

se obtienen las siguientes ecuaciones, previo rearrreglo de términos:

$$\partial^2 X / \partial n^2 - (\alpha - 1) \partial(X(1-X) / (1 + (\alpha - 1)X)) / \partial n = \partial X / \partial T \quad (2.11)$$

Condiciones a la frontera:

$$\partial X / \partial n - (\alpha / (1 + (\alpha - 1)X) - 1)X = -P \partial X / \partial T ; n = N + 1 \quad (2.12)$$

$$\partial X / \partial n - (\alpha / (1 + (\alpha - 1)X) - 1)X = Q \partial X / \partial T ; n = 0 \quad (2.13)$$

Condición inicial:  $X_n = X_{in} ; T = 0$

Linearizando bajo volatilidades cercanas a la unidad y/o concentraciones muy pequeñas, se obtienen las siguientes expresiones:

$$\partial^2 X / \partial n^2 - (\alpha - 1) \partial X / \partial n = \partial X / \partial T \quad (2.14)$$

Condiciones a la frontera:

$$\partial X / \partial n - (\alpha - 1)X = -P \partial X / \partial T ; n = N + 1 \quad (2.15)$$

$$\partial X / \partial n - (\alpha - 1)X = Q \partial X / \partial T ; n = 0 \quad (2.16)$$

Por medio de la transformada de Laplace y reagrupando términos:

$$d^2 \bar{X} / dn^2 - (\alpha - 1) d\bar{X} / dn - S\bar{X} = -X_{in} \quad (2.17)$$

Condiciones a la frontera:

$$d\bar{X} / dn - (\alpha - 1 + QS)\bar{X} = -QX_{in} ; n = 0 \quad (2.18)$$

$$d\bar{x}/dn - (\alpha-1-PS)\bar{x} = P\bar{x}_{in} ; n=N+2 \quad (2.19)$$

Resolviendo para una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden con coeficientes constantes, se tiene:

Solución homogénea:

$$\bar{x}_n = C_1 \exp(m_1 n) + C_2 \exp(m_2 n)$$

Solución particular:

$$\bar{x}_p = \bar{x}_{in}/S$$

donde:  $C_1$  y  $C_2$  = constantes a evaluar de las condiciones de frontera.

$$\begin{aligned} m_1 \text{ y } m_2 &= \text{raíces del polinomio característico.} \\ &= (\alpha-1 \pm ((\alpha-1)^2 + 4S)^{1/2})/2 \end{aligned}$$

Si se sustituye  $\xi = \alpha-1$  en la ecuación (2.17) y en las condiciones de frontera (2.18) y (2.19), se tiene:

$$d^2\bar{x}/dn^2 - \xi d\bar{x}/dn - S\bar{x} = -\bar{x}_{in} \quad (2.20)$$

$$d\bar{x}/dn - (\xi+QS)\bar{x} = -Q\bar{x}_{in} ; n=1 \quad (2.21)$$

$$d\bar{x}/dn - (\xi-PS)\bar{x} = P\bar{x}_{in} ; n=N+2 \quad (2.22)$$

La solución queda como sigue:

$$\bar{x} = \bar{x}_{in}/S + C_1 \exp(m_1 n) + C_2 \exp(m_2 n) \quad (2.23)$$

$$\text{donde: } m_1 = (\xi + (\xi^2 + 4S)^{1/2})/2$$

$$m_2 = (\xi - (\xi^2 + 4S)^{1/2})/2$$

Diferenciando (2.23) con respecto a  $n$ :

$$d\bar{X}/dn = C_1 m_1 \exp(m_1 n) + C_2 m_2 \exp(m_2 n) \quad (2.24)$$

Sustituyendo (2.24) en las condiciones de frontera (2.21) y (2.22); junto con la ecuación (2.23):

$$\begin{aligned} C_1 m_1 \exp(m_1) + C_2 m_2 \exp(m_2) &= (\epsilon + QS)(C_1 \exp(m_1) + C_2 \exp(m_2)) \\ &+ X_{in}/S - QX_{in} \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned} C_1 m_1 \exp(m_1 N) + C_2 m_2 \exp(m_2 N) &= (\epsilon - PS)(C_1 \exp(m_1 N) + C_2 \exp(m_2 N)) \\ &+ X_{in}/S + PX_{in}; \quad N=N+2 \end{aligned} \quad (2.26)$$

Manipulando las ecuaciones (2.25) y (2.26), se obtienen las siguientes expresiones para  $C_1$  y  $C_2$ :

$$C_1 \exp(m_1)(m_1 - \epsilon - QS) + C_2 \exp(m_2)(m_2 - \epsilon - QS) = (\epsilon + QS)X_{in}/S - QX_{in}$$

$$C_1 \exp(m_1 N)(m_1 - \epsilon + PS) + C_2 \exp(m_2 N)(m_2 - \epsilon + PS) = (\epsilon - PS)X_{in}/S$$

$$+ PX_{in}$$

$$C_1 = A/B \quad (2.27)$$

$$\text{donde: } A = \epsilon X_{in} (m_2 - \epsilon - QS)/S$$

$$- \epsilon X_{in} (m_2 - \epsilon + PS) \exp(m_2(N-1))/S$$

$$\begin{aligned} \Psi &= (m_1 - \epsilon + PS)(m_2 - \epsilon - QS) \exp(m_1 N) \\ &\quad - (m_1 - \epsilon - QS)(m_2 - \epsilon + PS) \exp(m_2 N + m_1 - m_2) \end{aligned}$$

$$J_2 = \Psi/D$$

(2.28)

$$\text{Como: } D = \epsilon \frac{1}{2} (m_1 - \epsilon - QS)$$

$$- \epsilon \frac{1}{2} (m_1 - \epsilon + PS) \exp(m_1 (N-1))$$

$$D = (m_2 - \epsilon + PS)(m_1 - \epsilon - QS) \exp(m_2 N)$$

$$- (m_2 - \epsilon - QS)(m_1 - \epsilon + PS) \exp(m_1 N + m_2 - m_1)$$

Desarrollo de los términos entre paréntesis:

$$m_1 - \epsilon - QS = -\epsilon/2 - QS + (\epsilon^2/4 + S)^{1/2}$$

$$m_1 - \epsilon + PS = -\epsilon/2 + PS + (\epsilon^2/4 + S)^{1/2}$$

$$m_2 - \epsilon - QS = -\epsilon/2 - QS - (\epsilon^2/4 + S)^{-1/2}$$

$$m_2 - \epsilon + PS = -\epsilon/2 + PS - (\epsilon^2/4 + S)^{-1/2}$$

$$\begin{aligned} (m_2 - \epsilon + PS)(m_1 - \epsilon - QS) &= (m_1 - \epsilon - QS)(m_2 - \epsilon + PS) = aS - bS(\epsilon^2/4 + S)^{1/2} \\ &\quad - cS^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (m_2 - \epsilon - QS)(m_1 - \epsilon + PS) &= (m_1 - \epsilon + PS)(m_2 - \epsilon - QS) = aS - bS(\epsilon^2/4 + S)^{1/2} \\ &\quad - cS^2 \end{aligned}$$

$$\text{donde: } a = \epsilon(Q-P)/2 - 1$$

$$b = P + Q$$

$$c = PQ$$

Sustituyendo los anteriores desarrollos se llega a la siguiente expresión:

$$\bar{X} = X_{in}/S + \epsilon \zeta_{in} ((E-G)/(M-O) + (S-W)/(Y-Z)) \quad (2.29)$$

$$\text{donde: } E = (-\epsilon/2S - Q + (\epsilon^2/4 + S)^{1/2}/S) \exp(m_2 n)$$

$$G = (-\epsilon/2S + P + (\epsilon^2/4 + S)^{1/2}/S) \exp(m_2 n + m_1 (N-1))$$

$$M = (aS + bS(\epsilon^2/4 + S)^{1/2} - cS^2) \exp(m_2 N)$$

$$O = (aS - bS(\epsilon^2/4 + S)^{1/2} - cS^2) \exp(m_1 N + m_2 - m_1)$$

$$S = (-\epsilon/2S - Q - (\epsilon^2/4 + S)^{1/2}/S) \exp(m_1 n)$$

$$W = (-\epsilon/2S + P - (\epsilon^2/4 + S)^{1/2}/S) \exp(m_1 n + m_2 (N-1))$$

$$Y = (aS - bS(\epsilon^2/4 + S)^{1/2} - cS^2) \exp(m_1 n)$$

$$Z = (aS + bS(\epsilon^2/4 + S)^{1/2} - cS^2) \exp(m_2 N + m_1 - m_2)$$

Antes de llevar a cabo la antitransformada de (2.29), es necesario simplificarla aún más. Considerando que  $\epsilon$  es muy pequeño se pueden despreciar  $M$  y  $Z$  en los denominadores correspondientes, obteniendo la siguiente expresión:

$$\bar{X} = X_{in}/S + \epsilon X_{in} \{ (E-G)/L + (H-I)/Z \} \quad (2.30)$$

$$\text{donde: } E = (-E/2S - \sqrt{(\epsilon^2/4+S)^{1/2}/S}) \exp((n-1)m_2 - (n-1)m_1)$$

$$G = (-E/2S + P + (\epsilon^2/4+S)^{1/2}/S) \exp((n-1)m_2)$$

$$H = (-E/2S - Q - (\epsilon^2/4+S)^{1/2}/S) \exp((n-1)m_1)$$

$$I = (-E/2S + P - (\epsilon^2/4+S)^{1/2}/S) \exp((n-1)m_1 + (n-1)m_2)$$

$$Z = aS - bS(\epsilon^2/4+S) - cS^2$$

Desarrollando en fracciones parciales el denominador se tiene:

$$\bar{X} = X_{in}/S + \epsilon X_{in} \{ (E-G)/-O + (H-I)/O \} \quad (2.31)$$

$$\text{donde: } O = (a - cS + bS^{1/2}) \{ A/(S-r_1) + B/(S-r_2) \} / S$$

$$A = 1/(r_1 - r_2)$$

$$B = -1/(r_1 - r_2)$$

$$r_1 = (b^2 + 2ac + ((b^2 + 2ac)^2 - 4a^2c^2)^{1/2}) / 2c^2$$

$$r_2 = (b^2 + 2ac - ((b^2 + 2ac)^2 - 4a^2c^2)^{1/2}) / 2c^2$$

En la obtención de la antitransformada se utilizaron las siguientes fórmulas:

$$\exp(-kS^{1/2})$$

$$(k/2^{1/2} t^{3/2}) \exp(-k^2/4t)$$

$s^{-1/2} \exp(-zs^{1/2})$	$(t)^{-1/2} \exp(-k^2/4t)$
$s^{-1} \exp(-ks^{1/2})$	$\operatorname{erfc}(k/2t^{1/2})$
$s^{-3/2} \exp(-ks^{1/2})$	$2(t)^{1/2} \exp(-k^2/4t)$
	$-\operatorname{erfc}(k/(4t)^{1/2})$
$s^{-2} \exp(-ks^{1/2})$	$(t+k^2/2) \operatorname{erfc}(k/(4t)^{1/2})$
	$-(t)^{1/2} k \exp(-k^2/4t)$
$f(s)g(s)$	$\int_0^T f(x)g(T-x)dx$
	0

Aplicando las anteriores fórmulas se obtienen los siguientes desarrollos:

$$X/X_{in} = 1 - EJ \quad (2.32)$$

donde:  $J = D \exp((n-M)E/2) + Z \exp((n-1)E/2)$

$$D = \int_0^T E(G + M) dx$$

$$R = A \exp(r_1(T-x)) + B \exp(r_2(T-x))$$

$$Z = \int_0^T Y(R + S) dx$$

$$Y = A \exp(r_1(T-x)) + B \exp(r_2(T-x))$$

$$G = ((x+(n+N-2)^2/2) a \epsilon / 2 - \epsilon c / 2 - \epsilon b(n+N-2) / 2 + Qa + \\ a(n+N-2) - b) \operatorname{erfc}((n+N-2) / (4x)^{1/2}) + (-\epsilon a(n+N-2) \\ (x/\pi)^{1/2} / 2 + \epsilon b(x/\pi)^{1/2} - \sqrt{c(n+N-2)} / (2(\pi x^3)^{1/2}) + \\ Qb / (\pi x)^{1/2} - 2a(x/\pi)^{1/2} + c / (\pi x)^{1/2}) \exp(-(n+N-2)^2 / 4x)$$

$$M = ((x+(n-N)^2/2) a \epsilon / 2 + \epsilon c / 2 + \epsilon b(n-N) / 2 - Qa + a(n-N) \\ - b) \operatorname{erfc}((n-N) / (4x)^{1/2}) + (\epsilon a(n-N)(x/\pi)^{1/2} / 2 - b \epsilon (x/\pi)^{1/2} \\ + Qc(n-N) / (2(\pi x^3)^{1/2}) - Qb / (\pi x)^{1/2} - 2a(x/\pi)^{1/2} + \\ c / (\pi x)^{1/2}) \exp(-(n-N)^2 / 4x)$$

$$R = ((x+(n-1)^2/2) a \epsilon / 2 + \epsilon c / 2 + \epsilon b(n-1) / 2 + Pa - a(n-1) \\ + b) \operatorname{erfc}((n-1) / (4x)^{1/2}) + (a \epsilon (n-1)(x/\pi)^{1/2} / 2 - \\ b(x/\pi)^{1/2} - Pc(n-1) / (2(\pi x^3)^{1/2}) + Pb / (\pi x)^{1/2} + \\ 2a(x/\pi)^{1/2} - c / (\pi x)^{1/2}) \exp(-(n-1)^2 / 4x)$$

$$S = ((x+(n-2N)^2/2) a \epsilon / 2 - \epsilon c / 2 - \epsilon b(n-2N) / 2 - Pa - \\ a(n-2N) + b) \operatorname{erfc}((n-2N) / (4x)^{1/2}) + (-\epsilon a(n-2N)(x/\pi)^{1/2} / 2 \\ + b(x/\pi)^{1/2} + Pc(n-2N) / (2(\pi x^3)^{1/2}) - Pb / (\pi x)^{1/2}) \exp(-(n-2N)^2 / 4x)$$

$$+ 2a(x/\pi)^{1/2} - c/(\pi x)^{1/2} \exp(-(n-2a)^2/4x)$$

La expresión final para  $n=N+2$  queda como sigue:

$$X/X_{in} = 1 - EJ \quad (2.33)$$

donde:  $J = D + L \exp((n+1)E/2)$

$$D = \int_0^T E(G + M) dx$$

$$L = \int_0^T E(R + S) dx$$

$$E = A \exp(r_1(T-x)) + B \exp(r_2(T-x))$$

$$G = (Ea(x+(2N+2)^2/2)/2 - Ec/2 - Eb(2N+2)/2 + Qa + a(2N+2)$$

$$- b) \operatorname{erfc}((2N+2)/(x)^{1/2}) + (-Ea(2N+2)(x/\pi)^{1/2}/2$$

$$- Eb(x/\pi)^{1/2} - Qc(2N+2)/(2(\pi x^3)^{1/2}) + \sqrt{b}/(\pi x)^{1/2}$$

$$- 2a(x/\pi)^{1/2} - c/(\pi x)^{1/2} \exp(-(2N+2)^2/4x)$$

$$M = -Eax/2 + Ec/2 - Qa - b - Eb(x/\pi)^{1/2} - \sqrt{b}/(\pi x)^{1/2} -$$

$$2a(x/\pi)^{1/2} + c/(\pi x)^{1/2}$$

$$\begin{aligned}
 R = & (-\epsilon a(x+(N+1)^2/2)/2 + \epsilon c/2 + \epsilon b(N+1)/2 + P_1 - a(N+1) \\
 & + b) \operatorname{erfc}((N+1)/(4x)^{1/2}) + (\epsilon a(N+1)(x/\pi)^{1/2} - \\
 & \epsilon b(x/\pi)^{1/2} - P_0(N+1)/(2(\pi x^3)^{1/2}) + P_0/(\pi x)^{1/2} + \\
 & 2a(x/\pi)^{1/2} - c/(\pi x)^{1/2}) \exp(-(N+1)^2/4x)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 S = & (\epsilon a(x+(N+2)^2/2)/2 - \epsilon c/2 + \epsilon b(N+2)/2 - P_1 + a(N+2) \\
 & + b) \operatorname{erfc}(-(N+2)/(4x)^{1/2}) + (\epsilon a(N+2)(x/\pi)^{1/2}/2 + \\
 & \epsilon b(x/\pi)^{1/2} - P_0(N+2)/(2(\pi x^3)^{1/2}) - P_0/(\pi x)^{1/2} + \\
 & 2a(x/\pi)^{1/2} - c/(\pi x)^{1/2}) \exp(-(N+2)^2/4x)
 \end{aligned}$$

Para el caso  $P=Q$  se tiene:

$$\begin{aligned}
 r_1 \text{ y } r_2 &= (b^2 + 4ac \pm ((b^2 + 4ac)^2 - 4a^2c^2)^{1/2})/2c^2 \\
 (b^2 + 4ac)^2 - 4a^2c^2 &= b^4 + 4b^2ac = b^2(b^2 + 4ac) \\
 b^2 + 4ac &= (P+Q)^2 + 4((P-Q)/2 - 1)(P_1) \\
 &= 4P^2 - 4P^2 = 0
 \end{aligned}$$

Si el discriminante es 0, entonces:  $r_1 = r_2$ , por lo que:

$$R \exp(r_1(\pi-x)) = R \exp(r_2(\pi-x))$$

De lo anterior resulta que para  $P=Q$ ,  $s=0$  y por lo tanto:

$$X/X_{in} = 1$$

$$X = X_{in}$$

Es decir que para el caso  $P=Q$ , el modelo planteado no predice variación en la composición inicial.

En las anteriores ecuaciones intervienen funciones errores complemento. Para evaluarlas se obtuvo de Abramowitz y Stegun (1972) la siguiente fórmula aproximada:

$$\operatorname{erfc}(x) = (a_1 u + a_2 u^2 + a_3 u^3) \exp(-x^2) + e(x)$$

donde:  $u = 1/(1+px)$

$$p = 0.47317$$

$$a_1 = 0.3438212$$

$$a_2 = -0.0958793$$

$$a_3 = 0.7473556$$

$$e(x) = \text{error} = 2.5 \times 10^{-5}$$

Para la evaluación de la integral se utiliza el método de Simpson:

$$\int_a^b f(x)dx = (h/3)(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \dots + 4f_{n-3} + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n)$$

A continuación se da el programa para calcular  $\lambda/\lambda_{in}$  en la calculadora HP-41CV:

01 LBL TER	19 XEQ SEC	37 R/S
02 LBL 01	20 STO 69	38 RCL 69
03 RCL 42	21 STO+ 63	39 STO+ 63
04 RCL 53	22 GTO 01	40 GTO 01
05 x<y?	23 LBL 03	41 RPN
06 GTO 02	24 RCL 67	42 END
07 GTO 03	25 1	
08 LBL 02	26 *	
09 RCL 66	27 RCL 63	
10 RCL 53	28 2	
11 +	29 *	
12 STO 53	30 +	
13 XEQ SEC	31 RCL 69	
14 STO+ 67	32 -	
15 RCL 66	33 RCL 66	
16 RCL 53	34 *	
17 +	35 3	
18 STO 53	36 ÷	



La anterior sucesión de polinomios  $P_n$  cambia alternativamente de signo, como ya se había establecido anteriormente, por lo que existirán  $(n+2)$  valores reales. Si se analiza la sucesión para el caso  $\lambda=0$ :

$$P_0 = 1$$

$$P_1 = -K_1/q$$

$$P_2 = -(1+K_2)(-K_1/q) - K_1/q = K_1/q(1+K_2-1) = K_1 K_2/q$$

$$P_3 = -(1+K_3)K_1 K_2/q - K_2(-K_1/q) = -K_1 K_2/q(1+K_3-1) = -K_1 K_2 K_3/q$$

$$P_4 = -(1+K_4)(-K_1 K_2 K_3/q) - K_3(K_1 K_2/q) = K_1 K_2 K_3 K_4/q$$

.

$$P_n = (-1)^n K_1 K_2 K_3 K_4 \dots K_n/q$$

.

$$P_{N+1} = (-1)^{N+1} K_1 K_2 \dots K_{N+1}/q$$

$$\begin{aligned} P_{N+2} &= -(1/P)(-1)^{N+1} K_1 K_2 \dots K_{N+1}/q - (K_{N+1}/P)(-1)^N K_1 K_2 \dots K_N/q \\ &= -(-1)^N K_1 K_2 \dots K_N (K_{N+1} - K_{N+1})/(Pq) = 0 \end{aligned}$$

Del desarrollo anterior se puede concluir que para el arranque siempre existirá un valor propio igual a cero, ya que para  $\lambda=0$ ,

$$P_{N+2} = 0.$$

Para el caso donde  $K_1 = \alpha$ , ecuaciones (2.7)-(2.9), la matriz  $\bar{A}$  queda como sigue:

$$\bar{A} = \begin{bmatrix} -\alpha/\lambda & 1/\lambda & & & & & \\ & -(1+\alpha) & 1 & & & & \\ & & -(1+\alpha) & 1 & & & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & -(1+\alpha) & 1 & \\ & & & & \alpha/P & -1/P & \end{bmatrix}$$

El desarrollo en polinomios del  $\det(\bar{A} - \lambda \bar{I})$  es:

$$P_0(\lambda) = 1$$

$$P_1(\lambda) = (-\alpha/\lambda - \lambda)P_0(\lambda)$$

$$P_2(\lambda) = (-(1+\alpha) - \lambda)P_1(\lambda) - \alpha/\lambda P_0(\lambda)$$

$$P_3(\lambda) = (-(1+\alpha) - \lambda)P_2(\lambda) - \alpha P_1(\lambda)$$

$$P_{N+1}(\lambda) = (-(1+\alpha) - \lambda)P_N(\lambda) - \alpha P_{N-1}(\lambda)$$

$$P_{N+2}(\lambda) = (-1/P - \lambda)P_{N+1}(\lambda) - \alpha/P P_N(\lambda)$$

De nuevo para el caso  $\lambda = 0$ , la secuencia es:

$$P_0 = 1$$

$$P_1 = -\alpha/Q$$

$$P_2 = -(1+\alpha)(-\alpha/Q) - \alpha/Q = (\alpha/Q)(1+\alpha) - \alpha/Q = \alpha^2/Q$$

$$P_3 = -(1+\alpha)\alpha^2/Q - (-\alpha/Q) = -\alpha^2/Q(1+\alpha-1) = -\alpha^3/Q$$

$$P_4 = -(1+\alpha)(-\alpha^3/Q) - (\alpha^2/Q) = \alpha^3/Q(1+\alpha-1) = \alpha^4/Q$$

$$P_n = (-1)^n \alpha^n / Q$$

$$P_{N+1} = (-1)^{N+1} \alpha^{N+1} / Q$$

$$P_{N+2} = -(1/P)(-1)^{N+1} \alpha^{N+1} / Q - (\alpha/P)(-1)^N \alpha^N / Q$$

$$= -(1/P)(-1)^N (\alpha^N / Q)(-\alpha + \alpha) = 0$$

Se vuelve a repetir que para  $\lambda=0$ ,  $P_{N+2}=0$ , ya que este es un caso particular del más general.

La solución de la ecuación (2.34) es:

$$\bar{U} = (\exp(\bar{\lambda}T)) \bar{U}_{in} \quad (2.35)$$

donde:  $\bar{U}$  = vector de concentraciones. =  $\bar{x}/K_{in}$

$\bar{U}_{in}$  = vector de concentraciones iniciales. =  $\bar{x}_{in}/K_{in}$

Por fórmula de Sylvester:

$$\exp(\bar{T}) = \sum_{j=1}^{n+2} \exp(\lambda_j \bar{T}) (\text{adj}(\lambda_j I - \bar{T}) / \prod_{i \neq j} (\lambda_j - \lambda_i))$$

Por este procedimiento, la tarea restante consiste en encontrar los valores propios (uno de ellos es cero, como ya se vio anteriormente) negativos. Aprovechando la expansión en polinomios ya establecida, el problema se reduce a evaluar las raíces del polinomio global  $P_{i+2}$ . El método de búsqueda de raíces de Muller, es el utilizado, y se da la continuación:

1. Dar tres aproximaciones al cero de una función  $f(x)$ :

$$x_i, x_{i-1}, x_{i-2}. \text{ Calcular: } f_i, f_{i-1}, f_{i-2}.$$

2. Calcular:  $h_i = x_i - x_{i-1}$ ,  $\lambda'_i = h_i / (x_{i-1} - x_{i-2})$ .

3. Calcular:  $r_i = (1 + 2\lambda'_i)(f_i - f_{i-1}) - \lambda'^2_i (f_{i-1} - f_{i-2})$

4. Calcular:  $\lambda'_{i+1} = -2f'_i(1 + \lambda'_i) / r$

$$r = \frac{2}{\lambda'_i} \left( \epsilon_i^2 - f_i(1 + \lambda'_i)\lambda'_i(f_i - f_{i-1} - \lambda'_i(f_{i-1} - f_{i-2})) \right)^{1/2}$$

5. Calcular:  $x_{i+1} = x_i + h_i \lambda'_{i+1}$ ,  $h_{i+1} = h_i \lambda'_{i+1}$ .

6. Calcular:  $f_{i+1} = f(x_{i+1})$  y aumentar  $i$  en 1.

7. Repetir etapas 3 a 6 hasta que se satisfaga alguno de los siguientes criterios:

- a.  $(x_i - x_{i-1}) / (x_i) < \epsilon_1$

- b.  $f(x_i) < \epsilon_2$

El programa en FORTRAN utilizado para evaluar los valores propios es el siguiente:

```

C      EVALUACION DE LOS VALORES PROPIOS DE LA MATRIZ "A" DEL
C      MODELO VECTORIAL PARA LA DETERMINACION DE TIEMPOS DE
C      ARRANQUE EN UNA COLUMNA DE DESTILACION BISIARIA POR EL
C      METODO DE MULLER
C
      DIMENSION X(100),G(100),EF(100),H(100),EV(100),DL(100)
      READ/,N,ALFA,PK,KK
      PRINT*/,N,ALFA,PK,KK
      A=-(1.+ALFA)
      B=-1./PK
      C=ALFA/PK
      D=1./KK
      E=-ALFA/KK
      X(1)=1.
      X(2)=2.
      X(3)=3.
      CALL EFX(N,ALFA,PK,KK,A,B,C,D,E,X(1),EF(1),M,EV)
      CALL EFX(N,ALFA,PK,KK,A,B,C,D,E,X(2),EF(2),M,EV)
      CALL EFX(N,ALFA,PK,KK,A,B,C,D,E,X(3),EF(3),M,EV)
      H(3)=X(3)-X(2)
      DL(3)=H(3)/(X(2)-X(1))
      DO 100 I=3,100
      G(I)=(1.+2.*DL(I))*(EF(I)-EF(I-1))-DL(I)**2*(EF(I-1)-
13EF(I-2))
      GS=G(I)**2-4.*EF(I)*(1.+DL(I))*DL(I)*(EF(I)-EF(I-1)-
1DL(I)*(EF(I-1)-EF(I-2)))
      IF(GS.LT.0.) GS=0.
      ES=SQRT(GS)

```

```

GE1=F(I)+F
GE2=F(I)-GE
IF(ABS(GE1).GE.ABS(GE2)) GO TO 400
DL(I+1)=-2.*EF(I)*(1.+DL(I))/GE2
GO TO 500
400 DL(I+1)=-2.*EF(I)*(1.+DL(I))/GE1
500 K(I+1)=K(I)+H(I)*DL(I+1)
H(I+1)=H(I)*DL(I+1)
CALL BFX(N,ALFA,PK,QK,A,B,C,D,E,K(I+1),EF(I+1),M,EV)
IF(ABS((K(I+1)-K(I))/K(I+1)).LT.1.E-7.OR.
11*S(EF(I+1)).LT.1.E-7) GO TO 300
100 CONTINUE
300 EV(K)=K(I+1)
PRINT/,"EIGVAL",K(I+1),"EIG",EF(I+1),"IT",I
500 CONTINUE
STOP
END

```

C

```

SUBROUTINE BFX(N,ALFA,PK,QK,A,B,C,D,E,K,EF,E,EV)
DIMENSION P(100),EV(100)
P(1)=E-A
P(2)=(A-K)*P(1)-ALFA*D
DO 200 K=3,N+1
200 P(K)=(A-K)*P(K-1)-ALFA*P(K-2)
P(N+2)=(E-K)*P(N+1)-C*P(N)
IF(M.EQ.1) GO TO 900
DO 201 J=1,N-1
201 P(N+2)=P(N+2)/(K-EV(J))
900 EF=P(N+2)
RETURN
END

```

Además, en la ecuación (2.35) se requiere evaluar la matriz adjunta de  $(\lambda_j \bar{I} - \bar{A})$ , para ello es necesario determinar la matriz de cofactores  $(\bar{B}_j)$  de  $(\lambda_j \bar{I} - \bar{A})$ , siendo la matriz transpuesta de  $\bar{B}_j$  ( $\bar{B}_j^T$ ) la matriz adjunta de interés. El desarrollo para  $N=3$  es el siguiente:

$$(\lambda_j \bar{I} - \bar{A}) = \begin{bmatrix} f_j & -1/Q & 0 & 0 & 0 \\ -\alpha & \varepsilon_j & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha & \varepsilon_j & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha & \varepsilon_j & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -\alpha/Q & h_j \end{bmatrix}$$

$$\text{donde: } f_j = (\lambda_j + \alpha/Q)$$

$$\varepsilon_j = (\lambda_j + (1+\alpha))$$

$$h_j = (\lambda_j + 1/P)$$

$$\bar{B}_j = \begin{bmatrix} B_{11}^j & B_{12}^j & B_{13}^j & B_{14}^j & B_{15}^j \\ B_{21}^j & B_{22}^j & B_{23}^j & B_{24}^j & B_{25}^j \\ B_{31}^j & B_{32}^j & B_{33}^j & B_{34}^j & B_{35}^j \\ B_{41}^j & B_{42}^j & B_{43}^j & B_{44}^j & B_{45}^j \\ B_{51}^j & B_{52}^j & B_{53}^j & B_{54}^j & B_{55}^j \end{bmatrix}$$

$$\text{donde: } B_{ij}^j = \text{cofactor de } (\lambda_j \bar{I} - \bar{A})$$

Para evaluar cada uno de los cofactores  $B_{ij}^j$  se necesita desarrollar los determinantes correspondientes. Aprovechando la expansión en serie de polinomios de Sturm para matrices tridiagona -

les, se obtienen los siguientes resultados:

$$B_{11}^j = h_j P_3 - \alpha P_2 / P ; P_3 = g_j P_2 - \alpha P_1 ; P_2 = g_j P_1 - \alpha ; P_1 = g_j$$

$$= h_j P_3 - \alpha P_2 / P ; P_3 = g_j (P_2 - \alpha) ; P_2 = g_j^2 - \alpha$$

$$B_{22}^j = h_j P_3 - \alpha P_2 / P ; P_3 = g_j P_2 - \alpha P_1 ; P_2 = g_j P_1 ; P_1 = f_j$$

$$= h_j P_3 - \alpha g_j f_j / P ; P_3 = (g_j^2 - \alpha) f_j$$

$$B_{33}^j = h_j P_3 - \alpha P_2 / P ; P_3 = g_j P_2 ; P_2 = g_j P_1 - \alpha / Q ; P_1 = f_j$$

$$= (h_j g_j - \alpha / P) P_2 ; P_2 = g_j f_j - \alpha / Q$$

$$B_{44}^j = h_j P_3 ; P_3 = g_j P_2 - \alpha P_1 ; P_2 = g_j P_1 - \alpha / Q ; P_1 = f_j$$

$$= h_j (g_j P_2 - \alpha f_j) ; P_2 = g_j f_j - \alpha / Q$$

$$B_{55}^j = g_j P_3 - \alpha P_2 ; P_3 = g_j P_2 - \alpha P_1 ; P_2 = g_j P_1 - \alpha / Q ; P_1 = f_j$$

$$= g_j P_3 - \alpha P_2 ; P_3 = g_j P_2 - \alpha f_j ; P_2 = g_j f_j - \alpha / Q$$

$$-B_{12}^j = h_j P_3 - \alpha P_2 / P ; P_3 = g_j P_2 - \alpha P_1 ; P_2 = g_j P_1 ; P_1 = -\alpha$$

$$= h_j P_3 + \alpha^2 g_j / P ; P_3 = -(g_j^2 - \alpha)$$

$$-B_{23}^j = h_j P_3 - \alpha P_2 / P ; P_3 = g_j P_2 ; P_2 = -\alpha P_1 ; P_1 = f_j$$

$$= -(h_j g_j - \alpha / P) \alpha f_j$$

$$-n_{34}^j = h_j P_3 ; P_3 = -\alpha P_2 ; P_2 = g_j P_1 - \alpha/Q ; P_1 = f_j$$

$$= -h_j \alpha (g_j f_j - \alpha/Q)$$

$$-n_{45}^j = -\alpha P_3/P ; P_3 = g_j P_2 - \alpha P_1 ; P_2 = g_j P_1 - \alpha/Q ; P_1 = f_j$$

$$= -\alpha/P (g_j P_2 - \alpha f_j) ; P_2 = g_j f_j - \alpha/Q$$

$$-n_{21}^j = h_j P_3 - \alpha P_2/P ; P_3 = g_j P_2 - \alpha P_1 ; P_2 = g_j P_1 ; P_1 = -1/Q$$

$$= h_j P_3 + \alpha g_j / PQ ; P_3 = -(g_j^2 - \alpha)/Q$$

$$-n_{32}^j = h_j P_3 - \alpha P_2/P ; P_3 = g_j P_2 ; P_2 = -P_1 ; P_1 = f_j$$

$$= -(h_j g_j - \alpha/P) f_j$$

$$-n_{43}^j = h_j P_3 ; P_3 = -P_2 ; P_2 = g_j P_1 - \alpha/Q ; P_1 = f_j$$

$$= -h_j (g_j f_j - \alpha/Q)$$

$$-n_{54}^j = -P_3 ; P_3 = g_j P_2 - \alpha P_1 ; P_2 = g_j P_1 - \alpha/Q ; P_1 = f_j$$

$$= -(g_j P_2 - \alpha f_j) ; P_2 = g_j f_j - \alpha/Q$$

$$n_{13}^j = h_j P_3 - \alpha P_2/P ; P_3 = g_j P_2 ; P_2 = -\alpha P_1 ; P_1 = -\alpha$$

$$= (h_j g_j - \alpha/P) \alpha^2$$

$$n_{24}^j = h_j P_3 ; P_3 = -\alpha P_2 ; P_2 = -\alpha P_1 ; P_1 = f_j$$

$$= h_j \alpha^2 f_j$$

$$\begin{aligned} \cdot^i_{35} &= -\alpha P_3/P ; P_3 = -\alpha P_2 ; P_2 = g_j P_1 - \alpha/Q ; P_1 = f_j \\ &= \alpha^2/P(g_j f_j - \alpha/Q) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \cdot^i_{31} &= h_j P_3 - \alpha P_2/P ; P_3 = g_j P_2 ; P_2 = -P_1 ; P_1 = -1/Q \\ &= (h_j g_j - \alpha/P)/Q \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \cdot^i_{42} &= g_j P_3 ; P_3 = -P_2 ; P_2 = -P_1 ; P_1 = f_j \\ &= h_j f_j \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \cdot^i_{53} &= -P_3 ; P_3 = -P_2 ; P_2 = g_j P_1 - \alpha/Q ; P_1 = f_j \\ &= g_j f_j - \alpha/Q \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \cdot^i_{14} &= h_j P_3 ; P_3 = -\alpha P_2 ; P_2 = -\alpha P_1 ; P_1 = -\alpha \\ &= -h_j \alpha^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \cdot^i_{25} &= -\alpha P_3/P ; P_3 = -\alpha P_2 ; P_2 = -\alpha P_1 ; P_1 = f_j \\ &= -\alpha^3 f_j/P \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \cdot^i_{41} &= h_j P_3 ; P_3 = -P_2 ; P_2 = -P_1 ; P_1 = -1/Q \\ &= -h_j/Q \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \cdot^i_{52} &= -P_3 ; P_3 = -P_2 ; P_2 = -P_1 ; P_1 = f_j \\ &= -f_j \end{aligned}$$

$$P_{15} = -\alpha P_3 / P ; P_3 = -\alpha P_2 ; P_2 = -\alpha P_1 ; P_1 = -\alpha \\ = -\alpha^4 / P$$

$$P_{51} = -P_3 ; P_3 = -P_2 ; P_2 = -P_1 ; P_1 = -1/Q \\ = 1/Q$$

Expandiendo la ecuación (2.35) para  $N=3$ :

$$\exp(\bar{A}T) = (\exp \lambda_1 T) \text{Adj}(\lambda_1 \bar{I} - \bar{A}) / ((\lambda_1 - \lambda_2)(\lambda_1 - \lambda_3)(\lambda_1 - \lambda_4)(\lambda_1 - \lambda_5)) + \\ (\exp \lambda_2 T) \text{Adj}(\lambda_2 \bar{I} - \bar{A}) / ((\lambda_2 - \lambda_1)(\lambda_2 - \lambda_3)(\lambda_2 - \lambda_4)(\lambda_2 - \lambda_5)) + \\ (\exp \lambda_3 T) \text{Adj}(\lambda_3 \bar{I} - \bar{A}) / ((\lambda_3 - \lambda_1)(\lambda_3 - \lambda_2)(\lambda_3 - \lambda_4)(\lambda_3 - \lambda_5)) + \\ (\exp \lambda_4 T) \text{Adj}(\lambda_4 \bar{I} - \bar{A}) / ((\lambda_4 - \lambda_1)(\lambda_4 - \lambda_2)(\lambda_4 - \lambda_3)(\lambda_4 - \lambda_5)) + \\ (\exp \lambda_5 T) \text{Adj}(\lambda_5 \bar{I} - \bar{A}) / ((\lambda_5 - \lambda_1)(\lambda_5 - \lambda_2)(\lambda_5 - \lambda_3)(\lambda_5 - \lambda_4))$$

Para  $U_5$ , los únicos elementos a considerar de  $\bar{E}_1^T$  son los del renglón 5, por lo que la expresión queda como sigue:

$$U_5 = (P_{15}^1 + P_{25}^1 + P_{35}^1 + P_{45}^1 + P_{55}^1) (\exp \lambda_1 T) / ((\lambda_1 - \lambda_2) \dots (\lambda_1 - \lambda_5)) + \\ (P_{15}^2 + P_{25}^2 + P_{35}^2 + P_{45}^2 + P_{55}^2) (\exp \lambda_2 T) / ((\lambda_2 - \lambda_1) \dots (\lambda_2 - \lambda_5)) + \\ (P_{15}^3 + P_{25}^3 + P_{35}^3 + P_{45}^3 + P_{55}^3) (\exp \lambda_3 T) / ((\lambda_3 - \lambda_1) \dots (\lambda_3 - \lambda_5)) +$$

$$\begin{aligned} & (\alpha_{15}^4 + \alpha_{25}^4 + \alpha_{35}^4 + \alpha_{45}^4 + \alpha_{55}^4) (\exp \lambda_4 T) / ((\lambda_4 - \lambda_1) \dots (\lambda_4 - \lambda_5)) + \\ & (\alpha_{15}^5 + \alpha_{25}^5 + \alpha_{35}^5 + \alpha_{45}^5 + \alpha_{55}^5) (\exp \lambda_5 T) / ((\lambda_5 - \lambda_1) \dots (\lambda_5 - \lambda_4)) \end{aligned}$$

Los elementos  $\alpha_{ij}^j$  son:

$$\alpha_{15}^j = \alpha^4 / P$$

$$\alpha_{25}^j = \alpha^3 f_j / P$$

$$\alpha_{35}^j = \alpha^2 (g_j f_j - \alpha / Q) / P$$

$$\alpha_{45}^j = \alpha (g_j P_2 - \alpha f_j) / P ; P_2 = g_j f_j - \alpha / Q$$

$$\alpha_{55}^j = g_j P_3 - \alpha P_2 ; P_3 = g_j P_2 - \alpha f_j ; P_2 = g_j f_j - \alpha / Q$$

Siguiendo un desarrollo similar para  $N=9$ , los elementos  $\alpha_{i,11}^j$  de la expresión correspondiente son:

$$\alpha_{1,11}^j = -\alpha P_9 / P ; P_9 = -\alpha P_3 ; \dots ; P_1 = -\alpha$$

$$= \alpha^{10} / P$$

$$\alpha_{2,11}^j = \alpha P_9 / P ; P_9 = -\alpha P_3 ; \dots ; P_1 = f_j$$

$$= \alpha^9 f_j / P$$

$$\alpha_{3,11}^j = -\alpha P_9 / P ; P_9 = -\alpha P_3 ; \dots ; P_2 = g_j P_1 - \alpha / Q ; P_1 = f_j$$

$$\mathfrak{N}_{3,11}^j = \alpha^3 (\varepsilon_j f_j - \alpha/Q) / P$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{N}_{4,11}^j &= \alpha^2 P_9 / P ; P_9 = -\alpha P_3 ; \dots ; P_3 = \varepsilon_j P_2 - \alpha P_1 ; P_2 = \varepsilon_j P_1 - \alpha / Q ; P_1 = f_j \\ &= \alpha^2 (\varepsilon_j P_2 - \alpha f_j) / P ; P_2 = \varepsilon_j f_j - \alpha / Q \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{N}_{5,11}^j &= -\alpha P_9 / P ; P_9 = -\alpha P_3 ; \dots ; P_4 = \varepsilon_j P_3 - \alpha P_2 ; \dots ; P_2 = \varepsilon_j P_1 - \alpha / Q \\ & ; P_1 = f_j \end{aligned}$$

$$= \alpha^3 (\varepsilon_j P_3 - \alpha P_2) / P ; P_3 = \varepsilon_j P_2 - \alpha f_j ; P_2 = \varepsilon_j f_j - \alpha / Q$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{N}_{6,11}^j &= \alpha P_9 / P ; P_9 = -\alpha P_3 ; \dots ; P_5 = \varepsilon_j P_4 - \alpha P_3 ; \dots ; P_2 = \varepsilon_j P_1 - \alpha / Q \\ & ; P_1 = f_j \end{aligned}$$

$$= \alpha^5 (\varepsilon_j P_4 - \alpha P_3) / P ; P_4 = \varepsilon_j P_3 - \alpha P_2 ; P_3 = \varepsilon_j P_2 - \alpha f_j ; P_2 = \varepsilon_j f_j - \alpha / Q$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{N}_{7,11}^j &= -\alpha P_9 / P ; P_9 = -\alpha P_3 ; \dots ; P_6 = \varepsilon_j P_5 - \alpha P_4 ; \dots ; P_2 = \varepsilon_j P_1 - \alpha / Q \\ & ; P_1 = f_j \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \alpha^4 (\varepsilon_j P_5 - \alpha P_4) / P ; P_5 = \varepsilon_j P_4 - \alpha P_3 ; \dots ; P_3 = \varepsilon_j P_2 - \alpha f_j \\ & ; P_2 = \varepsilon_j f_j - \alpha / Q \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{N}_{8,11}^j &= \alpha P_9 / P ; P_9 = -\alpha P_3 ; \dots ; P_7 = \varepsilon_j P_6 - \alpha P_5 ; \dots ; P_2 = \varepsilon_j P_1 - \alpha / Q \\ & ; P_1 = f_j \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \alpha^3 (\varepsilon_j P_6 - \alpha P_5) / P ; P_6 = \varepsilon_j P_5 - \alpha P_4 ; \dots ; P_3 = \varepsilon_j P_2 - \alpha f_j \\ & ; P_2 = \varepsilon_j f_j - \alpha / Q \end{aligned}$$

$$\mathfrak{N}_{9,11}^j = -\alpha P_9 / P ; P_9 = -\alpha P_3 ; P_3 = \varepsilon_j P_7 - \alpha P_6 ; \dots ; P_2 = \varepsilon_j P_1 - \alpha / Q ; P_1 = f_j$$

$$B_{9,11}^j = \alpha^2 (E_j P_7 - \alpha P_6) / P ; P_7 = E_j P_5 - \alpha P_5 ; \dots ; P_3 = E_j P_2 - \alpha f_j ;$$

$$; P_2 = E_j f_j - \alpha / Q$$

$$B_{10,11}^j = \alpha P_9 / P ; P_9 = E_j P_3 - \alpha P_7 ; \dots ; P_2 = E_j P_1 - \alpha / Q ; P_1 = f_j$$

$$= (E_j P_3 - \alpha P_7) / P ; P_3 = E_j P_7 - \alpha P_6 ; \dots ; P_3 = E_j P_2 - \alpha f_j ;$$

$$; P_2 = E_j f_j - \alpha / Q$$

$$B_{11,11}^j = E_j P_9 - \alpha P_8 ; P_9 = E_j P_3 - \alpha P_7 ; \dots ; P_2 = E_j P_1 - \alpha / Q ; P_1 = f_j$$

$$= E_j P_9 - \alpha P_8 ; P_9 = E_j P_3 - \alpha P_7 ; \dots ; P_3 = E_j P_2 - \alpha f_j ; P_2 = E_j f_j - \alpha / Q$$

Los anteriores desarrollos nos permiten generalizar la secuencia para cualquier  $N$ :

$$B_{1,N+2}^j = \alpha^{N+1} / P$$

$$P_{2,N+2}^j = \alpha^N f_j / P$$

$$B_{3,N+2}^j = \alpha^{N-1} (E_j f_j - \alpha / Q) / P$$

$$B_{4,N+2}^j = \alpha^{N-2} (E_j P_2 - \alpha f_j) / P ; P_2 = E_j f_j - \alpha / Q$$

$$B_{5,N+2}^j = \alpha^{N-3} (E_j P_3 - \alpha P_2) / P ; P_3 = E_j P_2 - \alpha f_j ; P_2 = E_j f_j - \alpha / Q$$

$$B_{6,N+2}^j = \alpha^{N-4} (E_j P_4 - \alpha P_3) / P ; P_4 = E_j P_3 - \alpha P_2 ; P_3 = E_j P_2 - \alpha f_j ;$$

$$; P_2 = E_j f_j - \alpha / Q$$

$$B_{7,N+2}^j = \alpha^{N-5} (g_j P_5 - \alpha P_4) / P ; P_5 = g_j P_4 - \alpha P_3 ; \dots ; P_3 = g_j P_2 - \alpha f_j$$

$$; P_2 = g_j f_j - \alpha / Q$$

$$B_{k,N+2}^j = \alpha^{N-(k-2)} (g_j P_{k-2} - \alpha P_{k-3}) / P ; P_{k-2} = g_j P_{k-3} - \alpha P_{k-4} ; \dots$$

$$; P_3 = g_j P_2 - \alpha f_j ; P_2 = g_j f_j - \alpha / Q$$

$$B_{N,N+2}^j = \alpha^2 (g_j P_{N-2} - \alpha P_{N-3}) / P ; P_{N-2} = g_j P_{N-3} - \alpha P_{N-4} ; \dots$$

$$; P_3 = g_j P_2 - \alpha f_j ; P_2 = g_j f_j - \alpha / Q$$

$$B_{N+1,N+2}^j = (g_j P_{N-1} - \alpha P_{N-2}) / P ; P_{N-1} = g_j P_{N-2} - \alpha P_{N-3} ; \dots$$

$$; P_3 = g_j P_2 - \alpha f_j ; P_2 = g_j f_j - \alpha / Q$$

$$B_{N+2,N+2}^j = g_j P_N - \alpha P_{N-1} ; P_N = g_j P_{N-1} - \alpha P_{N-2} ; \dots ; P_3 = g_j P_2 - \alpha f_j$$

$$; P_2 = g_j f_j - \alpha / Q$$

La ecuación general para  $U_{N+2}$  se puede establecer con la anterior secuencia, quedando como sigue:

$$U_{N+2} = \sum_{j=1}^{N+2} (\exp \lambda_j T) (B_{1,N+2}^j + B_{2,N+2}^j + B_{3,N+2}^j + B_{4,N+2}^j + B_{5,N+2}^j + B_{6,N+2}^j + \dots$$

$$+ B_{k,N+2}^j + \dots + B_{N+2,N+2}^j) / \prod_{i \neq j} (\lambda_j - \lambda_i)$$

Sustituyendo:

$$\begin{aligned}
 U_{N+2} = & \sum_{j=1}^{N+2} (\exp \lambda_j T) (\alpha^{N+1}/P + \alpha^N f_j/P + \alpha^{N-1} (g_j f_j - \alpha/Q)/P + \\
 & + \alpha^{N-2} (r_j P_2 - \alpha f_j)/P + \alpha^{N-3} (r_j P_3 - \alpha P_2)/P + \\
 & + \dots + \alpha^{N-(k-2)} (r_j P_{k-2} - \alpha P_{k-3})/P + \dots + \\
 & + g_j P_N - P_{N-1}) / \prod_{i \neq j} (\lambda_i - \lambda_i) \quad (2.36)
 \end{aligned}$$

donde:  $P_k = g_j P_{k-1} - \alpha P_{k-2}$  ;  $P_{k-1} = g_j P_{k-2} - \alpha P_{k-3}$  ; ...

;  $P_3 = g_j P_2 - \alpha f_j$  ;  $P_2 = r_j f_j - \alpha/Q$

Para  $N=3$  la ecuación (2.36) queda como sigue:

$$\begin{aligned}
 U_5 = & \sum_{j=1}^5 (\exp \lambda_j T) (\alpha^4/P + \alpha^3 f_j/P + \alpha^2 (g_j f_j - \alpha/Q)/P + \\
 & + (r_j P_2 - \alpha f_j)/P + g_j P_3 - P_2) / \prod_{i \neq j} (\lambda_i - \lambda_i) \quad (2.37)
 \end{aligned}$$

donde:  $P_3 = g_j P_2 - \alpha f_j$

$P_2 = r_j f_j - \alpha/Q$

Para  $N=9$  se obtiene la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned}
 U_{11} = & \sum_{j=1}^{11} (\exp \lambda_j T) (\alpha^{10} / P + \alpha^9 \varepsilon_j / P + \alpha^8 (\varepsilon_j \varepsilon_j - \alpha / Q) / P + \\
 & + \alpha^7 (\varepsilon_j P_2 - \alpha \varepsilon_j) / P + \alpha^6 (\varepsilon_j P_3 - \alpha P_2) / P + \\
 & + \alpha^5 (\varepsilon_j P_4 - \alpha P_3) / P + \alpha^4 (\varepsilon_j P_5 - \alpha P_4) / P + \\
 & + \alpha^3 (\varepsilon_j P_6 - \alpha P_5) / P + \alpha^2 (\varepsilon_j P_7 - \alpha P_6) / P + \\
 & + (\varepsilon_j P_8 - \alpha P_7) / P + \varepsilon_j P_9 - P_8) / \prod_{i=1}^{11} (\lambda_j - \lambda_i)
 \end{aligned}
 \tag{2.35}$$

$$\text{donde: } P_9 = \varepsilon_j P_8 - \alpha P_7 ; P_8 = \varepsilon_j P_7 - \alpha P_6 ; P_7 = \varepsilon_j P_6 - \alpha P_5 ;$$

$$P_6 = \varepsilon_j P_5 - \alpha P_4 ; P_5 = \varepsilon_j P_4 - \alpha P_3 ; P_4 = \varepsilon_j P_3 - \alpha P_2 ;$$

$$P_3 = \varepsilon_j P_2 - \alpha P_1 ; P_2 = \varepsilon_j P_1 - \alpha /$$

Las anteriores ecuaciones pueden quedar aún más compactas si se hacen las sustituciones de las P's:

$$\begin{aligned}
 U_{N+2} = & \sum_{j=1}^{N+2} (\exp \lambda_j T) (\alpha^{N+1} / P + \alpha^N P_1 / P + \alpha^{N-1} P_2 / P + \alpha^{N-2} P_3 / P + \\
 & + \alpha^{N-3} P_4 / P + \dots + \alpha^{N-(k-2)} P_{k-1} / P + \dots + \\
 & + P_{N+1}) / \prod_{i \neq j} (\lambda_j - \lambda_i)
 \end{aligned}$$

$$U_{N+2} = \sum_{j=1}^{N+2} (\exp \lambda_j T) \left( \sum_{k=1}^{N+1} \alpha^{N-(k-2)} P_{k-1} / P + P_{N+1} \right) / \prod_{i=1}^{N+2} (\lambda_j - \lambda_i)
 \tag{2.36}$$

$$U_5 = \sum_{j=1}^5 (\exp \lambda_j T) \left( \left( \sum_{k=1}^4 \alpha^{2-(k-2)P_{k-1}} \right) / P + P_5 \right) / \prod_{i \neq j} (\lambda_j - \lambda_i) \quad (2.37)$$

$$U_{11} = \sum_{j=1}^{11} (\exp \lambda_j T) \left( \left( \sum_{k=1}^{10} \alpha^{2-(k-2)P_{k-1}} \right) / P + P_{10} \right) / \prod_{i \neq j} (\lambda_j - \lambda_i) \quad (2.38)$$

donde:  $P_0 = 1$

$$P_1 = F_j$$

Para fines de cálculo, las ecuaciones 2.36-2.38 puede quedar como sigue:

$$U_{N+2} = \sum_{j=1}^{N+2} \exp(\lambda_j T) S_j \quad (2.36)$$

$$\text{donde: } S_j = \left( \left( \sum_{k=1}^{N+1} \alpha^{N-(k-2)P_{k-1}} \right) / P + P_{N+1} \right) / \prod_{i \neq j} (\lambda_j - \lambda_i)$$

$$U_5 = \sum_{j=1}^5 \exp(\lambda_j T) S_j \quad (2.37)$$

$$U_{11} = \sum_{j=1}^{11} \exp(\lambda_j T) S_j \quad (2.38)$$

Los valores propios de la matriz  $\bar{A}$  evaluados por el método de Muller a partir del desarrollo en polinomios del determinante de  $(\bar{A}-\lambda\bar{I})$  se dan en las tablas 2.1 y 2.2.

Tabla 2.1. Valores propios de  $\bar{A}$  para  $N=3$  y  $E_0=3.0$  para diferentes valores de  $\alpha$ .

$\alpha$	1.00001	1.0001	1.001	1.005
$\lambda_1$	0.0	0.0	0.0	0.0
$\lambda_2$	-0.1523737	-0.1523305	-0.15229495	-0.1522546
$\lambda_3$	-0.3649627	-0.3650016	-0.3653909	-0.3671229
$\lambda_4$	-2.1304713	-2.1305694	-2.1315506	-2.1359106
$\lambda_5$	-3.4633923	-3.4635434	-3.4701039	-3.4770412
$\alpha$	1.01	1.05	1.1	1.5
$\lambda_1$	0.0	0.0	0.0	0.0
$\lambda_2$	-0.1536512	-0.1570364	-0.1613504	-0.2191334
$\lambda_3$	-0.3652912	-0.3687924	-0.3730023	-1.0019172
$\lambda_4$	-2.1913573	-2.2343749	-2.28391045	-2.7175454
$\lambda_5$	-3.4356942	-3.5546262	-3.6400119	-4.2976974

Tabla 2.2. Valores propios de  $\bar{\lambda}$  para  $N=9$  y  $P_{\alpha}=3.0$  para diferentes valores de  $\alpha$ .

$\alpha$	1.00001	1.0001	1.001	1.005
$\lambda_1$	0.0	0.0	0.0	0.0
$\lambda_2$	-0.0461131	-0.0461131	-0.0461311	-0.0462234
$\lambda_3$	-0.5034460	-0.2046319	-0.2047742	-0.2051373
$\lambda_4$	-0.9392449	-0.5034597	-0.5036954	-0.5047059
$\lambda_5$	-0.2046727	-0.9393273	-0.9397500	-0.9416312
$\lambda_6$	-1.4793529	-1.4793255	-1.4305915	-1.4335524
$\lambda_7$	-2.0760742	-2.0761670	-2.0771013	-2.07812536
$\lambda_8$	-2.6711116	-2.6712313	-2.6724337	-2.6777733
$\lambda_9$	-3.2074215	-3.2075059	-3.2090090	-3.2157202
$\lambda_{10}$	-3.6323504	-3.6330139	-3.6346434	-3.6419092
$\lambda_{11}$	-3.9059315	-3.9061073	-3.9073647	-3.9156709
$\alpha$	1.01	1.05		1.5
$\lambda_1$	0.0	0.0		0.0
$\lambda_2$	-0.0463597	-0.0477327		-0.1004463
$\lambda_3$	-0.2057126	-0.2102190		-0.2915505
$\lambda_4$	-0.5059757	-0.5103973		-0.6599472
$\lambda_5$	-0.9439076	-0.9630302		-1.1903901
$\lambda_6$	-1.4372559	-1.5100731		-1.3602433
$\lambda_7$	-2.0364424	-2.1279223		-2.5915720
$\lambda_8$	-2.6344449	-2.7376002		-3.3210347
$\lambda_9$	-3.2234273	-3.2372169		-3.9733103
$\lambda_{10}$	-3.6509759	-3.7231523		-4.4990145
$\lambda_{11}$	-3.9254179	-4.0029731		-4.8340107

Los resultados obtenidos con las ecuaciones 2.17 y 2.18 se dan en las tablas 2.3-2.6.

Tabla 2.3. Sumatorias ( $S_j$ ) de la ecuación 2.17 para  $N=3$  y  $P_1=3.0$  con diferentes valores  $\alpha$ .

$\alpha$	1.00001	1.0001	1.001	1.005
$S_1$	1.00022	1.0002	1.002	1.00999
$S_2$	$-2.9 \times 10^{-5}$	-0.0002	-0.001986	-0.00992
$S_3$	$-2.6 \times 10^{-3}$	$-2.7 \times 10^{-3}$	$1.2 \times 10^{-7}$	$3.6 \times 10^{-3}$
$S_4$	-0.0002	$-1.4 \times 10^{-5}$	$-1.7 \times 10^{-5}$	$-3.6 \times 10^{-5}$
$S_5$	$-2.6 \times 10^{-10}$	$-2.4 \times 10^{-10}$	$1.6 \times 10^{-9}$	$4.4 \times 10^{-10}$
$\alpha$	1.01	1.05	1.1	1.5
$S_1$	1.01995	1.09372	1.19429	1.50
$S_2$	-0.01992	-0.09339	-0.194314	-0.42776
$S_3$	$1.5 \times 10^{-5}$	0.00036	0.001431	0.031773
$S_4$	$-1.4 \times 10^{-4}$	-0.00009	-0.001419	-0.00425
$S_5$	$1.3 \times 10^{-7}$	$4.4 \times 10^{-6}$	$1.7 \times 10^{-5}$	0.00025

Tabla 2.4. Sumatorias ( $S_j$ ) de la ecuación (2.3) para  $\beta = 1$  y  $P = 3.0$  con diferentes valores de  $\alpha$ .

$\alpha$	1.00001	1.0001	1.001	1.005
$S_1$	1.00005	1.00005	1.0005	1.005073
$S_2$	$-4.4 \times 10^{-5}$	$-0.000433$	$-0.004332$	$-0.024454$
$S_3$	$-1.5 \times 10^{-6}$	$-1.5 \times 10^{-5}$	$-0.000154$	$-0.000775$
$S_4$	$-2.0 \times 10^{-9}$	$1.6 \times 10^{-8}$	$1.1 \times 10^{-6}$	$5.2 \times 10^{-5}$
$S_5$	$-1.7 \times 10^{-10}$	$1.0 \times 10^{-9}$	$1.2 \times 10^{-7}$	$3.1 \times 10^{-5}$
$S_6$	$-0.2 \times 10^{-11}$	$-1.9 \times 10^{-10}$	$1.7 \times 10^{-8}$	$4.3 \times 10^{-7}$
$S_7$	$-2.9 \times 10^{-8}$	$-2.8 \times 10^{-7}$	$-2.6 \times 10^{-6}$	$-1.4 \times 10^{-5}$
$S_8$	$-1.7 \times 10^{-10}$	$-2.9 \times 10^{-11}$	$3.0 \times 10^{-9}$	$7.7 \times 10^{-8}$
$S_9$	$7.4 \times 10^{-11}$	$1.3 \times 10^{-10}$	$1.0 \times 10^{-9}$	$-3.3 \times 10^{-5}$
$S_{10}$	$-1.7 \times 10^{-7}$	$-1.6 \times 10^{-6}$	$-1.6 \times 10^{-5}$	$-4.2 \times 10^{-6}$
$S_{11}$	$-4.0 \times 10^{-9}$	$-4.3 \times 10^{-8}$	$-4.4 \times 10^{-7}$	$7.0 \times 10^{-9}$
$\alpha$	1.01	1.05		1.5
$S_1$	1.050282	1.455276		3.0
$S_2$	$-0.049743$	$-0.251611$		$-2.514470$
$S_3$	$-0.001562$	$-0.006400$		$-0.026516$
$S_4$	$0.000210$	$0.005434$		$0.703130$
$S_5$	$1.2 \times 10^{-5}$	$0.000323$		$0.056703$
$S_6$	$1.7 \times 10^{-6}$	$4.6 \times 10^{-5}$		$0.004506$
$S_7$	$-0.9 \times 10^{-5}$	$-0.000157$		$-0.004739$
$S_8$	$3.1 \times 10^{-7}$	$6.2 \times 10^{-6}$		$0.000127$
$S_9$	$2.9 \times 10^{-3}$	$6.3 \times 10^{-7}$		$-0.223616$
$S_{10}$	$-0.000157$	$-0.000906$		$0.001557$
$S_{11}$	$-4.4 \times 10^{-6}$	$-2.4 \times 10^{-5}$		$-0.000733$

Tábla 2.5. Valores de  $K/N_{10}$  para diferentes valores de  $T$ ,  $N=3$  y  $K=20.0$ .

$\alpha$ $T$	1.00001	1.0001	1.001	1.005
10	1.000416	1.000157	1.001569	1.007463
20	1.000819	1.000191	1.001907	1.008547
30	1.001219	1.000193	1.001930	1.008790
40	"	1.000199	1.001935	1.008963
50	"	"	1.001939	1.009045
60	"	"	"	1.009099
70	1.001220	"	"	"
80	"	"	"	"
90	"	1.00120	"	"
100	"	"	1.00200	"
110	"	"	"	1.00999
$\alpha$ $T$	1.01	1.05	1.1	1.5
10	1.015333	1.073251	1.155773	1.707027
20	1.019032	1.094464	1.166557	1.769709
30	1.019752	1.097435	1.166777	1.780399
40	1.019907	1.097533	1.166990	1.790371
50	1.019943	1.097712	1.167270	1.799993
60	1.019949	1.097719	1.167249	1.799999
100	"	"	"	1.800000
110	"	"	"	"
120	1.019950	"	"	"
130	"	1.097720	1.167250	"

Tabla 2.6. Valores de  $K/C_{in}$  para  $n=2$  para diferentes valores de  $T$ ,  $k=9$  y  $P=3.0$ .

$\alpha$ T	1.00001	1.0001	1.001	1.005
10	1.000019	1.000195	1.001956	1.000798
30	1.000033	1.000379	1.003791	1.000113
50	1.000045	1.000452	1.004541	1.000263
70	1.000054	1.000481	1.004811	1.000419
90	1.000063	1.000492	1.004947	1.000594
110	"	1.000497	1.004973	1.000723
130	"	1.000498	1.004981	1.000813
150	"	1.000499	1.004983	"
170	"	"	1.005001	"
190	"	"	"	"
220	1.000050	1.000500	"	"
$\alpha$ T	1.01	1.15		1.5
10	1.019533	1.099561		2.119567
20	1.030999	1.153597		2.668791
40	1.042651	1.213067		2.954797
60	1.047253	1.240967		2.993932
80	1.049037	1.249773		2.999133
100	1.049409	1.253160		2.999391
120	1.050055	1.254462		2.999335
140	1.050203	1.254963		2.999933
160				2.999999
200				3.000000

En las tablas 2.3-2.6. se observa que el valor de  $S_1$  corresponde al valor que adquiere  $Q_{1, \alpha, n}$  cuando  $T$  tiende a infinito. Este valor es el máximo que se puede alcanzar, y caracteriza la estabilidad del modelo. En la tabla 2.7 se dan los valores de  $T$  a los que se alcanza el valor de  $S_1$ .

Tabla 2.7. Valores de  $T$  en los que se alcanza  $S_1$ , para diferentes  $\alpha$ .

N=3				
$\alpha$	1.00001	1.0001	1.001	1.005
T	70	90	100	110
$\alpha$	1.01	1.05	1.1	1.5
T	120	130	130	100
N=9				
$\alpha$	1.00001	1.0001	1.001	1.005
T	220	210	170	130
$\alpha$	1.01	1.05		1.5
T	120	150		200

### 2.3 Solución numérica de los modelos no lineal y lineal.

Esta parte tiene como interés principal analizar la información proporcionada por los modelos no lineales para ver el comportamiento cinético en una forma más exacta y establecer los rangos de validez de los modelos lineales. El método a utilizar para la evaluación numérica es el de Runge-Kutta-Gill, que es usado para este tipo de sistemas por Osborne (1971) y Mizuno, et al (1972). Del sistema de ecuaciones (2.1)-(2.3) y sustituyendo la ecuación de equilibrio (1.9) se obtiene:

$$dX_{N+2}/dT = -X_{N+2}/P + \alpha X_{N+1} P (1 + (\alpha-1) X_{N+1}) \quad (2.39)$$

$$dX_n/dT = X_{n+1} - (1 + \alpha / (1 + (\alpha-1) X_n)) X_n + \alpha X_{n-1} / (1 + (\alpha-1) X_{n-1}) \quad (2.40)$$

$$dX_1/dT = X_2/Q - \alpha X_1 / Q (1 + (\alpha-1) X_1) \quad (2.41)$$

que constituye un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales de primer orden. Si se dan las condiciones de volatiliades cercanas a la unidad y/o concentraciones muy pequeñas, además, si se hace la substitución  $U_n = X_n / X_{in}$ , se tiene:

$$dU_{N+2}/dT = -U_{N+2}/P + \alpha U_{N+1} P \quad (2.42)$$

$$dU_n/dT = U_{n+1} - (1 + \alpha) U_n + \alpha U_{n-1} ; n=2, 3, \dots, N+1 \quad (2.43)$$

$$dU_1/dT = U_2/Q - \alpha U_1/Q \quad (2.44)$$

Condición inicial:  $U_n = U_{in} ; T=0$

En la evaluación numérica, los rangos de las variables que se involucran deben observar condiciones en las que se basan las simpli

ficaciones, por lo tanto, estos son los que se utilizaron:

$$T = 0-100$$

$$N = 3, 9, 19, 29, 39, 49$$

$$\alpha = 1.00001, 1.0001, 1.001, 1.005, 1.01, 1.05, 1.1, 1.5$$

$$X_{in} = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25, 0.3, 0.35, 0.4, 0.45, 0.5$$

Los pasos del método de Runge-Kutta-Gill son:

$$1. k_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$2. k_2 = hf(x_n + h/2, y_n + k_1/2)$$

$$3. k_3 = hf(x_n + h/2, y_n + (-1/2 + 1/2^{1/2})k_1 + (1 - 1/2^{1/2})k_2)$$

$$4. k_4 = hf(x_n + h, y_n + (-1/2^{1/2})k_2 + (1 + 1/2^{1/2})k_3)$$

$$5. y_{n+1} = y_n + (k_1 + k_4)/6 + (1 - 1/2^{1/2})k_2/3 + (1 + 1/2^{1/2})k_3/3$$

Los programas en FORTRAN utilizados para resolver los modelos no lineal y lineal en el arranque son:

```

C      EVALUACION DE TIEMPOS DE ARRANQUE EN UN SISTEMA DE
C      DESTILACION MINERAL POR MEDIO DEL METODO DE KUNZI -
C      KUTPA-GILL PARA EL SISTEMA NO LINEAL
C
      DIMENSION X(120),KK1(120),KK12(120),KK23(120),
      LAK1(120),AK2(120),AK3(120),AK4(120)
      READ/,ALFA,DELTA
      DO 20 N=9,49,10
      DO 10 KO=0.05,0.5,0.95
      PRINT*/N,ALFA,KO,DELTA
      X1(1)=KO
      M=N+2
      DO 200 J=2,N
200  X1(J)=X1(1)
      T=0.0
      TI=0.0
      DO 700 T=10,100,10
800  TI=TI+DELTA
C
C      CALCULO DE KLR
C
      AK1(1)=(X1(2)-(ALFA*X1(1)))/(1.+(ALFA-1.)*X1(1))*DELTA/3.
      KK1(1)=X1(1)+AK1(1)/2.
      DO 300 L1=2,N+1
      KK1(L1)=(X1(L1+1)-(1.+ALFA/(1.+(ALFA-1.)*X1(L1)))*X1(L1)
      1+(ALFA*X1(L1-1)))/(1.+(ALFA-1.)*X1(L1-1))*DELTA
300  KK1(L1)=X1(L1)+KK1(L1)/2.
      AK1(N+2)=(-X1(N+2)+(ALFA*X1(N+1))/(1.+(ALFA-1.)*X1(N+1)))*
      1DELTA/3.
      KK1(N+2)=X1(N+2)+KK1(N+2)/2.

```

C

C CALCULO DE K2R

C

BETA=1./SQRT(2.)-0.5

GAMA=1.-1./SQRT(2.)

AK2(1)=(XK1(2)-(ALFA\*XK1(1))/(1.+(ALFA-1.)\*XK1(1)))\*DELTA/3

XK12(1)=X1(1)+BETA\*XK1(1)+GAMA\*AK2(1)

DO 400 L2=2,N+1

AK2(L2)=(XK1(L2+1)-(1.+ALFA/(1.+(ALFA-1.)\*XK1(L2))))\*

1XK1(L2)+(ALFA\*XK1(L2-1))/(1.+(ALFA-1.)\*XK1(L2-1))\*DELTA

400 XK12(L2)=X1(L2)+BETA\*XK1(L2)+GAMA\*AK2(L2)

XK2(N+2)=(-XK1(N+2)+(ALFA\*XK1(N+1))/(1.+(ALFA-1.)\*

1XK1(N+1)))\*DELTA/3.

XK12(N+2)=X1(N+2)+BETA\*XK1(N+2)+GAMA\*AK2(N+2)

C

C CALCULO DE K3R

C

ETA=-1./SQRT(2.)

TEG=1.+1./SQRT(2.)

AK3(1)=(XK12(2)-(ALFA\*XK12(1))/(1.+(ALFA-1.)\*XK12(1)))\*  
1DELTA/3.

XK23(1)=X1(1)+ETA\*XK2(1)+TEG\*AK3(1)

DO 500 L3=2,N+1

AK3(L3)=(XK12(L3+1)-(1.+ALFA/(1.+(ALFA-1.)\*XK12(L3))))\*

1XK12(L3)+(ALFA\*XK12(L3-1))/(1.+(ALFA-1.)\*XK12(L3-1))\*  
1DELTA

500 XK23(L3)=X1(L3)+ETA\*XK2(L3)+TEG\*AK3(L3)

XK3(N+2)=(-XK12(N+2)+(ALFA\*XK12(N+1))/(1.+(ALFA-1.)\*

1XK12(N+1)))\*DELTA/3.

XK23(N+2)=X1(N+2)+ETA\*XK2(N+2)+TEG\*AK3(N+2)

C

```

C
C   CALCULO DE K4R Y K NUEVA
C
      AK4(1)=( AK23(1)-(ALFA*AK23(1))/(1.+(ALFA-1.)*AK23(1)))*
1DELTA/3.
      K1(1)=K1(1)+(AK1(1)+AK4(1))/6.+GAMA*AK2(1)/3.+TEC*AK3(1)/3.
      DO 600 L4=2,N+1
      AK4(L4)=(AK23(L4+1)-(1.+ALFA/(1.+(ALFA-1.)*AK23(L4))))*
1AK23(L4)+(ALFA*AK23(L4-1))/(1.+(ALFA-1.)*AK23(L4-1))*
1DELTA
600  K1(L4)=K1(L4)+(AK1(L4)+AK4(L4))/6.+GAMA*AK2(L4)/3.+
1TEC*AK3(L4)/3.
      AK4(N+2)=(-AK23(N+2)+(ALFA*AK23(N+2))/(1.+(ALFA-1.)*
1AK23(N+1)))*DELTA/3.
      K1(N+2)=K1(N+2)+(AK1(N+2)+AK4(N+2))/6.+GAMA*AK2(N+2)/3.+
1TEC*AK3(N+2)/3.
      KP=K1(N+2)
      IF(TI.LT.T) GO TO 800
      PRINT*,T,KP
700 CONTINUE
10 CONTINUE
20 CONTINUE
      STOP
      END

```

```

C      EVALUACION DE TIEMPOS DE MARQUE EN UNA COLUMNA DE
C      DESTILACION SIMPLI POR MEDIO DEL METODO DE RUNGE -
C      KURT -GILL PARA EL SISTEMA LINEAL
C
      DIMENSION U1(120),UK1(120),UK12(120),UK-3(120),
      LAK1(120), AK2(120),UK3(120), JK(120)
      READ/,ALFA,DELTA
      DO 20 N=9,49,10
      PRINT*/,N,ALFA,DELTA
      U1(1)=1.
      M=N+2
      DO 200 J=2,M
200  U1(J)=U1(1)
      T=0.0
      TI=0.0
      DO 700 T=10,100,10
800  TI=TI+DELTA
C
C      CALCULO DE K1R
C
      AK1(1)=(U1(2)-(ALFA*U1(1)))*DELTA/3.
      UK1(1)=U1(1)+AK1(1)/2.
      DO 300 L1=2,N+1
      AK1(L1)=(U1(L1+1)-(1.+ALFA)*U1(L1)+(ALFA*U1(L1-1)))*DELTA
300  UK1(L1)=U1(L1)+AK1(L1)/2.
      AK1(N+2)=(-U1(N+2)+(ALFA*U1(N+1)))*DELTA/3.
      UK1(N+2)=U1(N+2)+AK1(N+2)/2.
C
C      CALCULO DE K2R
C

```

```

C
      DELTA=1./SQRT(2.)+.5
      GAMMA=1.-1./SQRT(2.)
      AK2(1)=(UK1(2)-(ALFA*UK1(1)))*DELTA/3.
      UK12(1)=U1(1)+BETA*AK1(1)+GAM*AK2(1)
      DO 400 L2=2,N+1
      AK2(L2)=(UK1(L2+1)-(1.+ALFA)*UK1(L2)+ALFA*UK1(L2-1))*DELTA/3.
400  UK12(L2)=U1(L2)+BETA*AK1(L2)+GAM*AK2(L2)
      AK2(N+2)=(-UK1(N+2)+ALFA*UK1(N+1))*DELTA/3.
      UK12(N+2)=U1(N+2)+BETA*AK1(N+2)+GAM*AK2(N+2)

```

C

C CALCULO DE K3R

C

```

      BETA=-1./SQRT(2.)
      TEB3=1.+1./SQRT(2.)
      AK3(1)=(UK12(2)-ALFA*UK12(1))*DELTA/3.
      UK23(1)=U1(1)+BETA*AK2(1)+TEB3*AK3(1)
      DO 500 L3=2,N+1
      AK3(L3)=(UK12(L3+1)-(1.+ALFA)*UK12(L3)+ALFA*UK12(L3-1))*
1DELTA
500  UK23(L3)=U1(L3)+BETA*AK2(L3)+TEB3*AK3(L3)
      AK3(N+2)=(-UK12(N+2)+ALFA*UK12(N+1))*DELTA/3.
      UK23(N+2)=U1(N+2)+BETA*AK2(N+2)+TEB3*AK3(N+2)

```

C

C CALCULO DE K4R Y U NUEVA

C

```

      AK4(1)=(UK23(2)-ALFA*UK23(1))*DELTA/3.
      U1(1)=U1(1)+(AK1(1)+AK4(1))/6.+GAM*AK2(1)/3.+
1TEB3*AK3(1)/3.
      DO 600 L4=2,N+1

```

```

      AK4(L4)=(UKZ3(L4+1)-(1.+ALFA)*UKZ3(L4)+ALFA*UKZ3(L4-1))*
      DELTA
600 U1(L4)=U1(L4)+(AK1(L4)+AK4(L4))/5.+GAMA*AK2(L4)/3.+
      LFEQ*AK3(L4)/3.
      AK4(N+2)=(-UKZ3(N+2)+ALFA*UKZ3(N+1))*DELTA/3.
      U1(N+2)=U1(N+2)+(AK1(N+2)+AK4(N+2))/5.+GAMA*AK2(N+2)/3.+
      LFEQ*AK3(N+2)/3.
      UF=U1(N+2)
      IF(TI.LT.T) GO TO 800
      PRINT*/,T,UF
700 CONTINUE
20 CONTINUE
      STOP
      END

```

Tabla 2.8 Resultados de  $K_{n+1}$  ( $K_{in}=0.3$ ) obtenidos para diferentes  $N$  en el arranque, donde se observa que para  $N > 39$  se da aproximadamente el mismo resultado que para  $N=39$ .

$\alpha=1.00001$				
T	N=9	N=29	N=39	N=49
10	0.3000041	0.3000041	0.3000041	0.3000041
50	0.3000095	0.3000125	0.3000125	0.3000125
100	0.3000104	0.3000188	0.3000191	0.3000191
$\alpha=1.001$				
10	0.3004106	0.3004130	0.3004130	0.3004130
50	0.3009439	0.3012475	0.3012484	0.3012484
100	0.3010399	0.3013855	0.3013842	0.30139172
$\alpha=1.1$				
10	0.3404655	0.3407704	0.3407704	0.3407704
50	0.3933197	0.4276631	0.4275139	0.4278222
100	0.4014641	0.4953218	0.4997509	0.5003252
$\alpha=1.5$				
10	0.4851574	0.4374515	0.4374516	0.4374516
50	0.6702773	0.3331276	0.3345190	0.3345633
100	0.6733050	0.9466202	0.9622334	0.9646590

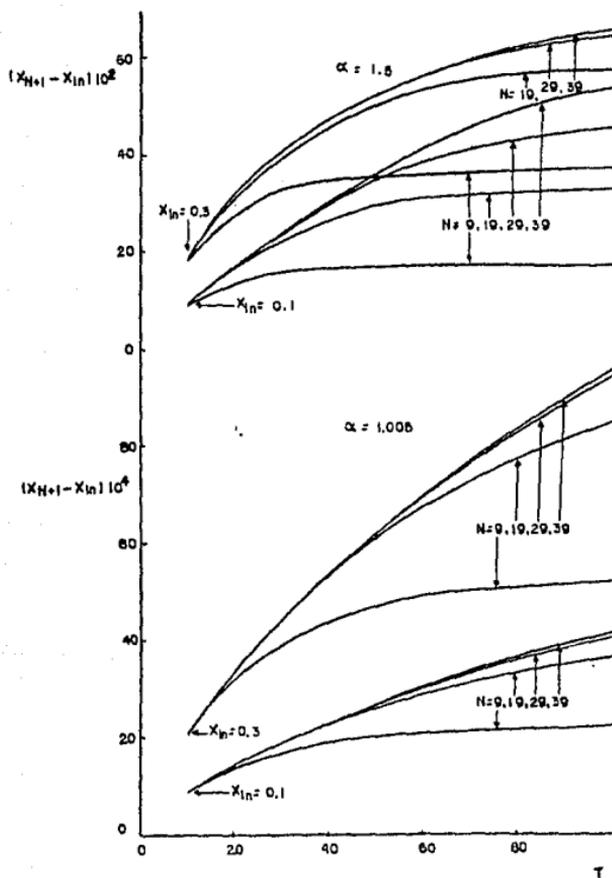


Fig. 4. Tiempos de arranque para diferentes condiciones.

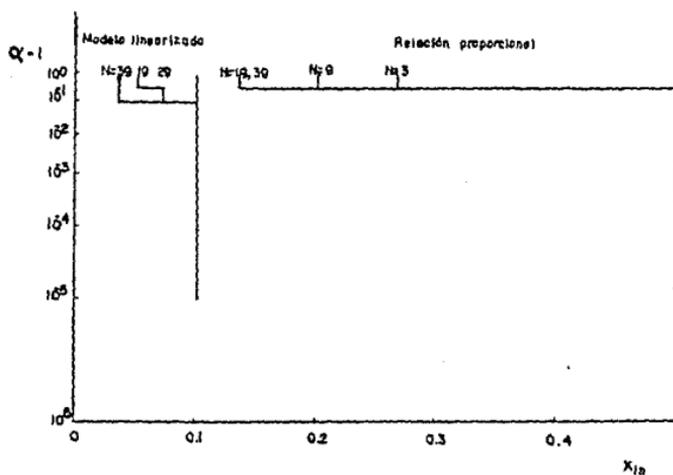


Fig. 5. Regiones de validez de la relación de proporcionalidad y del modelo linealizado, abajo y a la izquierda de las líneas.

A partir del análisis de la información proporcionada por la solución del sistema no lineal (Tabla 2.8 y Figura 4) se observa que el sistema sigue un comportamiento proporcional de acuerdo a la siguiente relación:

$$(X_{N+2} - X_{in}) / (X_{N+2} - X_{in})' = (\alpha - 1) / (\alpha - 1)' \quad (2.45)$$

donde: ' = indica condición de referencia, que corresponde a una solución conocida dentro de la región de comportamiento lineal, esto es, dada una solución para un caso particular se puede determinar la de cualquier otra situación.

Este comportamiento es lineal y no es válido en general. Errores relativos menores que 10% se obtienen para  $\alpha < 1.1$  y  $\alpha_{in} < 0.5$ . La región de validez se ilustra en la figura 5. Los resultados de la figura 4 pueden ser usados para predecir soluciones a otros valores de  $\alpha$ . En la tabla 2.9 se dan los errores de predicción para diferentes situaciones.

Tabla 2.9. Errores relativos porcentuales de predicción de la relación de proporcionalidad ( $\alpha_{in} = 0.5$  y  $T=100$ ).

$\alpha$	N=3	N=9	N=19	N=39
1.005	0.246	0.254	0.260	0.262
1.05	2.556	2.952	3.456	3.593
1.1	5.233	6.766	8.334	9.712
1.5	29.999	61.470	112.100	126.320

Además del comportamiento proporcional, se observa que para  $N$  mayor que 39, el tiempo de arranque es igual que para  $N=39$ . En la figura 4 se dan las curvas correspondientes para  $N$  mayor que 39, confundándose con la de 39. En la tabla 2.5 se observa que los resultados obtenidos para  $N=49$  son prácticamente los mismos que para  $N=39$ .

Como era de esperarse, el modelo linealizado (ecs. 2.42-2.44) tiene una relación de proporcionalidad semejante a la ecuación 2.45, esta es:

$$(U_{N+2} - 1)/(U_{N+2} - 1)' = (\alpha - 1)/(\alpha - 1)' \quad (2.46)$$

De nuevo, se necesita una solución de referencia para evaluar a otras condiciones. También, se cumple que la solución para  $N=39$  es la misma que para  $N$  mayor que 39. Errores menores que 10% se obtienen para  $\alpha < 1.5$  y  $K_{in} < 0.1$ , lo que se ilustra mejor en la figura 5 y en la tabla 2.10.

Tabla 2.10. Errores relativos porcentuales de predicción del modelo linealizado para el arranque ( $K_{in}=0.5$  y  $F=100$ ).

$\alpha$	$N=3$	$N=9$	$N=19$	$N=39$
1.005	100.3	101.1	102.6	103.5
1.05	102.5	110.9	117.1	123.7
1.1	104.5	119.7	125.7	135.1
1.5	109.0	150.6	199.5	275.2

### 2.6 Interpretación de resultados.

Como ya se había establecido previamente, la simplificación de términos en diferencias por diferenciales origina una solución para el caso  $P=q$  en la que no se predice variación en la composición inicial, por lo que su uso proporciona resultados muy alejados de los que se obtienen mediante la solución numérica del modelo no lineal.

Mediante el planteamiento vectorial (ec. 2.34) se obtiene una solución sencilla y compacta (ec. 2.35), cuya dificultad adicional consiste en la evaluación de los valores propios de la matriz  $\bar{V}$ . En las tablas 2.11-2.20 se observa que los resultados obtenidos por este método son prácticamente los mismos que los que se obtienen mediante la solución numérica del modelo lineal, por lo que los rangos de validez son los mismos.

En las tablas 2.11-2.20 y figuras 6-15 correspondientes, se tomó como solución de referencia la obtenida a  $\alpha=1.0001$ , para cálculo de otras condiciones con la relación de proporcionalidad (ec. 2.45). La región de validez es más amplia que la del modelo lineal, según se puede apreciar en la figura 5.

De la comparación de los resultados del sistema no lineal para diferentes valores de  $K_{in}$ , se aprecia también una relación por este efecto para volatilidades cercanas a la unidad. Por lo tanto, la ecuación 2.45 puede ser extendida a la siguiente:

$$(U_{N+2}-1) = ((\alpha-1)/(\alpha-1))' (U_{N+2}-1)' - (\alpha-1)(K_{in}/K'_{in}-1) \quad (2.47)$$

donde:  $(U_{N+2}-1)'$  = Solución de referencia obtenida a  
 $(\alpha-1)'$  y  $K_{in}'=0.05$ .

De esta manera, basta con que se calcule numéricamente mediante el modelo no lineal una solución de referencia a  $(\alpha-1)'$  y  $K_{in}'=0.05$  para diferentes valores de T, y se pueda generar la solución para otras condiciones de  $\alpha$  y  $K_{in}$ . Para el caso particular de interés con  $(\alpha-1)'$ =0.0001, la ecuación 2.47 queda como sigue:

$$(U_{N+2}-1)=10000(\alpha-1)(U_{N+2}-1)'-(\alpha-1)(20K_{in}-1) \quad (2.48)$$

Para el modelo lineal no se toma en cuenta el efecto de la concentración inicial (ec. 2.46).

En las tablas 2.11-2.20 y figuras 6-15 se utilizan las siguientes abreviaciones:

- DIF = Solución del modelo lineal aproximando términos en diferencias por diferenciales.
- ML = Solución analítica del modelo lineal.
- MNL = Solución numérica del modelo no lineal.
- PV = Solución del modelo lineal por planteamiento vectorial.
- RF = Solución de la relación de proporcionalidad.

Tabla 2.11. Resultados obtenidos con los diferentes métodos para  $U_{i+2}$  a  $\alpha=1.0001$  y  $N=3$ .

T	DIF	ML	ML	ML	ML	ML
			$K_{in}=0.05$	$K_{in}=0.1$	$K_{in}=0.3$	$K_{in}=0.5$
10	1.0	1.0001569	1.0001491	1.0001412	1.0001093	1.0000785
20	1.0	1.0001906	1.0001311	1.0001716	1.0001335	1.0000953
30	1.0	1.0001979	1.0001331	1.0001782	1.0001386	1.0000990
40	1.0	1.0001995	1.0001396	1.0001795	1.0001397	1.0000998
50	1.0	1.0001999	1.0001399	1.0001799	1.0001399	1.0000999
60	1.0	"	1.0001900	1.0001800	1.0001400	1.0001000
70	"	"	"	"	"	"
80	"	"	"	"	"	"
90	"	"	"	"	"	"
100	"	"	"	"	"	"

T	PV	RP	RP	RP	RP
		$K_{in}=0.05$	$K_{in}=0.1$	$K_{in}=0.3$	$K_{in}=0.5$
10		1.0001569	1.0001491	1.0001412	1.0001093
20		1.0001906	1.0001311	1.0001716	1.0001335
30		1.0001979	1.0001331	1.0001782	1.0001386
40		1.0001995	1.0001396	1.0001795	1.0001397
50		1.0001999	1.0001399	1.0001799	1.0001399
60		"	1.0001900	1.0001800	1.0001400
70		"	"	"	"
80		"	"	"	"
90		"	"	"	"
100		"	"	"	"

Tabla 2.12. Resultados obtenidos con los diferentes métodos para  $U_{N+2}$  a  $\alpha=1.031$  y  $N=5$ .

T	DIF	ML	ML	ML	ML	ML
			$K_{in}=0.05$	$K_{in}=0.1$	$K_{in}=0.3$	$K_{in}=0.5$
10	1.0	1.0015692	1.0014907	1.0014122	1.0010932	1.0007343
20	"	1.0019063	1.0013110	1.0017150	1.0013342	1.0009523
30	"	1.0019793	1.0013303	1.0017413	1.0013353	1.0009894
40	"	1.0019951	1.0018954	1.0017956	1.0013964	1.0009973
50	"	1.0019936	1.0018946	1.0017986	1.0013933	1.0009990
60	"	1.0019993	1.0018993	1.0017993	1.0013993	1.0009994
70	"	1.0019995	1.0018995	1.0017995	1.0013994	1.0009995
80	"	"	"	"	"	"
90	"	"	"	"	"	"
100	"	"	"	"	"	"

T	PV	RP	RP	RP	RP
		$K_{in}=0.05$	$K_{in}=0.1$	$K_{in}=0.3$	$K_{in}=0.5$
10		1.0015597	1.0014910	1.0014120	1.001093
20		1.0019067	1.001311	1.001732	1.001335
30		1.0019793	1.001331	1.001732	1.001335
40		1.0019956	1.001896	1.001796	1.001397
50		1.0019990	1.001899	1.001799	1.001399
60		1.0019997	1.001900	1.001800	1.001400
70		"	"	"	"
80		"	"	"	"
90		"	"	"	"
100		"	"	"	"

Tabla 2.13. Resultados obtenidos con los diferentes métodos para  $U_{N+2}$  a  $\alpha=1.005$  y  $N=3$ .

T	DIF	ML	MSL	MNL	MNL	MNL	MSL
			$K_{in}=0.05$	$K_{in}=0.1$	$K_{in}=0.3$	$K_{in}=0.5$	
10	1.0	1.0078453	1.0074513	1.0070575	1.0054340	1.0039134	
20	"	1.0095257	1.0090443	1.0085703	1.0066610	1.0047546	
30	"	1.0093937	1.0093929	1.0088972	1.0069156	1.0049370	
40	"	1.0099671	1.0094574	1.0089679	1.0069710	1.0049764	
50	"	1.0099840	1.0094335	1.0089332	1.0069330	1.0049850	
60	"	1.0099377	1.0094370	1.0089805	1.0069353	1.0049363	
70	"	1.0099334	1.0094373	1.0089872	1.0069360	1.0049372	
80	"	1.0099336	1.0094379	1.0089373	1.0069360	1.0049374	
90	"	"	"	"	"	"	
100	"	"	"	"	"	"	

T	PV	RP	RP	RP	RP
		$K_{in}=0.05$	$K_{in}=0.1$	$K_{in}=0.3$	$K_{in}=0.5$
10		1.0073465	1.007455	1.00706	1.00549
20		1.0095270	1.009055	1.00853	1.006675
30		1.0093900	1.009405	1.00891	1.006930
40		1.0099634	1.009443	1.00893	1.006985
50		1.0099353	1.009495	1.008995	1.006995
60		1.0099339	1.009500	1.009000	1.007000
70		1.0099397	"	"	"
80		1.0099399	"	"	"
90		"	"	"	"
100		"	"	"	"

Tabla 2.14. Resultados obtenidos con los diferentes métodos para  $U_{N+2}$  a  $\alpha=1.05$  y  $N=3$ .

T	DIF	ML	MLL	MLL	MLL	MLL
			$K_{in}=0.05$	$K_{in}=0.1$	$K_{in}=0.3$	$K_{in}=0.5$
10	1.0	1.0782569	1.074132	1.070126	1.0640623	1.0582632
20	"	1.0944337	1.093636	1.094760	1.0955103	1.0964530
30	"	1.0973342	1.092326	1.097429	1.0979500	1.0982606
40	"	1.0935352	1.093493	1.093473	1.0934596	1.0948542
50	"	1.0936909	1.093633	1.093603	1.0935006	1.0948264
60	"	1.0937112	1.093653	1.093636	1.0936040	1.0947464
70	"	1.0937176	1.093674	1.093642	1.0936133	1.0949704
80	"	1.0937189	1.093676	1.093643	1.0936103	1.09437512
90	"	1.0937191	"	"	"	"
100	"	"	"	"	"	"

T	PV	RP	RP	RP	RP
		$K_{in}=0.05$	$K_{in}=0.1$	$K_{in}=0.3$	$K_{in}=0.5$
10		1.0732577	1.07455	1.0706	1.0549
20		1.0944644	1.09055	1.09358	1.09675
30		1.0973349	1.09405	1.09691	1.09930
40		1.0935359	1.09430	1.09693	1.09935
50		1.0936317	1.09495	1.09995	1.09995
60		1.0937120	1.09500	1.09000	1.07000
70		1.0937133	"	"	"
80		1.0937196	"	"	"
90		1.0937199	"	"	"
100		"	"	"	"

ESTA TESIS NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA

Tabla 2.15. Resultados obtenidos con los diferentes métodos para  $U_{n+c}$  a  $\alpha=1.5$  y  $N=3$ .

T	DIF	ML	MNL	MNL	MNL	MNL
			$K_{in}=0.05$	$K_{in}=0.1$	$K_{in}=0.3$	$K_{in}=0.5$
10	1.0	1.7079289	1.657324	1.627248	1.464273	1.309368
20	"	1.7397093	1.757856	1.710341	1.542602	1.370402
30	"	1.7933493	1.760716	1.721428	1.554939	1.331956
40	"	1.7993714	1.761334	1.722751	1.556927	1.334118
50	"	1.7999356	1.762022	1.722917	1.557229	1.334522
60	"	1.7999933	1.762033	1.722933	1.557277	1.334593
70	"	1.7999998	1.762040	1.722941	1.557284	1.334612
80	"	1.7999999	"	"	"	"
90	"	"	"	"	"	"
100	"	"	"	"	"	"

T	FV	RP	RP	RP	RP
		$K_{in}=0.05$	$K_{in}=0.1$	$K_{in}=0.3$	$K_{in}=0.5$
10	1.7079290	1.7455	1.706	1.549	1.3925
20	1.7397093	1.9055	1.858	1.6675	1.4765
30	1.7933493	1.9405	1.891	1.6930	1.4950
40	1.7993714	1.9448	1.898	1.6935	1.4990
50	1.7999356	1.9495	1.8935	1.6995	1.4995
60	1.7999933	1.9500	1.9000	1.7000	1.5000
70	1.7999998	"	"	"	"
80	1.7999999	"	"	"	"
90	"	"	"	"	"
100	1.8000000	"	"	"	"

Tabla 2.16. resultados obtenidos con los diferentes métodos para  $U_{n+1}$  a  $\alpha=1.0001$  y  $N=9$ .

T	DIF	ML	ML	ML	ML	ML
			$X_{in}=0.05$	$X_{in}=0.1$	$X_{in}=0.3$	$X_{in}=0.5$
10	1.0	1.0001955	1.0001353	1.0001760	1.0001369	1.0000973
20	"	1.0003080	1.0002927	1.0002773	1.0002156	1.0001540
30	"	1.0003739	1.0003600	1.0003411	1.0002653	1.0001395
40	"	1.0004237	1.0004025	1.0003313	1.0002966	1.0002113
50	"	1.0004513	1.0004293	1.0004067	1.0003163	1.0002259
60	"	1.0004696	1.0004462	1.0004227	1.0003233	1.0002343
70	"	1.0004808	1.0004553	1.0004563	1.0003366	1.0002404
80	"	1.0004379	1.0004636	1.0004392	1.0003416	1.0002440
90	"	1.0004924	1.0004573	1.0004432	1.0003447	1.0002462
100	"	1.0004952	1.0004705	1.0004457	1.0003466	1.0002476

T	PV	RP	RP	RP	RP	
		$X_{in}=0.05$	$X_{in}=0.1$	$X_{in}=0.3$	$X_{in}=0.5$	
10		1.0001955	1.0001353	1.0001760	1.0001369	1.0000973
20		1.0003080	1.0002927	1.0002773	1.0002156	1.0001540
30		1.0003739	1.0003600	1.0003411	1.0002653	1.0001395
40		1.0004237	1.0004025	1.0003313	1.0002966	1.0002113
50		1.0004519	1.0004293	1.0004067	1.0003163	1.0002259
60		1.0004696	1.0004462	1.0004227	1.0003233	1.0002343
70		1.0004808	1.0004553	1.0004563	1.0003366	1.0002404
80		1.0004379	1.0004636	1.0004392	1.0003416	1.0002440
90		1.0004924	1.0004673	1.0004432	1.0003447	1.0002462
100		1.0004952	1.0004705	1.0004457	1.0003466	1.0002476

Tabla 2.17. Resultados obtenidos con los diferentes métodos para  $U_{N+2}$  a  $\alpha=1.001$  y  $N=9$ .

T	DIF	ML	MNL	MNL	MNL	MNL
			$K_{in}=0.05$	$K_{in}=0.1$	$K_{in}=0.3$	$K_{in}=0.5$
10	1.0	1.0019561	1.0019582	1.0017602	1.0013655	1.0009770
20	"	1.0030325	1.0029231	1.0027737	1.0021563	1.0015194
30	"	1.0037922	1.0036022	1.0034122	1.0026527	1.0018938
40	"	1.0042396	1.0040272	1.0038148	1.0029656	1.0021172
50	"	1.0045217	1.0042951	1.0040636	1.0031630	1.0022582
60	"	1.0046995	1.0044641	1.0042286	1.0032374	1.0023470
70	"	1.0048116	1.0045706	1.0043395	1.0033657	1.0024030
80	"	1.0048826	1.0046380	1.0043934	1.0034153	1.0024384
90	"	1.0049271	1.0046802	1.0044334	1.0034463	1.0024606
100	"	1.0049551	1.0047069	1.0044585	1.0034660	1.0024745

T	PV	RP	RP	RP	RP
		$K_{in}=0.05$	$K_{in}=0.1$	$K_{in}=0.3$	$K_{in}=0.5$
10		1.0019561	1.001353	1.001760	1.001369
20		1.0030325	1.002927	1.002773	1.002156
30		1.0037922	1.003600	1.003411	1.002652
40		1.0042396	1.004025	1.003813	1.002966
50		1.0045217	1.004293	1.004067	1.003163
60		1.0046995	1.004462	1.004227	1.003293
70		1.0048117	1.004564	1.004323	1.003366
80		1.0048323	1.004536	1.004392	1.003416
90		1.0049269	1.004573	1.004432	1.003447
100		1.0049550	1.004705	1.004457	1.003466

Tabla 2.13. Resultados obtenidos con los diferentes métodos para  $U_{N+2}$  a  $\alpha=1.005$  y  $N=9$ .

T	DIF	ML	MNL			
			$K_{in}=0.05$	$K_{in}=0.1$	$K_{in}=0.3$	$K_{in}=0.5$
10	1.0	1.0097979	1.009302	1.008309	1.006339	1.004375
20	"	1.0154517	1.01467	1.013391	1.010779	1.007682
30	"	1.0190126	1.01805	1.017091	1.013261	1.009450
40	"	1.0212557	1.02018	1.019107	1.014326	1.010565
50	"	1.0226636	1.021524	1.020373	1.015312	1.011263
60	1.0	1.0235535	1.022366	1.021173	1.016434	1.011711
70	"	1.0241190	1.022900	1.021652	1.016325	1.011991
80	"	1.0244734	1.023236	1.022001	1.017073	1.012168
90	"	1.0246952	1.023446	1.022201	1.017229	1.012273
100	"	1.0248350	1.023530	1.022326	1.017326	1.012343

T	PV	RP				
		$K_{in}=0.05$	$K_{in}=0.1$	$K_{in}=0.3$	$K_{in}=0.5$	
10		1.0097979	1.00929	1.008300	1.0063425	1.004390
20		1.0154517	1.014635	1.013365	1.0107800	1.007700
30		1.0190126	1.018000	1.017055	1.013265	1.009475
40		1.0212557	1.020125	1.019065	1.014330	1.010590
50		1.0226636	1.021405	1.020335	1.015315	1.011295
60		1.0235535	1.022310	1.021135	1.016440	1.011740
70		1.0241190	1.022840	1.021640	1.016330	1.012020
80		1.0244720	1.023130	1.021960	1.017080	1.012200
90		1.0246944	1.023390	1.022160	1.017235	1.012310
100		1.0248344	1.023525	1.022235	1.017330	1.012330

Tabla 2.19. Resultados obtenidos con los diferentes métodos  
para  $U_{1+2}$  a  $\alpha=1.05$  y  $N=9$ .

T	DF	Métodos				
		ML	RML	RMML	RMML	
		$K_{in}=0.05$	$K_{in}=0.1$	$K_{in}=0.3$	$K_{in}=0.5$	
10	1.0	1.0993615	1.094424	1.0390375	1.0379736	1.0476646
20	"	1.1535975	1.149344	1.1411329	1.1074165	1.0750462
30	"	1.1952326	1.134192	1.1733109	1.1321653	1.0922565
40	"	1.2180675	1.205042	1.1941345	1.1476603	1.1030773
50	"	1.2322013	1.213432	1.2067791	1.1573530	1.1093793
60	"	1.2409567	1.227746	1.2146433	1.1634143	1.1141530
70	"	1.2464024	1.232910	1.2195350	1.1672042	1.1163380
80	"	1.2497354	1.236130	1.2225336	1.1695350	1.1135314
90	"	1.2513713	1.233113	1.2244756	1.1710500	1.1195334
100	"	1.2531650	1.239352	1.2255491	1.1719343	1.1202524

T	PV	Métodos				
		RP	RP	RP	RP	
		$K_{in}=0.05$	$K_{in}=0.1$	$K_{in}=0.3$	$K_{in}=0.5$	
10		1.0993615	1.09290	1.03300	1.033425	1.04390
20		1.1535975	1.14635	1.13165	1.107300	1.07700
30		1.1952326	1.13000	1.17055	1.132650	1.09475
40		1.2180675	1.20125	1.19065	1.143300	1.10590
50		1.2322013	1.21465	1.20335	1.153150	1.11295
60		1.2409567	1.22310	1.21135	1.164400	1.11740
70		1.2464024	1.22340	1.21640	1.163300	1.12020
80		1.2497733	1.23130	1.21960	1.170300	1.12200
90		1.2513637	1.23390	1.22160	1.172350	1.12310
100		1.2531600	1.25525	1.22235	1.173300	1.12320

Tabla 2.20. Resultados obtenidos con los diferentes métodos para  $U_{n+2}$  a  $\alpha=1.5$  y  $N=9$ .

T	DIF	ML	BNL	ENL	MNL	SNL
			$K_{in}=0.05$	$K_{in}=0.1$	$K_{in}=0.3$	$K_{in}=0.5$
10	1.0	2.1163363	2.022244	1.931633	1.6171910	1.3773326
20	"	2.6647910	2.544496	2.422442	1.9516396	1.5672572
30	"	2.4765363	2.757762	2.633734	2.1204223	1.6675734
40	"	2.9547663	2.839475	2.713079	2.1990316	1.7135372
50	"	2.9334313	2.870290	2.750379	2.2342573	1.7437222
60	"	2.9939319	2.881356	2.763531	2.2496653	1.7559632
70	"	2.9977776	2.886192	2.763395	2.2503490	1.7613592
80	"	2.9991901	2.887320	2.770269	2.2592443	1.7646952
90	"	2.9997034	2.888424	2.770933	2.2604333	1.7660412
100	"	2.9993913	2.888652	2.771257	2.2610166	1.7666352

T	PV	MP	MP	MP	MP
		$K_{in}=0.05$	$K_{in}=0.1$	$K_{in}=0.3$	$K_{in}=0.5$
10	2.1163363	1.9290	1.8300	1.63425	1.4390
20	2.6647910	2.4636	2.3355	2.07307	1.7700
30	2.8765338	2.8000	2.7065	2.3265	1.9475
40	2.9547663	3.0125	2.9065	2.4330	2.0590
50	2.9334313	3.1465	3.0235	2.5315	2.1295
60	2.9939319	3.2310	3.1135	2.6440	2.1740
70	2.9977776	3.2340	3.1640	2.6830	2.2020
80	2.9991360	3.3130	3.1960	2.7030	2.2200
90	2.9997019	3.3390	3.2160	2.7235	2.2310
100	2.9998903	3.5525	3.2235	2.7330	2.2330

## CAPITULO 3

## ESTADO ESTACIONARIO PERTURBADO

## 3.1 Modelo simplificado.

A partir del sistema de ecuaciones (1.4)-(1.9) y substituyendo las siguientes variables adimensionales:  $T = Ft/H$ ,  $\alpha = L/F$ ,  $v = V/F$ ,  $P = H_c/H$ ,  $Q = H_v/H$ , se tiene:

Condensador:

$$FdX_{N+2}/dT = v\alpha X_{N+1}/(1+(\alpha-1)X_{N+1}) - vX_{N+2} = f_{N+2} \quad (3.1)$$

Sección de enriquecimiento:

$$dX_n/dT = v\alpha X_{n-1}/(1+(\alpha-1)X_{n-1}) - v\alpha X_n/(1+(\alpha-1)X_n) + \ell X_{n+1} - \ell X_n = f_n; n=f+1, f+2, \dots, N \quad (3.2)$$

Alimentación:

$$dX_f/dT = v\alpha X_{f-1}/(1+(\alpha-1)X_{f-1}) - v\alpha X_f/(1+(\alpha-1)X_f) + \ell X_{f+1} - (\ell+1)X_f + X_p = f_f \quad (3.3)$$

Sección de agotamiento:

$$dX_m/dT = v\alpha X_{m-1}/(1+(\alpha-1)X_{m-1}) - v\alpha X_m/(1+(\alpha-1)X_m) + (\ell+1)X_{m+1} - (\ell+1)X_m = f_m; m=1, 2, \dots, f-1 \quad (3.4)$$

Rehervidor:

$$QdX_1/dT = -v\alpha X_1/(1+(\alpha-1)X_1) + (\ell+1)X_2 - (\ell-v+1)X_1 = f_1 \quad (3.5)$$

Condición inicial:  $X_n = X_n^S = \text{conc. de edo. est.}; T=0$

### 3.2 Obtención de un modelo analítico.

Linearizando el sistema de ecuaciones (1.1)-(1.5) por medio de una expansión en potencias de  $\lambda$  por alrededor o en la vecindad del estado estacionario y tomando los términos lineales, resulta:

Condensador:

$$\begin{aligned} Pd\dot{X}_{N+2}/dt = & (\partial f_{N+2}/\partial X_{N+2})_s (X_{N+2} - X_{N+2}^s) + (\partial f_{N+2}/\partial X_{N+1})_s \\ & (X_{N+1} - X_{N+1}^s) + (\partial f_{N+2}/\partial \lambda)_s (\lambda - \lambda^s) \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$\text{donde: } (\partial f_{N+2}/\partial X_{N+2})_s = -v$$

$$(\partial f_{N+2}/\partial X_{N+1})_s = v\alpha / (1 + (\alpha - 1)X_{N+1}^s)^2$$

$$(\partial f_{N+2}/\partial \lambda)_s = 0$$

Sección de enriquecimiento:

$$\begin{aligned} d\dot{X}_n/dt = & (\partial f_n/\partial X_{n+1})_s (X_{n+1} - X_{n+1}^s) + (\partial f_n/\partial X_n)_s (X_n - X_n^s) + \\ & (\partial f_n/\partial X_{n-1})_s (X_{n-1} - X_{n-1}^s) + (\partial f_n/\partial \lambda)_s (\lambda - \lambda^s) \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\text{donde: } (\partial f_n/\partial X_{n+1})_s = f$$

$$(\partial f_n/\partial X_n)_s = -(\rho + v\alpha / (1 + (\alpha - 1)X_n^s)^2)$$

$$(\partial f_n/\partial X_{n-1})_s = v\alpha / (1 + (\alpha - 1)X_{n-1}^s)^2$$

$$(\partial f_n / \partial \lambda)_S = X_{n+1}^S - X_n^S$$

Alimentación:

$$\begin{aligned} dX_f^S / dT = & (\partial f_f / \partial X_{f+1})_S (X_{f+1}^S - X_{f+1}^B) + (\partial f_f / \partial X_f)_S (X_f - X_f^B) + \\ & (\partial f_f / \partial X_{f-1})_S (X_{f-1}^S - X_{f-1}^B) + (\partial f_f / \partial X_f)_S (X_f - X_f^B) + \\ & (\partial f_f / \partial \lambda)_S (\lambda - \lambda^B) \end{aligned} \quad (3.3)$$

donde:  $(\partial f_f / \partial X_{f+1})_S = \lambda$

$$(\partial f_f / \partial X_f)_S = -(\lambda + 1 + v\alpha / (1 + (\alpha - 1)X_f^B)^2)$$

$$(\partial f_f / \partial X_{f-1})_S = v\alpha / (1 + (\alpha - 1)X_{f-1}^B)^2$$

$$(\partial f_f / \partial X_f)_S = X_f^S - X_f^B$$

$$(\partial f_f / \partial \lambda)_S = X_{f+1}^S - X_f^B$$

Sección de agotamiento:

$$\begin{aligned} dX_m^S / dT = & (\partial f_m / \partial X_{m+1})_S (X_{m+1}^S - X_{m+1}^B) + (\partial f_m / \partial X_m)_S (X_m - X_m^B) + \\ & (\partial f_m / \partial X_{m-1})_S (X_{m-1}^S - X_{m-1}^B) + (\partial f_m / \partial \lambda)_S (\lambda - \lambda^B) \end{aligned} \quad (3.9)$$

donde:  $(\partial f_m / \partial X_{m+1})_S = \lambda + 1$

$$(\partial f_m / \partial X_m)_S = -(\lambda + 1 + v\alpha / (1 + (\alpha - 1)X_m^B)^2)$$

$$(\partial f_m / \partial X_{m-1})_S = v\alpha / (1 + (\alpha - 1)X_{m-1}^B)^2$$

$$(\partial f_m / \partial Q)_s = X_{m+1}^s - X_m^s$$

Rehervidor:

$$\begin{aligned} QdX_1/dT = (\partial f_1 / \partial X_2)_s (X_2 - X_2^s) + (\partial f_1 / \partial X_1)_s (X_1 - X_1^s) + \\ (\partial f_1 / \partial \lambda)_s (\lambda - \lambda^s) \end{aligned} \quad (3.10)$$

donde:  $(\partial f_1 / \partial X_2)_s = \lambda + 1$

$$(\partial f_1 / \partial X_1)_s = -(\lambda - \nu + 1 + \nu\alpha / (1 + (\alpha - 1)X_1^s)^2)$$

$$(\partial f_1 / \partial Q)_s = X_2^s - X_1^s$$

Condición inicial:  $X_n - X_n^s = 0$ ;  $T=0$

donde:  $s =$  condición de estado estacionario.

Si se sustituyen las expresiones para las derivadas parciales de estado estacionario y se hace que  $(X_n - X_n^s) = U_n$ , se tiene:

Condensador:

$$PdU_{n+2}/dT = -\nu U_{n+2} + \nu\alpha U_{n+1} / (1 + (\alpha - 1)X_{n+1}^s)^2 \quad (3.11)$$

Sección de enriquecimiento:

$$\begin{aligned} dU_n/dT = U_{n+1} - (\lambda + \nu\alpha / (1 + (\alpha - 1)X_n^s)^2)U_n + \nu\alpha U_{n-1} / \\ (1 + (\alpha - 1)X_{n-1}^s)^2 + (X_{n+1}^s - X_n^s)(\lambda - \lambda^s) \end{aligned} \quad (3.12)$$

Alimentación:

$$\begin{aligned} dU_f/dT = U_{f+1} - (\ell+1+v\alpha/(1+(\alpha-1)X_f^S)^2)U_f + v\alpha U_{f-1}/ \\ (1+(\alpha-1)X_{f-1}^S)^2 + U_f + (X_{f+1}^S - X_f^S)(\ell - \ell^B) \end{aligned} \quad (3.13)$$

Sección de agotamiento:

$$\begin{aligned} dU_m/dT = (\ell+1)U_{m+1} - (\ell+1+v\alpha/(1+(\alpha-1)X_m^S)^2)U_m + v\alpha U_{m-1}/ \\ (1+(\alpha-1)X_{m-1}^S)^2 + (X_{m+1}^S - X_m^S)(\ell - \ell^B) \end{aligned} \quad (3.14)$$

Rehervidor:

$$\begin{aligned} QdU_1/dT = (\ell+1)U_2 - (\ell-v+1+v\alpha/(1+(\alpha-1)X_1^S)^2)U_1 + \\ (X_2^S - X_1^S)(\ell - \ell^B) \end{aligned} \quad (3.15)$$

Condición inicial:  $U_n=0$  ;  $T=0$

Al igual que para el arranque, el sistema de ecuaciones (3.11)-(3.15) puede ser tratado en la misma forma. Primero, si se aplica la transformada de Laplace, resulta un sistema de ecuaciones en diferencias finitas. A partir del sistema de ecuaciones (1.4)-(1.9):

Sección de enriquecimiento:

$$\begin{aligned}
 (H/D)dX_n/dt &= (L/D)(X_{n+1}-X_n) + (V/D)(Y_{n-1}-Y_n) \\
 &= R(X_{n+1}-X_n) + (R+1)(Y_{n-1}-Y_n) \quad (3.16)
 \end{aligned}$$

donde: D = destilado.

R = relación de reflujo, L/D.

Dividiendo entre R y sustituyendo la ecuación (1.9):

$$\begin{aligned}
 (H/(DR))dX_n/dt &= X_{n+1} - X_n + (1+1/R)(Y_{n+1}-Y_n) \\
 &= X_{n+1} - 2X_n + X_{n-1} + X_n - X_{n-1} + \\
 &\quad (1+1/R)(\alpha X_{n-1}/(1+(\alpha-1)X_{n-1})) - \\
 &\quad \alpha X_n/(1+(\alpha-1)X_n) \\
 &= X_{n+1} - 2X_n + X_{n-1} + X_n + \\
 &\quad (1-(1+1/R)\alpha/(1+(\alpha-1)X_n)) - \\
 &\quad (1-(1+1/R)\alpha/(1+(\alpha-1)X_{n-1}))X_{n-1} \quad (3.17)
 \end{aligned}$$

Aproximando términos en diferencias por diferenciales  
y si  $(\alpha-1) \approx 0$  :

$$(H/(D.R)) \partial X / \partial t = \partial^2 X / \partial n^2 - ((1+1/R) - R) \partial X / \partial n \quad (3.18)$$

Sección de apotamiento:

$$(H/D) dX_m / dt = (P/D+R)(X_{m+1} - X_m) + (R+1)(Y_{m-1} - Y_m) \quad (3.19)$$

Multiplicando por D y dividiendo entre (P+RD):

$$(H/(P+RD)) dX_m / dt = X_{m+1} - X_m + (R+1)D/(P+RD)(Y_{m-1} - Y_m) \quad (3.20)$$

Sustituyendo la ecuación (1.9) y reorganizando términos:

$$\begin{aligned} (H/(P+RD)) dX_m / dt = & X_{m+1} - 2X_m + X_{m-1} \\ & + (1 - (R+1)D/(P+RD)\alpha / (1 + (\alpha-1)X_m)) X_m \\ & - (1 - (R+1)D/(P+RD)\alpha / (1 + (\alpha-1)X_{m-1})) X_{m-1} \quad (3.21) \end{aligned}$$

Aproximando términos en diferencias finitas por diferenciales  
y si  $(\alpha-1) \approx 0$  :

$$(H/(P+RD)) \partial X / \partial t = \partial^2 X / \partial n^2 - ((R+1)D/(P+RD) - 1) \partial X / \partial n \quad (3.22)$$

Plato de alimentación:

$$(H/D) dX_F / dt = (L/D)(X_{F+1} - X_F) + (V/D)(f_{F-1} - f_F) + (P/D)(X_F - X_F) \quad (3.23)$$

$$(H/D)dX_f/dt = \alpha(X_{f+1} - X_f) + (R+1)(Y_{f-1} - Y_f) + (P/D)(X_f - X_f) \quad (3.24)$$

Dividiendo entre y sustituyendo la ecuación (1.3):

$$\begin{aligned} (H/(DR))dX_f/dt &= X_{f+1} + X_f + (1+1/R)(Y_{f-1} - Y_f) + P/(DR)(X_f - X_f) \\ &= X_{f+1} - 2X_f + X_{f-1} + X_f - X_{f-1} \\ &\quad + (1+1/R)(X_{f-1}/(1+(\alpha-1)K_{f-1}) - X_f/(1+(\alpha-1)K_f)) \\ &\quad + P/(DR)X_f \end{aligned} \quad (3.25)$$

Si  $(\alpha-1) \gg 0$  y aproximando términos en diferencias por diferenciales:

$$H/(DR)\partial X/\partial t = \partial^2 X/\partial n^2 - ((1+1/R) - 1)\partial X/\partial n - P/(DR)(X - X_f) \quad (3.26)$$

De manera semejante para el condensador y el rehervidor:

$$H_c/(D(R+1))\partial X/\partial t = -\partial X/\partial n + (\alpha-1)X \quad ; n=N+2 \quad (3.27)$$

$$H_r/(P+DR)\partial X/\partial t = \partial X/\partial n - D(R+1)/(P+DR)(\alpha-1)X \quad ; n=0 \quad (3.28)$$

A final de cuentas, se establece un sistema de dos ecuaciones diferenciales con las siguientes condiciones:

Sección de enriquecimiento:

$$(H/DR)\partial X/\partial t = \partial^2 X/\partial n^2 - ((1+1/R) - \alpha)\partial X/\partial n \quad (3.13)$$

Condiciones a la frontera:

$$H_c/(D(R+1))\partial X/\partial t = -\partial X/\partial n + (\alpha-1)X \quad ; \quad n=N+2 \quad (3.27)$$

$$(H/(DR))\partial X/\partial t = \partial^2 X/\partial n^2 - ((1+1/R) - 1)\partial X/\partial n - \\ (\beta/(DR))(X-X_p) \quad ; \quad n=f \quad (3.26)$$

Sección de agotamiento:

$$(H/(\beta+RD))\partial X/\partial t = \partial^2 X/\partial n^2 - ((R+1)D/(\beta+RD)-1)\partial X/\partial n \quad (3.22)$$

Condiciones a la frontera:

$$(H/(DR))\partial X/\partial t = \partial^2 X/\partial n^2 - ((1+1/R) - 1)\partial X/\partial n - \\ (\beta/(DR))(X-X_p) \quad ; \quad n=f \quad (3.26)$$

$$H_f/(\beta+RD)\partial X/\partial t = \partial X/\partial n - D(R+1)/(\beta+RD)(\alpha-1)X \quad ; \quad n=1 \quad (3.28)$$

Como se observa, este sistema de ecuaciones diferenciales tiene un grado de complejidad superior al del arranque, por lo que intentar una solución implica efectuar drásticas simplificaciones, lo que originaría una solución muy pobre. La dificultad más grande se encuentra en la condición de frontera representada por la ecuación diferencial de segundo orden (3.25) en el plato de alimentación, que es simultánea - tanto para la zona de enriquecimiento como para la de agotamiento. La solución obtenida para el arranque fue bastante laboriosa, por lo que para este caso se complica tremendamente y no tiene caso hacerlo por los resultados obtenidos anteriormente.

También, el sistema de ecuaciones diferenciales lineales (3.11)-(3.15) puede ser tratado en forma vectorial, dando la siguiente ecuación:

$$d\bar{u}/dt = \bar{A}\bar{u} + \bar{b} \quad (3.29)$$

donde:

$$\bar{u} = \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ U_f \\ \cdot \\ \cdot \\ U_{N+1} \\ U_{N+2} \end{bmatrix}$$



$$a_{m,m-1} = \alpha v / (1 + (\alpha - 1) x_{m-1}^2) \quad ; \quad m=2,3,\dots,N+2$$

$$a_{nn} = -(\lambda + v\alpha / (1 + (\alpha - 1) x_n^2)) \quad ; \quad n=f+1,\dots,N+1$$

$$a_{n,n+1} = \lambda \quad ; \quad n=f,\dots,N+1$$

$$a_{N+2,N+2} = -v$$

La solución de la anterior ecuación es:

$$\bar{U} = (\bar{V}^{-1}\bar{b} + \bar{U}_{in}) \exp(\bar{\lambda}\bar{P}) - \bar{V}^{-1}\bar{b} \quad (3.30)$$

donde:

$$\bar{U}_{in} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Desarrollando por fórmula de Sylvester:

$$\bar{U} = \bar{V}^{-1}\bar{b} \sum_{j=1}^{N+2} \exp(\lambda_j \bar{P}) \text{adj}(\lambda_j \bar{I} - \bar{P}) / \prod_{i=j} (\lambda_j - \lambda_i) - \bar{V}^{-1}\bar{b} \quad (3.31)$$

De nuevo, la solución implica encontrar los valores propios de  $\bar{P}$ , los cuales se pueden obtener con el siguiente programa que hace uso del método de Muller:

C EVALUACION DE LOS VALORES PROPIOS DE LA MATRIZ "A" DEL  
 C MODELO VECTORIAL DEL SISTEMA BAJO PERTURBACION

C

    DIMENSION: X(100),G(100),EF(100),H(100),EV(100),DL(100),  
 LDIV(100),XS(50)

    REAL LK

    INTEGER F

    DATA N,ALFA,VK,LK,F,XS/10,1.5,1.75,1.3125,6,  
 1.212535,.269779,.321535,.366213,.402996,.432435,.45934,  
 1.495330,.5422240,.601393,.672960,.755297,33\*0.0/

    READ/,PK,QK

    PRINT\*/,N,ALFA,PK,QK,VK,LK,F

    DO .600 M=1,N+2

    X(1)=0.5

    X(2)=-0.5

    X(3)=0.0

    CALL EFX(N,ALFA,PK,QK,VK,LK,F,XS,X(1),EF(1),M,EV)

    CALL EFX(N,ALFA,PK,QK,VK,LK,F,XS,X(2),EF(2),M,EV)

    CALL EFX(N,ALFA,PK,QK,VK,LK,F,XS,X(3),EF(3),M,EV)

    H(3)=X(3)-X(2)

    DL(3)=H(3)/(X(2)-X(1))

    DO 100 I=3,100

    G(I)=(1.+2.\*DL(I))\*(EF(I)-EF(I-1))-DL(I)\*\*2\*(EF(I-1)-  
 1EF(I-2))

    GS=G(I)\*\*2-4.\*EF(I)\*(1.+DL(I))\*DL(I)\*(EF(I)-EF(I-1)-  
 1DL(I)\*(EF(I-1)-EF(I-2)))

    IF(GS.LT.0.0) GS=0.0

    GE=SQRT(GS)

    G#1=G(I)+GE

    G#2=G(I)-GE

```

IF(ABS(GE1).GE.ABS(GE2)) GO TO 400
DL(I+1)=-2.*EF(I)*(1.+DL(I))/FE2
GO TO 500
400 DL(I+1)=-2.*EF(I)*(1.+DL(I))/GE1
500 X(I+1)=X(I)+H(I)*DL(I+1)
H(I+1)=H(I)*DL(I+1)
CALL EFX(N,ALFA,PK,QK,VK,LK,F,XS,K(I+1),EF(I+1),M,EV)
IF(ABS((X(I+1)-X(I))/X(I+1)).LT.1.E-7.OR.
1ABS(EF(I+1)).LT.1.E-7) GO TO 300
100 CONTINUE
EV(M)=X(I+1)
300 PRINT/,"EIGVAL",X(I+1),"PEIG",EF(I+1),"IT",I
600 CONTINUE
STOP
END

```

C

```

SUBROUTINE EFX(N,ALFA,PK,QK,VK,LK,F,XS,K,EF,M,EV)
DIMENSION P(100),EV(100),DIV(100),XS(50)
P(1)=-((LK+1.-VK+VK*ALFA)/(1.+(ALFA-1.)*XS(1))**2)/(K-K
P(2)=-((LK+1.+VK*ALFA)/(1.+(ALFA-1.)*XS(2))**2)-X)*P(1)-
1(LK+1.)/QK*VK*ALFA/(1.+(ALFA-1.)*XS(1))**2
DO 30 L1=3,F
P(L1)=-((LK+1.+VK*ALFA)/(1.+(ALFA-1.)*XS(L1))**2)-X)*
1P(L1-1)-(LK+1.)*VK*ALFA/(1.+(ALFA-1.)*XS(L1-1))**2*P(L1-2)
30 CONTINUE
DO 40 L2=F+1,H+1
P(L2)=-((LK+VK*ALFA)/(1.+(ALFA-1.)*XS(L2))**2)-X)*P(L2-1)-
1LK*VK*ALFA/(1.+(ALFA-1.)*XS(L2-1))**2*P(L2-2)

```

40 CONTINUE

$$P(N+2) = (-VK/PK - C) * P(N+1) - LK * VK / PK * ALPHA / (1. + (L * P(N+1)) *$$

$$LKS(N+1)) * * 2 * P(N)$$

IF(M.EQ.1) GO TO 900

IF(M.EQ.2) GO TO 901

GO TO 902

900 DIV(1)=1.

GO TO 903

901 DIV(2)=X-EV(1)

GO TO 903

902 DIV(K)=DIV(K-2)\*(X-EV(K-1))

903 P(N+2)=P(N+2)/DIV(M)

EP=P(N+2)

CONTINUE

RETURN

END



$$h_j = \lambda_j - v/P$$

$$w_{n-1} = v\alpha / (1 + (\alpha-1) \binom{s}{n-1})^2 ; n=2, 3, \dots, N+2$$

Los cofactores de la última columna de  $(\lambda_j \bar{I} - \bar{A})$  para  $N=10$  son:

$$p_{1,12}^j = w_{11} w_{10} \dots w_1 / P$$

$$p_{2,12}^j = w_{11} w_{10} \dots w_2 P_1^j / P ; P_1^j = f_j$$

$$p_{3,12}^j = w_{11} w_{10} \dots w_3 P_2^j / P ; P_2^j = \alpha_2^j P_1^j - w_1 (\ell_s + 1) / \alpha$$

$$p_{4,12}^j = w_{11} w_{10} \dots w_4 P_3^j / P ; P_3^j = \alpha_3^j P_2^j - w_2 (\ell_s + 1) P_1^j$$

$$p_{5,12}^j = w_{11} w_{10} \dots w_5 P_4^j / P ; P_4^j = \alpha_4^j P_3^j - w_3 (\ell_s + 1) P_2^j$$

$$p_{6,12}^j = w_{11} w_{10} \dots w_6 P_5^j / P ; P_5^j = \alpha_5^j P_4^j - w_4 (\ell_s + 1) P_3^j$$

$$p_{7,12}^j = w_{11} w_{10} \dots w_7 P_6^j / P ; P_6^j = \alpha_6^j P_5^j - w_5 (\ell_s + 1) P_4^j$$

$$p_{8,12}^j = w_{11} w_{10} \dots w_8 P_7^j / P ; P_7^j = \alpha_7^j P_6^j - w_6 \ell_s P_5^j$$

$$p_{9,12}^j = w_{11} w_{10} w_9 P_8^j / P ; P_8^j = \alpha_8^j P_7^j - w_7 \ell_s P_6^j$$

$$p_{10,12}^j = w_{11} w_1 P_9^j / P ; P_9^j = \alpha_9^j P_8^j - w_8 \ell_s P_7^j$$

$$p_{11,12}^j = w_{11} P_{10}^j / P ; P_{10}^j = \alpha_{10}^j P_9^j - w_9 \ell_s P_8^j$$

$$p_{12,12}^j = P_{11}^j ; P_{11}^j = \alpha_{11}^j P_{10}^j - w_{10} \ell_s P_9^j$$

Generalizando para cualquier  $N$ :

$$P_{1,N+2}^j = w_{N+1} w_N \dots w_1 / P$$

$$P_{2,N+2}^j = w_{N+1} w_N \dots w_2 P_1^j / P \quad ; \quad P_1^j = F_1$$

$$P_{3,N+2}^j = w_{N+1} w_N \dots w_3 P_2^j / P \quad ; \quad P_2^j = G_2^j P_1^j - w_1 (\ell_B + 1) / \delta$$

$$P_{4,N+2}^j = w_{N+1} w_N \dots w_4 P_3^j / P \quad ; \quad P_3^j = F_3^j P_2^j - w_2 (\ell_B + 1) P_1^j$$

$$\cdot \quad ; \quad \cdot$$

$$P_{f+1,N+2}^j = w_{N+1} w_N \dots w_{f+1} P_f^j / P \quad ; \quad P_f^j = G_f^j P_{f-1}^j - w_{f-1} (\ell_B + 1) P_{f-2}^j$$

$$P_{f+2,N+2}^j = w_{N+1} w_N \dots w_{f+2} P_{f+1}^j / P \quad ; \quad P_{f+1}^j = F_{f+1}^j P_f^j - w_f \ell_B P_{f-1}^j$$

$$\cdot \quad ; \quad \cdot$$

$$P_{N,N+2}^j = w_{N+1} w_N P_{N-1}^j / P \quad ; \quad P_{N-1}^j = G_{N-1}^j P_{N-2}^j - w_{N-2} \ell_B P_{N-3}^j$$

$$P_{N+1,N+2}^j = w_{N+1} P_N^j / P \quad ; \quad P_N^j = F_N^j P_{N-1}^j - w_{N-1} \ell_B P_{N-2}^j$$

$$P_{N+2,N+2}^j = P_{N+1}^j \quad ; \quad P_{N+1}^j = F_{N+1}^j P_N^j - w_N \ell_B P_{N-1}^j$$

Los coeficientes de la última columna de  $\bar{A}$  para cualquier  $N$  son:

$$P_{1,N+2}^j = w_{N+1} w_N \dots w_1 / P$$

$$P_{2,N+2}^j = w_{N+1} w_N \dots w_2 P_1^j / P \quad ; \quad P_1^j = -F$$

$$\begin{aligned}
 B_{3,N+2} &= -w_{N+1} w_N \dots w_3 P_2 / P & ; P_2 &= -G_2 P_1 - w_1 (\lambda_S + 1) P_1 \\
 B_{4,N+2} &= w_{N+1} w_N \dots w_4 P_3 / P & ; P_3 &= -I_3 P_2 - w_2 (\lambda_S + 1) P_1 \\
 & \cdot & ; & \cdot \\
 B_{f+1,N+2} &= (-1)^{f+1} w_{N+1} w_N \dots w_{f+1} P_f / P & ; P_f &= G_f P_{f-1} - w_{f-1} (\lambda_S + 1) P_{f-2} \\
 B_{f+2,N+2} &= (-1)^{f+2} w_{N+1} w_N \dots w_{f+2} P_{f+1} / P & ; P_{f+1} &= -E_{f+1} P_f - w_f \lambda_S P_{f-1} \\
 & \cdot & ; & \cdot \\
 B_{N,N+2} &= (-1)^N w_{N+1} w_N P_{N-1} / P & ; P_{N-1} &= -J_{N-1} P_{N-2} - w_{N-2} \lambda_S P_{N-3} \\
 B_{N+1,N+2} &= (-1)^{N+1} w_{N+1} P_N / P & ; P_N &= -E_N P_{N-1} - w_{N-1} \lambda_S P_{N-2} \\
 B_{N+2,N+2} &= P_{N+1} & ; P_{N+1} &= -E_{N+1} P_N - w_N \lambda_S P_{N-1}
 \end{aligned}$$

$$\text{donde: } f = (\lambda_S - v + 1 + v\alpha / (1 + (\alpha - 1) X_1^S)^2) / \lambda$$

$$G_m = \lambda_S + 1 + v\alpha / (1 + (\alpha - 1) X_m^S)^2 \quad ; m = 2, 3, \dots, f$$

$$E_n = \lambda_S + v\alpha / (1 + (\alpha - 1) X_n^S)^2 \quad ; n = f + 1, f + 2, \dots, N + 1$$

$$h = v / P$$

$$w_{n-1} = v\alpha / (1 + (\alpha - 1) X_{n-1}^S)^2 \quad ; n = 2, 3, \dots, N + 2$$

La expresión del determinante de  $\bar{A}$  se obtiene con la siguiente ecuación:

$$\det(\bar{A}) = P_{N+2} = -h^N_{N+1} - w_{11} \frac{P_N}{P}$$

donde  $P_{N+1}$  y  $P_N$ , están determinados con la anterior secuencia de polinomios desarrollada.

Si se hace la siguiente sustitución:

$$\bar{U}' = \bar{A}^{-1} \bar{b}$$

Se obtiene el siguiente desarrollo para  $U_{N+2}$ :

$$\begin{aligned} U_{N+2} = & \left( \sum_{j=1}^{N+2} \exp(\lambda_j T) (U'_1 \beta_{1,N+2}^j + U'_2 \beta_{2,N+2}^j + U'_3 \beta_{3,N+2}^j + U'_4 \beta_{4,N+2}^j + \dots \right. \\ & \left. + U'_f \beta_{f,N+2}^j + U'_{f+1} \beta_{f+1,N+2}^j + U'_{f+2} \beta_{f+2,N+2}^j + \dots + U'_N \beta_{N,N+2}^j + U'_{N+1} \beta_{N+1,N+2}^j + U'_{N+2} \beta_{N+2,N+2}^j) / \prod_{i=j} (\lambda_j - \lambda_i) \right. \\ & \left. + (b_1 \beta_{1,N+2} + b_2 \beta_{2,N+2} + b_3 \beta_{3,N+2} + b_4 \beta_{4,N+2} + \dots + b_f \beta_{f,N+2} + b_{f+1} \beta_{f+1,N+2} + b_{f+2} \beta_{f+2,N+2} + \dots + b_N \beta_{N,N+2} + b_{N+1} \beta_{N+1,N+2} + b_{N+2} \beta_{N+2,N+2}) / \det(\bar{A}) \right) \\ U_{N+2} = & \left( \sum_{j=1}^{N+2} \exp(\lambda_j T) \left( \sum_{k=1}^{N+2} U'_k \beta_{k,N+2}^j \right) / \prod_{i=j} (\lambda_j - \lambda_i) + \right. \\ & \left. + \left( \sum_{k=1}^{N+2} b_k \beta_{k,N+2} \right) / P_{N+2} \right) \end{aligned} \quad (3.33)$$

La tarea más laboriosa consiste en la evaluación de los elementos  $U'_k$ , ya que requiere la evaluación de todos los cofactores de  $\bar{A}$ . La secuencia para cualquier  $N$  es:

$$U'_1 = \sum_{k=1}^{N+2} b_k^* B_{k,1}$$

$$U'_2 = \sum_{k=1}^{N+2} b_k^* B_{k,2}$$

.

$$U'_{N+2} = \sum_{k=1}^{N+2} b_k^* B_{k,N+2}$$

Los cofactores para  $N=10$  de  $\bar{A}$  son los siguientes:

$$B_{1,11} = -hw_{10} \dots w_1$$

$$B_{2,11} = hw_{10} \dots w_2 P_1$$

$$B_{3,11} = -hw_{10} \dots w_3 P_2$$

$$B_{4,11} = hw_{10} \dots w_4 P_3$$

$$B_{5,11} = -hw_{10} \dots w_5 P_4$$

$$B_{6,11} = hw_{10} \dots w_6 P_5$$

$$B_{7,11} = -hw_{10} \dots w_7 P_5$$

$$B_{8,11} = hw_{10} \dots w_5 P_7$$

$$B_{9,11} = -hw_{10} \dots w_9 P_3$$

$$B_{10,11} = hw_{10} P_9$$

$$B_{11,11} = -hP_{10}$$

$$B_{12,11} = -l_s P_{10}$$

$$B_{1,10} = -(hg_{11} - l_s w_{11}/P) w_9 \dots w_1$$

$$B_{2,10} = (hg_{11} - l_s w_{11}/P) w_9 \dots w_2 P_1$$

$$B_{3,10} = -(hg_{11} - l_s w_{11}/P) w_9 \dots w_3 P_2$$

$$B_{4,10} = (hg_{11} - l_s w_{11}/P) w_9 \dots w_4 P_3$$

$$B_{5,10} = -(hg_{11} - l_s w_{11}/P) w_9 \dots w_5 P_4$$

$$B_{6,10} = (hg_{11} - l_s w_{11}/P) w_9 \dots w_6 P_5$$

$$B_{7,10} = -(hg_{11} - l_s w_{11}/P) w_9 \dots w_7 P_6$$

$$B_{8,10} = (hg_{11} - l_s w_{11}/P) w_9 \dots P_7$$

$$B_{9,10} = -(hg_{11} - l_s w_{11}/P) w_9 P_8$$

$$^1_{10,10} = (h\pi_{11} - \ell_s w_{11}/P) F_9$$

$$^*_{11,10} = h \ell_s^2 P_9$$

$$^*_{12,10} = \ell_s^2 P_9$$

$$^*_{1,9} = -h P_{10}^{10} + w_{11} s_{10} w_3 \dots w_1 ; P_{10}^{10} = (\pi_{11} s_{10} - w_{11} \ell_s) w_3 \dots w_1$$

$$^{-3}_{2,9} = -h P_{10}^{10} + w_{11} s_{10} w_5 \dots w_2 P_1 ; P_{10}^{10} = (\pi_{11} s_{10} - w_{11} \ell_s) w_3 \dots w_2 P_1$$

$$^*_{3,9} = \dots w_3 P_2 ; \dots w_3 P_2$$

$$^{-3}_{4,9} = \dots w_4 P_3 ; \dots w_4 P_3$$

$$^*_{5,9} = \dots w_5 P_4 ; \dots w_5 P_4$$

$$^{-3}_{6,9} = \dots w_6 P_5 ; \dots w_6 P_5$$

$$^*_{7,9} = \dots w_7 P_6 ; \dots w_7 P_6$$

$$^{-3}_{8,9} = \dots w_8 P_7 ; \dots w_8 P_7$$

$$^*_{9,9} = P_8 ; P_8$$

$$^{-3}_{10,9} = (h\pi_{11} - w_{11} \ell_s / P) s_{10} P_8$$

$$^*_{11,9} = -h \ell_s^2 P_8$$

$$^*_{12,9} = -\ell_s^2 P_8$$

$$-B_{13} = -hP'_{10} - w_{11} \lambda_s P'_{9/P} ; P'_{10} = -\pi_{11} P'_9 + w_{11} \lambda_s \kappa_9 P'_7 ; P'_9 = (\pi_{11} \pi_9 - \pi_9 \lambda_s) P'_7 ; P'_7 = w_7 \dots w_1$$

$$B_{23} = " " ; P'_7 = w_7 \dots w_2 P_1$$

$$-B_{33} = " " ; P'_7 = w_7 \dots w_3 P_2$$

$$B_{43} = " " ; P'_7 = w_7 \dots w_4 P_3$$

$$-B_{53} = " " ; P'_7 = w_7 \dots w_5 P_4$$

$$B_{63} = " " ; P'_7 = w_7 w_6 P_5$$

$$-B_{73} = " " ; P'_7 = w_7 P_6$$

$$B_{83} = " " ; P'_7 = P_7$$

$$-B_{93} = -hP'_{10} + w_{11} \lambda_s^2 \pi_{10} P'_7/P ; P'_{10} = (\pi_{11} \pi_{10} - w_{10} \lambda_s) \lambda_s P_7$$

$$B_{10,3} = (h\pi_{11} - w_{11} \lambda_s/P) \lambda_s^2 P_7$$

$$-B_{11,3} = -h \lambda_s^2 P_7$$

$$B_{12,3} = \lambda_s^4 P_7$$

$$B_{17} = -hP'_{10} - w_{11} \lambda_s P'_{9/P} ; P'_{10} = -\pi_{11} P'_9 - w_{10} \lambda_s P'_3 ; P'_9 = -\pi_{10} P'_3 + w_{10} \lambda_s \kappa_9 P'_0 ; P'_3 = (\pi_9 \pi_3 - w_3 \lambda_s) P_3 ; P'_0 = w_3 \dots w_1$$

$$-B_{27} = " " ; P'_0 = w_0 \dots w_2 P_1$$

$$B_{37} = " " ; P'_0 = w_0 \dots w_3 P_2$$

$$\begin{aligned}
-P_{47} &= & & & ; P_0' = w_0 \dots w_4 P_5 \\
P_{57} &= & & & ; P_3' = w_5 w_5 P_4 \\
-P_{57} &= & & & ; P_0' = w_0 P_5 \\
P_{77} &= & & & ; P_5' = P_0 \\
-P_{97} &= -hP_{10}^{-w_{11}} \ell_8 P_9' / P ; P_{10}' = -g_{11} P_9' + w_{10} \ell_8^2 \epsilon_9 P_5 ; P_9' = (g_{10}^{-w_9} \ell_8) \ell_8 P_0 \\
P_{97} &= -hP_{10}^{+w_{11}} \ell_8^3 \epsilon_{10} P_0' / P ; P_{10}' = (z_{11} z_{10}^{-w_{10}} \ell_8) \ell_8^2 P_0 \\
-P_{10,7} &= (hz_{11}^{-w_{11}} \ell_8 / P) \ell_8^3 P_0 \\
P_{11,7} &= -h \ell_8^4 P_0 \\
-P_{12,7} &= \ell_8^5 P_0 \\
-P_{10} &= -hP_{10}'^{-w_{11}} \ell_8 P_9' / P ; \dots ; P_3' = -g_9 P_7' + w_3 \ell_8 \epsilon_7 P_5 ; P_7' = (\epsilon_9 \epsilon_7^{-w_7} \ell_8) P_5 \\
& & & & ; P_5 = w_5 \dots w_1 \\
P_{26} &= & & & ; P_5' = w_5 \dots w_2 P_1 \\
-P_{36} &= & & & ; P_5' = w_5 \dots w_3 P_2 \\
P_{46} &= & & & ; P_5' = w_5 w_4 P_3 \\
-P_{56} &= & & & ; P_5' = w_5 P_4 \\
P_{66} &= & & & ; P_5' = P_5
\end{aligned}$$

$$-B_{76} = -hP'_{10} - w_{11} \lambda_s P'_9 / P ; \dots ; P'_9 = -\varepsilon_{10} P'_3 + w_9 \lambda_s^2 \varepsilon_3 P_5 ; P'_8 = (\varepsilon_9 \varepsilon_3 - w_3 \lambda_s) \lambda_s P_5$$

$$B_{35} = \quad " \quad ; P'_{10} = -\varepsilon_{11} P'_9 + w_{10} \lambda_s^3 \varepsilon_9 P_5 ; P_9 = (\varepsilon_{10} \varepsilon_9 - w_9 \lambda_s) \lambda_s^2 P_5$$

$$-B_{96} = -hP'_{10} + w_{11} \lambda_s^4 \varepsilon_{10} P_5 / P ; P'_{10} = (\varepsilon_{11} \varepsilon_{10} - w_{10} \lambda_s) \lambda_s^3 P_5$$

$$B_{10,6} = (h\varepsilon_{11} - w_{11} \lambda_s / P) \lambda_s^4 P_5$$

$$-B_{11,5} = -h \lambda_s^5 P_5$$

$$B_{12,6} = \lambda_s^6 P_5$$

$$B_{15} = -hP'_{10} - w_{11} \lambda_s P'_9 / P ; \dots ; P'_7 = -\varepsilon_3 P'_6 + w_7 \lambda_s G_6 P'_4 ; P'_6 = (\varepsilon_7 \varepsilon_5 - w_6 \lambda_s) P_4 ; P_4 = w_4 \dots w_1$$

$$-B_{25} = \quad " \quad " \quad ; P'_4 = w_4 \dots w_2 P_1$$

$$B_{35} = \quad " \quad " \quad ; P'_4 = w_4 w_3 P_2$$

$$-B_{45} = \quad " \quad " \quad ; P'_4 = w_4 P_3$$

$$B_{55} = \quad " \quad " \quad ; P'_4 = P_4$$

$$-B_{65} = \quad " \quad ; \dots ; P'_8 = -\varepsilon_9 P'_7 + w_8 \lambda_s (\lambda_s + 1) \varepsilon_7 P_4 ; P_7 = (\varepsilon_3 \varepsilon_7 - w_7 \lambda_s) (\lambda_s + 1) P_4$$

$$B_{75} = \quad " \quad ; \dots ; P'_9 = -\varepsilon_{10} P'_3 + w_9 \lambda_s^2 (\lambda_s + 1) \varepsilon_3 P_4 ; P_8 = (\varepsilon_9 \varepsilon_3 - w_3 \lambda_s) \lambda_s (\lambda_s + 1) P_4$$

$$-B_{95} = \quad " \quad ; P'_{10} = -\varepsilon_{11} P'_9 + w_{10} \lambda_s^3 (\lambda_s + 1) \varepsilon_9 P_4 ; P_9 = (\varepsilon_{10} \varepsilon_9 - w_9 \lambda_s) \lambda_s^2 (\lambda_s + 1) P_4$$



$$\begin{aligned}
 \beta_{10,4} &= (h\pi_{11} - w_{11}l_s/P) l_s' (l_s + 1)^2 P_2 \\
 -\beta_{11,4} &= -h l_s^5 (l_s + 1)^2 P_2 \\
 \beta_{12,4} &= l_s^0 (l_s + 1)^2 P_3 \\
 \beta_{13} &= -h P_{10}' - w_{11} l_s P_9' / P ; \dots ; P_5' = -G_5 P_4' + w_5 (l_s + 1) G_4 P_2' \\
 & ; P_4' = (G_5 G_4 - w_4 (l_s + 1)) P_2 ; P_2 = w_2 w_1 \\
 -\beta_{23} &= " " " ; P_2' = w_2 P_1 \\
 \beta_{33} &= " " " ; P_2' = P_2 \\
 -\beta_{43} &= " \dots ; P_4' = -\pi_7 P_5' + w_6 l_s (l_s + 1) G_5 P_2 \\
 & ; P_5' = (G_5 G_5 - w_5 (l_s + 1)) (l_s + 1) P_2 \\
 \beta_{53} &= " \dots ; P_7' = -\pi_3 P_5' + w_7 l_s (l_s + 1)^2 G_5 P_2 \\
 & ; P_5' = (\pi_7 G_5 - w_5 l_s) (l_s + 1)^2 P_2 \\
 -\beta_{63} &= " \dots ; P_7' = -\pi_9 P_7' + w_8 l_s (l_s + 1)^3 G_7 P_2 \\
 & ; P_7' = (\pi_7 G_7 - w_7 l_s) (l_s + 1)^3 P_2 \\
 \beta_{73} &= " \dots ; P_9' = -\pi_{10} P_7' + w_9 l_s^2 (l_s + 1)^3 G_9 P_2 \\
 & ; P_8' = (\pi_9 G_8 - w_8 l_s) l_s (l_s + 1)^3 P_2 \\
 -\beta_{83} &= " ; P_{10}' = -\pi_{11} P_9' + w_{10} l_s^3 (l_s + 1)^3 G_{10} P_2 \\
 & ; P_9' = (\pi_{10} G_9 - w_9 l_s) l_s^2 (l_s + 1)^3 P_2 \\
 \beta_{93} &= -h P_{10}' + w_{11} l_s^4 (l_s + 1)^3 G_{10} P_2 ; P_{10}' = (G_{11} G_{10} - w_{10} l_s) l_s^3 (l_s + 1)^3 P_2 \\
 -\beta_{10,3} &= (h\pi_{11} - w_{11} l_s/P) l_s' (l_s + 1)^3 P_2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\beta_{11,3} &= -h \lambda_s^5 (\lambda_s + 1)^3 P_2 \\
-\beta_{12,3} &= \lambda_s^4 (\lambda_s + 1)^3 P_2 \\
-\beta_{12} &= -h P_{10}' - w_{11} \lambda_s P_9' / P ; \dots ; P_4' = -G_5 P_3' + w_4 (\lambda_s + 1) G_3 w_1 ; \\
& \quad ; P_3 = (G_4 G_3 - w_3 (\lambda_s + 1)) w_1 \\
\beta_{22} &= " ; \dots ; P_4' = -G_5 P_3' + w_4 (\lambda_s + 1) G_3 P_1 \\
& \quad ; P_3 = (G_4 G_3 - w_3 (\lambda_s + 1)) P_1 \\
-\beta_{32} &= " ; \dots ; P_5' = -G_6 P_4' + w_5 (\lambda_s + 1)^2 G_4 P_1 \\
& \quad ; P_4 = (G_5 G_4 - w_4 (\lambda_s + 1)) (\lambda_s + 1) P_1 \\
\beta_{42} &= " ; \dots ; P_5' = -G_7 P_4' + w_6 (\lambda_s + 1)^2 \lambda_s G_5 P_1 \\
& \quad ; P_5 = (G_6 G_5 - w_5 (\lambda_s + 1)) (\lambda_s + 1)^2 P_1 \\
-\beta_{52} &= " ; \dots ; P_7' = -G_3 P_6' + w_7 (\lambda_s + 1)^3 \lambda_s G_6 P_1 \\
& \quad ; P_6 = (G_7 G_6 - w_6 \lambda_s) (\lambda_s + 1)^3 P_1 \\
\beta_{62} &= " ; \dots ; P_8' = -G_9 P_7' + w_8 (\lambda_s + 1)^4 \lambda_s G_7 P_1 \\
& \quad ; P_7 = (G_8 G_7 - w_7 \lambda_s) (\lambda_s + 1)^4 P_1 \\
-\beta_{72} &= " ; \dots ; P_9' = -G_{10} P_8' + w_9 (\lambda_s + 1)^4 \lambda_s^2 G_9 P_1 \\
& \quad ; P_8 = (G_9 G_8 - w_8 \lambda_s) (\lambda_s + 1)^4 \lambda_s P_1 \\
\beta_{32} &= " ; P_{10}' = -G_{11} P_9' + w_{10} (\lambda_s + 1)^4 \lambda_s^3 G_{10} P_1 \\
& \quad ; P_9 = (G_{10} G_9 - w_9 \lambda_s) (\lambda_s + 1)^4 \lambda_s^2 P_1 \\
-\beta_{92} &= -h P_{10}' - w_{11} (\lambda_s + 1)^4 \lambda_s^4 P_1 / P ; P_{10}' = (G_{11} G_{10} - w_{10} \lambda_s) \lambda_s^3 (\lambda_s + 1)^4 P_1 \\
\beta_{1,2} &= (h G_{11} - w_{11} \lambda_s / P) \lambda_s^4 (\lambda_s + 1)^4 P_1
\end{aligned}$$

$$-P_{11,2} = -1 \lambda_s^5 (\lambda_s + 1)^{-1} (-1)$$

$$P_{12,2} = \lambda_s^5 (\lambda_s + 1)^4 P_1$$

$$P_{21} = \dots; P_3' = -\pi_3 P_2' + w_2 (\lambda_s + 1) \lambda_s; P_2' = (\pi_3 \pi_2 - w_2 (\lambda_s + 1))$$

$$-P_{21} = \dots; P_4' = -\pi_4 P_3' + w_3 (\lambda_s + 1)^2 \pi_3 / \lambda_s; P_3' = (\pi_4 \pi_3 - \pi_3 (\lambda_s + 1)) (\lambda_s + 1) \lambda_s$$

$$P_{31} = \dots; P_5' = -\pi_5 P_4' + w_4 (\lambda_s + 1)^3 \pi_4 / \lambda_s; P_4' = (\pi_5 \pi_4 - w_4 (\lambda_s + 1)) (\lambda_s + 1)^2 \lambda_s$$

$$-P_{41} = \dots; P_6' = -\pi_6 P_5' + w_5 (\lambda_s + 1)^4 \pi_5 \pi_4 / \lambda_s; P_5' = (\pi_6 \pi_5 - w_5 (\lambda_s + 1)) (\lambda_s + 1)^3 \lambda_s$$

$$P_{51} = \dots; P_7' = -\pi_7 P_6' + w_6 (\lambda_s + 1)^5 \pi_6 \pi_5 / \lambda_s; P_6' = (\pi_7 \pi_6 - w_6 \lambda_s) (\lambda_s + 1)^4 / \lambda_s$$

$$-P_{61} = \dots; P_8' = -\pi_8 P_7' + w_7 (\lambda_s + 1)^6 \pi_7 \pi_6 / \lambda_s; P_7' = (\pi_8 \pi_7 - w_7 \lambda_s) (\lambda_s + 1)^5 / \lambda_s$$

$$P_{71} = \dots; P_9' = -\pi_9 P_8' + w_8 (\lambda_s + 1)^7 \pi_8 \pi_7 / \lambda_s; P_8' = (\pi_9 \pi_8 - w_8 \lambda_s) (\lambda_s + 1)^6 \lambda_s / \lambda_s$$

$$-P_{81} = \dots; P_{10}' = -\pi_{11} P_9' + w_9 (\lambda_s + 1)^8 \pi_9 \pi_8 / \lambda_s; P_9' = (\pi_{10} \pi_9 - w_9 \lambda_s) (\lambda_s + 1)^7 \pi_8 / \lambda_s$$

$$P_{91} = -\pi_{10}' + w_{11} (\lambda_s + 1)^5 \lambda_s^4 \pi_{10}' / \lambda_s; P_{10}' = (\pi_{11} \pi_{10} - w_{10} \lambda_s) (\lambda_s + 1)^5 \lambda_s^3 / \lambda_s$$

$$-P_{10,1} = -(\pi_{11}' - w_{11} \lambda_s^2) \lambda_s^4 (\lambda_s + 1)^5 / \lambda_s$$

$$P_{11,1} = -\pi_{11}' (\lambda_s + 1)^5 / \lambda_s$$

$$-P_{12,1} = \lambda_s^5 (\lambda_s + 1)^5 / \lambda_s$$

Si solo existe perturbación en la composición de alimentación, el único valor de  $\bar{U}$  diferente de cero es el correspondiente al del plato de alimentación, por lo que la expresión 3.33 para  $U_{i+2}$  se simplifica:

$$U_{i+2} = \left( \sum_{j=1}^{i+2} \exp(\lambda_j T) \left( \sum_{k=1}^{N+2} U_k' b_{F,k,N+2}^j \right) / \prod_{i=1} (\lambda_j - \lambda_i) - b_{F,i,N+2} \right) / P_{N+2}$$

$$\text{donde: } U_1' = b_{F,i,1}$$

$$U_2' = b_{F,i,2}$$

.

$$U_{N+2}' = b_{F,i,N+2}$$

$$b_F = U_i$$

Sustituyendo:

$$U_{N+2} = \left( \sum_{j=1}^{i+2} \exp(\lambda_j T) \left( \sum_{k=1}^{N+2} b_{F,k,N+2}^j \right) / \prod_{i=1} (\lambda_j - \lambda_i) - b_{F,i,N+2} \right) / P_{N+2}$$

$$U_{N+2} / U_i = \left( \sum_{j=1}^{i+2} \exp(\lambda_j T) \left( \sum_{k=1}^{N+2} b_{F,k,N+2}^j \right) / \prod_{i=1} (\lambda_j - \lambda_i) - b_{F,i,N+2} \right) / P_{N+2}$$

$$U_{N+2} / U_i = \left( \sum_{j=1}^{N+2} \exp(\lambda_j T) S_j - b_{F,i,N+2} \right) / P_{N+2} \quad (3.34)$$

$$\text{donde: } S_j = \left( \sum_{k=1}^{N+2} b_{F,k,N+2}^j \right) / \prod_{i=1} (\lambda_j - \lambda_i)$$

antes de efectuar cualquier cálculo, se requiere de información de estado estacionario. Esta se obtuvo en gran parte de Weitzel, et al (1972), considerando que con ella se puede cubrir el efecto de los diferentes parámetros involucrados. Se analizaron dos situaciones caracterizadas por la siguiente información:

CASO	1	2
$H$	10	25
$H_0/H$	15.0	5.0
$H_Y/H$	15.0	5.0
$v$	1.75	1.0
$\lambda$	1.3125	0.5
$K_p$	0.45	0.45
$\alpha$	1.5, 2.5, 3.5	2.5, 3.5

Obtenida en gran parte de Weizsäcker, et al (1972), considerando que con ella se puede cubrir el efecto de los diferentes parámetros involucrados.

Para el estado estacionario los términos de acumulación se anulan en el sistema de ecuaciones (3.1)-(3.5), obteniéndose:

Condensador:

$$v\alpha K_{N+1}/(1+(\alpha-1)K_{N+1}) - vK_{N+2} = 0 \quad (3.33)$$

Sección de enriquecimiento:

$$v\alpha K_{n-1}/(1+(\alpha-1)K_{n-1}) - v\alpha K_n/(1+(\alpha-1)K_n) + K_{n+1} - K_n = 0 \quad ; \quad n=f+1, f+2, \dots, N \quad (3.34)$$

Alimentación:

$$v\alpha K_{f-1}/(1+(\alpha-1)K_{f-1}) - v\alpha K_f/(1+(\alpha-1)K_f) + K_{f+1} - (f+1)K_f + K_f = 0 \quad (3.35)$$

Sección de desotamiento:

$$v\alpha K_{m-1}/(1+(\alpha-1)K_{m-1}) - v\alpha K_m/(1+(\alpha-1)K_m) + (f+1)K_{m+1} - (f+1)K_m = 0 \quad ; \quad m=2, 3, \dots, f-1 \quad (3.36)$$

dehervidor:

$$-v\alpha X_1 / (1 + (\alpha - 1)X_1) + (k + 1)X_2 + (k - v + 1)X_1 = 0 \quad (3.37)$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones de estado estacionario con los datos dados anteriormente, se tienen los siguientes resultados presentados en las tablas 1 y 2.

Tabla 1. Perfil de composiciones de estado estacionario para  $N=10$ .

Etapas	$\alpha=3.5$	$\alpha=2.5$	$\alpha=1.5$
1	0.023520	0.040510	0.212535
2	0.064558	0.032104	0.260779
3	0.152450	0.146153	0.321535
4	0.293775	0.239181	0.366132
5	0.45714	0.362375	0.402996
6	0.571671	0.433224	0.432435
7	0.765454	0.555437	0.459344
8	0.893223	0.634934	0.495330
9	0.956521	0.700632	0.542240
10	0.933462	0.77061	0.601396
11	0.994181	0.943225	0.672960
12	0.99330	0.976488	0.755297

Tabla 2. Perfil de composiciones de estado estacionario para  $N=25$ .

Etapa	$\alpha=3.5$	$\alpha=2.5$
1	0.033350	0.091670
2	0.132143	0.160296
3	0.305030	0.230290
4	0.409323	0.306964
5	0.474063	0.362791
6	0.505323	0.401470
7	0.519369	0.425097
8	0.525767	0.440433
9	0.528192	0.448773
10	0.529179	0.453471
11	0.529580	0.456030
12	0.529742	0.457520
13	0.529808	0.458312
14	0.529834	0.458747
15	0.529920	0.473963
16	0.733599	0.495913
17	0.881445	0.526566
18	0.933339	0.567436
19	0.969312	0.613943
20	0.985071	0.679001
21	0.992331	0.743289
22	0.996535	0.806037
23	0.998337	0.861997
24	0.999247	0.903029
25	0.999553	0.943442
26	0.999854	0.969307
27	0.999953	0.987492

Los valores propios de la matriz  $\bar{A}$ , calculados por el método de Muller, se dan en la tabla 3. Los valores  $S_j$  y  $U_{N+2}/U_N$  de la ecuación 3.34, para  $N=10$ , se dan en las tablas 4 y 5, respectivamente.

Tabla 3. Valores propios de la matriz  $\bar{A}$  para  $N=10$ .

j	3.5	2.5	1.5
1	-0.0125199	-0.0152015	-0.0255304
2	-0.0792772	-0.0654373	-0.0433199
3	-0.2516256	-0.1754533	-0.2467176
4	-0.4790342	-0.4373172	-0.5905107
5	-0.9332996	-1.0521639	-1.2534633
6	-1.6351355	-1.3739317	-2.0333705
7	-2.3123234	-2.6214196	-2.9429683
8	-2.8900429	-3.4023046	-3.9995046
9	-3.3915415	-4.1716473	-4.7739702
10	-4.7172352	-5.1722233	-5.5046466
11	-6.7253350	-7.1650551	-6.5716099
12	-10.1976230	-9.4252657	-7.3937139

Tabla 4. Valores  $S_j$  de la ec. 3.34, para  $N=10$ .

$S_j$	$\alpha=3.5$	$\alpha=2.5$	$\alpha=1.5$	$S_j$	$\alpha=3.5$	$\alpha=2.5$	$\alpha=1.5$
1	-0.08735	-1.76624	-10.6306	7	-0.00028	0.00013	-0.00053
2	0.00946	0.30137	2.40351	8	$6 \times 10^{-5}$	-0.00039	-0.01243
3	0.00542	0.09933	1.32503	9	0.00040	-0.00050	0.00601
4	-0.00199	-0.03129	-0.22423	10	$-1 \times 10^{-6}$	$-3 \times 10^{-5}$	-0.00017
5	-0.00056	-0.00401	-0.07946	11	$-5 \times 10^{-9}$	$-3 \times 10^{-7}$	-0.00021
6	0.00056	0.00758	0.04730	12	$5 \times 10^{-9}$	$7 \times 10^{-9}$	$-5 \times 10^{-6}$

Tabla 5. Valores de  $U_{n+2}/U_n$  de la ec. 3.34, para  $n=10$ .

T	3.5	2.5	1.5
00	0.0000000	0.0000000	0.0000000
10	0.0014597	0.0245399	0.0901745
20	0.0052422	0.0823434	0.2530507
30	0.0114359	0.1449582	0.4273577
40	0.0163734	0.2126043	0.5570909
50	0.0204951	0.2705703	0.6329549
60	0.0249502	0.3220282	0.7472337
70	0.0285595	0.3670475	0.8142450
80	0.0317585	0.4062309	0.8673059
90	0.0345375	0.4400852	0.9092205
100	0.0370365	0.4633004	0.9421175
120	0.0412400	0.5160323	0.9330307
140	0.0444746	0.5506676	1.0161194
160	0.0469929	0.5702042	1.0331323
180	0.0489535	0.5950510	1.0434173
200	0.0504797	0.6089582	1.0490193
220	0.0516679	0.6192193	1.0533507
240	0.0524296	0.6267913	1.0555973
260	0.0533130	0.6323773	1.0569457
280	0.0533736	0.6364998	1.0577552
300	0.0543100	0.6395411	1.0582410
.	.	.	.
.	0.0553433	0.6431007	1.0589691

De manera similar, para el caso donde solo se perturba el reflujo, los elementos  $U_k^1$  quedan como sigue:

$$U_1^1 = \sum_{k=1}^{N+1} (\lambda - \lambda_g) (\lambda_{k+1}^S - \lambda_k^S) \mathfrak{B}_{k,1}$$

$$U_2^1 = \sum_{k=1}^{N+1} (\lambda - \lambda_g) (\lambda_{k+1}^S - \lambda_k^S) \mathfrak{B}_{k,2}$$

$$U_{N+2}^1 = \sum_{k=1}^{N+1} (\lambda - \lambda_g) (\lambda_{k+1}^S - \lambda_k^S) \mathfrak{B}_{k,N+2}$$

Si:  $b_k = (\lambda_{k+1}^S - \lambda_k^S) (\lambda - \lambda_g)$  y  $b_{N+2} = 0,0$

Justituyendo en la ecuación 3.33, la expresión para  $U_{N+2}$  se simplifica a:

$$U_{N+2} = \left( \sum_{j=1}^{N+2} \exp(\lambda_j T) \left( \sum_{k=1}^{N+2} r_{k,N+2}^j \sum_{m=1}^{N+1} (\lambda - \lambda_g) (\lambda_{m+1}^S - \lambda_m^S) \mathfrak{B}_{m,k} \right) / \prod_{i=j} (\lambda_j - \lambda_i) \right. \\ \left. - \sum_{k=1}^{N+1} (\lambda - \lambda_g) (\lambda_{k+1}^S - \lambda_k^S) \mathfrak{B}_{k,N+2} \right) / \mathfrak{P}_{N+2}$$

$$U_{N+2} / (\lambda - \lambda_g) = \left( \sum_{j=1}^{N+2} \exp(\lambda_j T) \mathfrak{B}_j - \sum_{k=1}^{N+1} (\lambda_{k+1}^S - \lambda_k^S) \mathfrak{B}_{k,N+2} \right) / \mathfrak{P}_{N+2}$$

(3.35)

donde:  $\mathfrak{B}_j = \left( \sum_{k=1}^{N+2} r_{k,N+2}^j \sum_{m=1}^{N+1} (\lambda_{m+1}^S - \lambda_m^S) \mathfrak{B}_{m,N+2} \right) / \prod_{i=j} (\lambda_j - \lambda_i)$

Los valores  $S_j$  y  $U_{N+2}/(l-l_s)$  de la ecuación 3.35, correspondientes a la perturbación del reflujo, se dan en las tablas 6 y 7.

Tabla 6. Valores  $S_j$  de la ecuación 3.35, para  $N=10$ .

$S_j$	3.5	2.5	1.5
1	-0.1452694	-2.4336235	-11.771956
2	0.0524761	0.4416393	5.1145460
3	-0.0323394	0.0334771	0.1934738
4	0.0203602	-0.0539345	0.0046636
5	-0.0058306	0.0291944	0.0257444
6	0.0019274	-0.0155591	-0.0226463
7	-0.0009259	0.0163357	0.0190334
8	0.0005747	-0.0046179	-0.0120063
9	0.0003730	0.0013225	0.0097619
10	$7.9 \times 10^{-6}$	-0.0003556	-0.0025074
11	$-3.1 \times 10^{-8}$	$9.4 \times 10^{-6}$	0.0003175
12	$8.7 \times 10^{-9}$	$-2.1 \times 10^{-7}$	$-1.3 \times 10^{-5}$

Tabla 7. Valores de  $U_{1+z}/(k-k_g)$  de la ecuación 3.35, para  $N=10$ .

T	3.5	2.5	1.5
00	0.0000000	0.0000000	0.0000000
10	0.0016673	0.0445496	0.0968536
20	0.0049188	0.1238021	0.2255612
30	0.0105094	0.2125793	0.3442699
40	0.0174017	0.2933344	0.4574223
50	0.0242398	0.3763269	0.5599959
60	0.0306593	0.4466309	0.6493264
70	0.0364933	0.5078438	0.6937476
80	0.0417295	0.5610743	0.7461701
90	0.0463309	0.6071356	0.7833316
100	0.0505011	0.6464766	0.8220153
120	0.0573612	0.7195524	0.8699240
140	0.0627032	0.7576340	0.8996708
160	0.0663721	0.7923994	0.9179356
180	0.0701139	0.8180576	0.9290670
200	0.0726376	0.8369915	0.9351137
220	0.0746024	0.8509620	0.9393954
240	0.0761319	0.8612700	0.9423542
260	0.0773626	0.8683757	0.9443339
280	0.0782496	0.8744375	0.9447235
300	0.0789712	0.8786231	0.9452573
.	.	.	.
.	0.0815074	0.8902314	0.9459595

## 3.3 Solución numérica de los modelos no lineal y lineal.

Para determinar los rangos de validez del sistema linealizado, se trabajó con los siguientes valores de perturbación, - tanto en la concentración de alimentación como en el reflujo:

$$U_p = \lambda - \lambda^0 = 0.00001, 0.0001, 0.001, 0.005, 0.01, 0.05, 0.1, 0.5$$

Utilizando los datos de estado estacionario, se resolvieron los sistemas no lineal (3.1)-(3.5) y lineal (3.11)-(3.15) por el método de Runge-Kutta-Gill, ya mencionado anteriormente. Los programas en lenguaje FORTRAN se dan a continuación:

```

C      EVALUACION DE TIEMPOS DE ESTABILIZACION DE COLUMNAS DE
C      DESTILACION BINARIA BAJO LA ACCION DE UNA PERTURBACION
C      EN LA COMPOSICION DE ALIMENTACION Y/O EN EL REFLUJO
C
      DIMENSION US1(50),USK1(50),USK12(50),USK23(50),AK1(50),
      LAK2(50),AK3(50),AK4(50),AS1(50)
      READ/DELTA,ALFA,U,F,LK
      REAL LK
      INTEGER P
      DATA F,VK,PK,QK,N,KF,KS1/6,1.75,15.,15.,10.,.45,
      1.023520,.064558,.152450,.293775,.453714,.571671,.765454,
      1.393223,.950521,.933462,.994131,.998330,3340.0/
      PRINT*/N,ALFA,DELTA,U,F,KF,VK,LK,QK,PK,F,LK
      T=0.0
      TI=0.0
      DO 15 LL=1,N+2

```

```

15 US1(L1)=0.0
   DO 700 T=1,10
800 PI=PI+DELTA
C
C   CALCULO DE K1R
C
   CALL REHE(ALFA, DELTA, VK, LK, QK, AK1(1), XS1, US1)
   USK1(1)=US1(1)+AK1(1)/2.
   DO 30 L1=2, P-1
   CALL AGOT(ALFA, DELTA, VK, LK, AK1(L1), L1, XS1, US1)
30 USK1(L1)=US1(L1)+AK1(L1)/2.
   CALL ELIR(ALFA, DELTA, UF, CF, VK, LK, P, AK1(P), XS1, US1)
   USK1(P)=US1(P)+AK1(P)/2.
   DO 40 L2=P+1, N+1
   CALL ENRI(ALFA, DELTA, VK, LK, AK1(L1), L1, XS1, US1)
40 USK1(L2)=US1(L2)+AK1(L2)/2.
   CALL GOND(ALFA, DELTA, VK, LK, N, PK, AK1(N+2), XS1, US1)
   USK1(N+2)=US1(N+2)+AK1(N+2)/2.
C
C   CALCULO DE K2R
C
   BETA=.2971057312
   GAMMA=.2928932133
   CALL REHE(ALFA, DELTA, VK, LK, QK, AK2(1), XS1, USK1)
   USK12(1)=US1(1)+BETA*AK1(1)+GAMMA*AK2(1)
   DO 50 L3=2, P-1
   CALL AGOT(ALFA, DELTA, VK, LK, AK2(L3), L3, XS1, USK1)
50 USK12(L3)=US1(L3)+BETA*AK1(L3)+GAMMA*AK2(L3)

```

```

CALL ALIM(ALFA, DELTA, U, X, VK, LK, P, AK2(P), XSI, USK1)
USK12(P) = US1(P) + BETA * AK1(P) + GAMMA * AK2(P)
DO 60 L4 = P + 1, N + 1
CALL ENRI(ALFA, DELTA, VK, LK, AK2(L4), L4, XSI, USK1)
60 USK12(L4) = US1(L4) + BETA * AK1(L4) + GAMMA * AK2(L4)
CALL COND(ALFA, DELTA, VK, LK, N, PK, AK2(N+2), XSI, USK1)
USK12(N+2) = US1(N+2) + BETA * AK1(N+2) + GAMMA * AK2(N+2)
C
C CALCULO DE K3R
C
ETP = -.7071067812
TEC = 1.7071067810
CALL REHE(ALFA, DELTA, VK, LK, QK, AK3(1), XSI, USK12)
USK23(1) = US1(1) + BETA * AK2(1) + TEC * AK3(1)
DO 70 L5 = 2, P - 1
CALL AGOT(ALFA, DELTA, VK, LK, AK3(L5), L5, XSI, USK12)
70 USK23(L5) = US1(L5) + BETA * AK2(L5) + AK3(L5) * TEC
CALL ALIM(ALFA, DELTA, U, X, VK, LK, P, AK3(P), XSI, USK12)
USK23(P) = US1(P) + BETA * AK2(P) + TEC * AK3(P)
DO 80 L6 = P + 1, N + 1
CALL ENRI(ALFA, DELTA, VK, LK, AK3(L6), L6, XSI, USK12)
80 USK23(L6) = US1(L6) + BETA * AK2(L6) + TEC * AK3(L6)
CALL COND(ALFA, DELTA, VK, LK, N, PK, AK3(N+2), XSI, USK12)
USK23(N+2) = US1(N+2) + BETA * AK2(N+2) + TEC * AK3(N+2)
C
C CALCULO DE K4R / U NUEVA
C
CALL REHE(ALFA, DELTA, VK, LK, QK, AK4(1), XSI, USK23)
US1(1) = US1(1) + (AK1(1) + AK4(1)) / 6. + GAMMA * AK2(1) / 3. + TEC *
14 * AK3(1) / 3.

```

```

DO 90 L7=2, P-1
CALL AGCT(ALFA, DELTA, VK, LK, AK4(L7), L7, XSL, USK23)
US1(L7)=US1(L7)+(AK1(L7)+AK4(L7))/6.+GAM*AK2(L7)/3.+
1+TEC*AK3(L7)/3.
90 CONTINUE
CALL ALIM(ALFA, DELTA, UP, KP, VK, LK, P, AK4(P), XSL, USK23)
US1(P)=US1(P)+(AK1(P)+AK4(P))/6.+GAM*AK2(P)/3.+
1+TEC*AK3(P)/3.
DO 95 L8=P+1, N+1
CALL ENRI(ALFA, DELTA, VK, LK, AK4(L8), L8, XSL, USK23)
US1(L8)=US1(L8)+(AK1(L8)+AK4(L8))/6.+GAM*AK2(L8)/3.+
1+TEC*AK3(L8)/3.
95 CONTINUE
CALL COND(ALFA, DELTA, VK, LK, N, PK, AK4(N+2), XSL, USK23)
US1(N+2)=US1(N+2)+(AK1(N+2)+AK4(N+2))/6.+GAM*AK2(N+2)/3.+
1+TEC*AK3(N+2)/3.
USP=US1(N+2)
IF(TI.LT.T) GO TO 800
DO 19 LX=1, N+2
19 PRINT*, P, XSL(LX), US1(LX)
700 CONTINUE
STOP
END

SUBROUTINE REHE(ALFA, DELTA, VK, LK, PK, AK, XS, US)
DIMENSION AS(50), US(50)
AK=DELTA/VK*((LK+1.)*(US(2)+XS(2))-(LK-VK+1.+VK*ALFA/
1(1.+(ALFA-1.)*(US(1)+AS(1))))*(US(1)+AS(1)))
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE AGOE(ALFA,DELTA,VK,LK,AK,L1,KS,US)
DIMENSION KS(50),US(50)
AK=(VK*ALFA*((US(L1-1)+KS(L1-1))/(1.+(ALFA-1.)*(US(L1-1)
1+KS(L1-1)))-(US(L1)+KS(L1))/(1.+(ALFA-1.)*(US(L1)+
1KS(L1)))+(LK+1.)*((US(L1+1)+KS(L1+1))-(US(L1)+KS(L1))))
1*DELTA
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE ALM(ALFA,DELTA,UP,KP,VK,LK,P,AK,KS,US)
DIMENSION KS(50),US(50)
AK=DELTA*(VK*ALFA*((US(P-1)+KS(P-1))/(1.+(ALFA-1.)
1*(US(P-1)+KS(P-1)))-(US(P)+KS(P))/(1.+(ALFA-1.)*(US(P)
1+KS(P))))+LK*(UP(P+1)+KS(P+1))-(LK+1.)*(US(P)+KS(P)
1+KS(P)))+(UP*(K))
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE ENMI(ALFA,DELTA,VK,LK,AK,L2,KS,US)
DIMENSION KS(50),US(50)
AK=DELTA*(VK*ALFA*((US(L2-1)+KS(L2-1))/(1.+(ALFA-1.)
1*(US(L2-1)+KS(L2-1)))-(US(L2)+KS(L2))/(1.+(ALFA-1.)
1*(US(L2)+KS(L2))))+LK*((US(L2+1)+KS(L2+1))-
1(US(L2)+KS(L2)))
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE COND( ALFA, DELTA, VK, LK, H, PK, AK, CS, US)
  DIMENSION KS(50), US(50)
  WK=DELTA*VK/PK*(ALFA*(US(N+1)+KS(N+1)))/(1.+(ALFA-1.)
  1*(US(N+1)+KS(N+1)))-(US(N+2)+KS(N+2)))
  RETURN
END

```

```

C  EVALUACION DE TIEMPOS DE ESTABILIZACION DE COLUMNAS DE
C  DESTILACION BINARIA BAJO LA ACCION DE UNA PERTURBACION
C  EN LA COMPOSICION DE ALIMENTACION (O EN EL REFLUJO
C  (SISTEMA LINEARIZADO)
C
  DIMENSION US1(50), USK1(50), USK12(50), USK23(50), AK1(50),
  1AK2(50), AK3(50), AK4(50), KS1(50)
  READ/, ALFA, DELTA, UF, DLK
  READ LK
  INTEGER F
  DATA F, VK, LK, PK, QK, I, KF, KS1/5, 1.75, 1.3125, 15., 15., 10,
  1.45, .023520, .064558, .152450, .293775, .453714, .571871,
  1.765454, .093223, .950521, .903462, .994131, .998330, 38*0.0/
  PRINT*/, H, ALFA, DELTA, UF, KF, VK, LK, QK, PK, F, DLK
  T=0.0
  TI=0.0
  DO 15 LL=1, N+2
  15 US1(LL)=0.0
  DO 700 T=2, 10, 2
  800 TI=TI+DELTA

```

9

C CALCULO DE K1R

C

```

CALL GBHE(ALFA,DELTA,VK,LK,DLK,K,K1(1),KSI,US1)
USK1(1)=US1(1)+K1(1)/2.
DO 30 L1=2,P-1
CALL AGOT(ALFA,DELTA,VK,LK,DLK,K1(L1),L1,KSI,US1)
30 USK1(L1)=US1(L1)+K1(L1)/2.
CALL LHM(ALFA,DELTA,UF,KF,VK,LK,DLK,P,K1(P),KSI,US1)
USK1(P)=US1(P)+K1(P)/2.
DO 40 L2=P+1,N+1
CALL BKRI(ALFA,DELTA,VK,LK,DLK,K1(L2),L2,KSI,US1)
40 USK1(L2)=US1(L2)+K1(L2)/2.
CALL BODD(ALFA,DELTA,VK,LK,DLK,P,K,K1(P+2),KSI,US1)
USK1(N+2)=US1(N+2)+K1(N+2)/2.

```

C

C CALCULO DE K2R

C

```

DEF1=.2071067614
FAM=.2923932185
CALL GBHE(ALFA,DELTA,VK,LK,DLK,K,K2(1),KSI,USK1)
USK12(1)=US1(1)+DEF1*K1(1)+FAM*K2(1)
DO 50 L3=2,P-1
CALL AGOT(ALFA,DELTA,VK,LK,DLK,K2(L3),L3,KSI,USK1)
50 USK12(L3)=US1(L3)+DEF1*K1(L3)+FAM*K2(L3)
CALL LHM(ALFA,DELTA,UF,KF,VK,LK,DLK,P,K2(P),KSI,USK1)
USK12(P)=US1(P)+DEF1*K1(P)+FAM*K2(P)
DO 60 L4=P+1,N+1
CALL BODD(ALFA,DELTA,VK,LK,DLK,K2(L4),L4,KSI,USK1)
60 USK12(L4)=US1(L4)+DEF1*K1(L4)+FAM*K2(L4)

```

CALL COND(DELTA,DELTA,VA,DK,DLK,N,FK,AK2(N+2),KSI,USK1)  
 USK12(N+2)=US1(N+2)+\*ETA \*K1(N+2)+\*GAMA \*K2(N+2)

C

C

CALCULO DE K2R

C

ETA=-.7071067812

TBC=1.7071067810

CALL REHE(DELTA,DELTA,VA,DK,DLK,K,AK3(1),KSI,USK12)  
 USK23(1)=US1(1)+ETA \*K2(1)+TBC \*K3(1)

DO 70 L5=2,3-1

CALL REOT(DELTA,DELTA,VA,DK,DLK,AK3(L5),L5,KSI,USK12)

70 USK23(L5)=US1(L5)+ETA \*K2(L5)+TBC \*K3(L5)

CALL ALIN(DELTA,DELTA,VA,KA,VA,DK,DLK,F,AK3(F),KSI,USK12)  
 USK23(F)=US1(F)+ETA \*K2(F)+TBC \*K3(F)

DO 80 L6=F+1,N+1

CALL ENRI(DELTA,DELTA,VA,DK,DLK,AK3(L6),L6,KSI,USK12)

80 USK23(L6)=US1(L6)+ETA \*K2(L6)+TBC \*K3(L6)

CALL COND(DELTA,DELTA,VA,DK,DLK,N,FK,AK3(N+2),KSI,USK12)  
 USK23(N+2)=US1(N+2)+ETA \*K2(N+2)+TBC \*K3(N+2)

C

C

CALCULO DE K4R Y U \*UEVA

C

CALL REHE(DELTA,DELTA,VA,DK,DLK,K,AK4(1),KSI,USK23)  
 US1(1)=US1(1)+(-K1(1)+AK4(1))/6.+\*GAMA \*K(1)/3.+

1TBC \*K3(1)/3.

DO 90 L7=2,3-1

CALL REOT(DELTA,DELTA,VA,DK,DLK,AK4(L7),L7,KSI,USK23)

US1(L7)=US1(L7)+(-K1(L7)+AK4(L7))/6.+\*GAMA \*K2(L7)/3.+  
 1AK3(L7) TBC/3.

90 CONTINUE

CALL ALIN(DELTA,DELTA,VA,VA,VA,DK,DLK,F,AK4(F),KSI,USK23)

```

      CALL SUBR(ALFA,DELTA,US,J,KF,VK,LK,DLK,F,KK4(F),KS1,USK21)
      US1(F)=US1(F)+(KK1(F)+KK4(F))/6.+GAMA*KK2(F)/3.+
      1993*KK3(F)/3.
      DO 95 LB=J-1,N+1
      CALL SUBR(ALFA,DELTA,VK,LK,DLK,AK4(LB),LB,KS1,USK23)
      US1(LB)=US1(LB)+(KK1(LB)+KK4(LB))/6.+GAMA*KK2(LB)/3.+
      1993*KK3(LB)/3.
95 CONTINUE
      CALL COND(ALFA,DELTA,VK,LK,DLK,N,KK,AK4(N+2),KS1,USK23)
      US1(N+2)=US1(N+2)+(KK1(N+2)+KK4(N+2))/6.+
      19GAMA*KK2(N+2)/3.+1993*KK3(N+2)/3.
      USF=US1(N+2)
      IF(TI.LT.T) GO TO 600
C      DO 19 LK=1,N+2
C      19 PRINT /,T,US1(LK),US1(LK)
      PRINT /,T,USF
700 CONTINUE
      STOP
      END
C
SUBROUTINE ALIK(ALFA,DELTA,US,KF,VK,LK,DLK,F,KK,KS,US)
DIMENSION KS(50),US(50)
KK=DELTA*(VK*ALFA*US(F-1))/(1.+(ALFA-1.)*KS(F-1)) 2
1-US(F)/(1.+(ALFA-1.)*KS(F)) 2+LK*US(F+1)-(LK+1.)
1 US(F)+USF+(KS(F+1)-KS(F))*DLK)
RETURN
END

```

9

```

SUBROUTINE REMO( ALFA, DELTA, VK, LK, DLK, N, K, CS, US)
  DIMENSION KS(50), US(50)
  K=DELTA/OK*(LK+1)*US(L)- (LK-VK+1.+VK*ALFA/(1.+
  1*(ALFA-1.))*KS(L)+*2)*US(L)+(KS(L)-KS(L))*DLK)
  RETURN
END

```

3

```

SUBROUTINE REOT( ALFA, DELTA, VK, LK, DLK, N, L1, KS, US)
  DIMENSION KS(50), US(50)
  K=DELTA*(LK+1)*US(L1+1)- (LK+1.+VK*ALFA/(1.+(ALFA-1.))
  1*KS(L1))*2)*US(L1)+VK*ALFA*US(L1-1)/(1.+(ALFA-1.))
  1*KS(L1-1))*2+(KS(L1+1)-KS(L1))*DLK)
  RETURN
END

```

3

```

SUBROUTINE REKI( ALFA, DELTA, VK, LK, DLK, N, L2, KS, US)
  DIMENSION KS(50), US(50)
  K=DELTA*(VK*ALFA*US(L2-1)/(1.+(ALFA-1.))*KS(L2-1))*2
  1-US(L2)/(1.+(ALFA-1.))*KS(L2))*2+LK*(US(L2+1)-US(L2))
  1+(KS(L2+1)-KS(L2))*DLK)
  RETURN
END

```

3

```

SUBROUTINE REO( ALFA, DELTA, VK, LK, DLK, N, PK, OK, KS, US)
  DIMENSION KS(50), US(50)
  K=DELTA*VK/OK*(ALFA*US(N+1)/(1.+(ALFA-1.))
  1*KS(N+1))*2-US(N+2))
  RETURN
END

```

Tabla 8. Solución obtenida con los diferentes métodos para  $U_{\lambda+2}/U_{\lambda}$  a  $\alpha=3.5$  y  $N=10$ .

T	MV	ML	MNL	MNL	MNL	MNL
			$U_{\lambda}=10^{-4}$	$U_{\lambda}=0.001$	$U_{\lambda}=0.01$	$U_{\lambda}=0.1$
20	0.00624	0.00647	0.00931	0.00702	0.00649	0.00647
40	0.01637	0.01655	0.02062	0.01750	0.01540	0.00754
60	0.02495	0.02509	0.03003	0.02619	0.02158	0.00844
80	0.03175	0.03186	0.03754	0.03273	0.02550	0.00870
100	0.03703	0.03717	0.04294	0.03773	0.02812	0.00878
140	0.04447	0.04452	0.05065	0.04442	0.03036	0.00893
180	0.04395	0.04393	0.05431	0.04733	0.03205	0.00884
220	0.05166	0.05163	0.05723	0.04994	0.03259	0.00884
260	0.05331	0.05332	0.05379	0.05110	0.03234	0.00884
300	0.05431	0.05431	0.05953	0.05175	0.03295	0.00884

Tabla 9. Solución obtenida con los diferentes métodos para  $U_{\lambda+2}/(\lambda-\lambda_0)$  a  $\alpha=3.5$  y  $N=10$ .

T	MV	ML	MNL	MNL	MNL	MNL
			$\lambda-\lambda_0=0.0001$	0.001	0.01	0.1
20	0.00491	0.00902	0.01135	0.00955	0.00335	0.00533
40	0.01740	0.01931	0.02332	0.02023	0.01775	0.00857
60	0.03065	0.02760	0.03247	0.02359	0.02303	0.00931
80	0.04172	0.03411	0.03952	0.03491	0.02730	0.00952
100	0.05050	0.03919	0.04439	0.03964	0.02974	0.00958
140	0.05270	0.04322	0.05210	0.04535	0.03220	0.00961
180	0.07011	0.05049	0.05027	0.04933	0.03341	0.00964
220	0.07430	0.05303	0.05359	0.05130	0.03391	0.00952
260	0.07732	0.05404	0.06009	0.05240	0.03413	0.00962
300	0.07797	0.05559	0.06090	0.05303	0.03423	0.00952

Tabla 10. Solución obtenida con los diferentes métodos para

$$U_{N+2}/U_2 \text{ a } \alpha=2.5 \text{ y } N=10.$$

T	MV	ML	MLL	MNL	MGL	MNL
		$U_2=0.0001$				
			0.0001	0.001	0.01	0.1
20	0.03234	0.07364	0.07316	0.08070	0.07224	0.05763
40	0.21260	0.20960	0.21093	0.21399	0.20032	0.11576
60	0.32202	0.31996	0.32200	0.32422	0.29430	0.14123
80	0.40623	0.40473	0.40542	0.40736	0.36130	0.15152
100	0.45930	0.45719	0.45785	0.46042	0.40561	0.15576
140	0.55166	0.55006	0.54797	0.54513	0.45734	0.15310
180	0.59505	0.59472	0.59004	0.58559	0.48252	0.15399
200	0.61921	0.61904	0.61239	0.60536	0.49432	0.15315
260	0.63237	0.63223	0.62425	0.61637	0.50001	0.15219
300	0.63954	0.63946	0.63055	0.62397	0.50275	0.15220

Tabla 11. Solución obtenida con los diferentes métodos para

$$U_{N+2}/(l-l_s) \text{ a } \alpha=2.5 \text{ y } N=10.$$

T	MV	ML	MLL	MNL	MGL	MNL
		$l-l_s=0.0001$				
			0.0001	0.001	0.01	0.1
20	0.12330	0.10339	0.10236	0.10530	0.10105	0.07352
40	0.29333	0.23241	0.23269	0.23553	0.22069	0.12641
60	0.44663	0.33536	0.33627	0.33847	0.30320	0.14333
80	0.55107	0.41333	0.41396	0.41502	0.36395	0.15692
100	0.54637	0.47139	0.47109	0.47099	0.41055	0.15016
140	0.75763	0.54514	0.54337	0.54123	0.45751	0.13239
180	0.81305	0.53631	0.53130	0.53321	0.45134	0.10200
200	0.85096	0.50957	0.50220	0.50763	0.49225	0.16239
260	0.86337	0.52114	0.51304	0.50794	0.49751	0.10291
300	0.87362	0.52772	0.51379	0.51335	0.50005	0.10292

Tabla 12. Solución obtenida con los diferentes métodos para  $U_{i+2}/U_i$  a  $\alpha=1.5$  y  $N=10$ .

T	NV	ML	MFL	MIL	MNL	MNL
		$U_2=0.0001$				
			0.001	0.001	0.01	0.1
20	0.26365	0.26365	0.32444	0.27714	0.27058	0.25038
40	0.55769	0.55769	0.64600	0.57024	0.55705	0.51258
60	0.74723	0.74723	0.85321	0.76037	0.74251	0.65754
80	0.86731	0.86731	0.98293	0.88093	0.85939	0.75105
100	0.94211	0.94211	1.08267	0.95520	0.93125	0.80450
140	1.01611	1.01611	1.14113	1.02817	1.00167	0.85524
180	1.04341	1.04341	1.16971	1.05452	1.02727	0.87243
220	1.05335	1.05335	1.17999	1.06442	1.03646	0.87625
260	1.05694	1.05694	1.18367	1.06735	1.03975	0.87924
300	1.05824	1.05824	1.18495	1.06805	1.04092	0.88005

Tabla 13. Solución obtenida con los diferentes métodos para  $U_{i+2}/(i-i_0)$  a  $\alpha=1.5$  y  $N=10$ .

T	NV	ML	MFL	MIL	MNL	MNL
		$i-i_0=0.0001$				
			0.001	0.001	0.01	0.1
20	0.22556	0.22556	0.26133	0.21442	0.20858	0.19623
40	0.45742	0.45742	0.46243	0.38745	0.37813	0.35717
60	0.62932	0.62932	0.53774	0.49011	0.48501	0.46016
80	0.74617	0.74617	0.60415	0.56312	0.55115	0.52490
100	0.82201	0.82201	0.71153	0.67403	0.65913	0.62520
140	0.89967	0.89967	0.75539	0.74373	0.73125	0.69550
180	0.92906	0.92906	0.77157	0.76520	0.75570	0.72099
220	0.93999	0.93999	0.77737	0.76637	0.75993	0.72634
260	0.94343	0.94343	0.77944	0.76623	0.75832	0.72607
300	0.94525	0.94525	0.77911	0.76569	0.75850	0.72691

Tabla 14. Solución obtenida con los diferentes métodos para:

$$U_{N+2}/U_N, \quad \alpha=3.5 \text{ y } N=25.$$

T	HL	MHL	MHL	MHL	MHL
		$U_2 = 1.0001$	0.001	0.01	0.1
20	$8.01 \times 10^{-6}$	0.04907	0.00399	$4.16 \times 10^{-4}$	$4.66 \times 10^{-5}$
40	$9.16 \times 10^{-5}$	0.04605	0.00433	$5.49 \times 10^{-4}$	$1.17 \times 10^{-4}$
60	$1.72 \times 10^{-4}$	0.04703	0.00436	$6.36 \times 10^{-4}$	$1.73 \times 10^{-4}$
80	$2.10 \times 10^{-4}$	0.04730	0.00491	$6.73 \times 10^{-4}$	$1.95 \times 10^{-4}$
100	$2.24 \times 10^{-4}$	0.04736	0.00433	$6.86 \times 10^{-4}$	$2.02 \times 10^{-4}$
140	$2.31 \times 10^{-4}$	0.04733	0.00494	$6.92 \times 10^{-4}$	$2.05 \times 10^{-4}$
180	$2.31 \times 10^{-4}$	0.04735	0.00494	$6.92 \times 10^{-4}$	$2.05 \times 10^{-4}$
220	$2.32 \times 10^{-4}$	0.04738	0.00494	$6.92 \times 10^{-4}$	$2.05 \times 10^{-4}$
260	$2.32 \times 10^{-4}$	0.04733	0.00494	$6.92 \times 10^{-4}$	$2.05 \times 10^{-4}$
300	$2.32 \times 10^{-4}$	0.04733	0.00494	$6.92 \times 10^{-4}$	$2.05 \times 10^{-4}$

Tabla 15. Solución obtenida con los diferentes métodos para:

$$U_{N+2}/(\ell - \ell_5), \quad \alpha=3.5 \text{ y } N=25.$$

T	HL	MHL	MHL	MHL	MHL
		$\ell - \ell_5 = 1.0001$	0.001	0.01	0.1
20	$2.93 \times 10^{-4}$	0.04010	0.00447	$3.79 \times 10^{-4}$	$2.31 \times 10^{-4}$
40	$6.27 \times 10^{-4}$	0.04553	0.00521	0.00102	$3.42 \times 10^{-4}$
60	$3.01 \times 10^{-4}$	0.04770	0.00547	0.00113	$3.69 \times 10^{-4}$
80	$3.69 \times 10^{-4}$	0.04795	0.00550	0.00122	$3.74 \times 10^{-4}$
100	$3.93 \times 10^{-4}$	0.04802	0.00553	0.00125	$3.75 \times 10^{-4}$
140	$3.04 \times 10^{-4}$	0.04804	0.00550	0.00125	$3.75 \times 10^{-4}$
180	$3.05 \times 10^{-4}$	0.04804	0.00550	0.00125	$3.75 \times 10^{-4}$
220	$3.05 \times 10^{-4}$	0.04804	0.00550	0.00125	$3.75 \times 10^{-4}$
260	$3.05 \times 10^{-4}$	0.04804	0.00550	0.00125	$3.75 \times 10^{-4}$
300	$3.05 \times 10^{-4}$	0.04804	0.00550	0.00125	$3.75 \times 10^{-4}$

Tabla 16. Solución obtenida con los diferentes métodos para

$$U_{N+2}^2/U_2^2 = \alpha=2.5 \text{ y } N=5.$$

T	ML	$U_2^2 = 0.0001$			
		MNL	MNL	MNL	MNL
		0.001	0.01	0.1	0.1
20	0.00266	0.01322	0.00393	0.00295	0.00244
40	0.03199	0.04437	0.03333	0.03120	0.02305
60	0.07511	0.08923	0.07652	0.07162	0.04727
80	0.11546	0.13110	0.11665	0.10321	0.06496
100	0.14945	0.16629	0.15028	0.13607	0.07657
140	0.20005	0.21460	0.20011	0.18031	0.09834
180	0.23353	0.25316	0.23291	0.20760	0.09395
220	0.25563	0.27595	0.25447	0.22495	0.09612
260	0.27021	0.29193	0.26666	0.23533	0.09705
300	0.27993	0.29039	0.27793	0.24286	0.09744

Tabla 17. Solución obtenida con los diferentes métodos para

$$U_{N+2}^2/(l-l_0) \text{ a } \alpha=2.5 \text{ y } N=25.$$

T	ML	$l_0 = 0.0001$			
		MNL	MNL	MNL	MNL
		0.001	0.01	0.1	0.1
20	0.07173	0.03207	0.07256	0.06939	0.05151
40	0.15932	0.17176	0.16001	0.14935	0.03322
60	0.23633	0.24993	0.23507	0.21673	0.10566
80	0.29950	0.31460	0.29736	0.26302	0.11352
100	0.35117	0.36755	0.34339	0.30357	0.11704
140	0.42719	0.44505	0.42243	0.36503	0.11953
180	0.47737	0.49630	0.47111	0.39996	0.11900
220	0.51043	0.53103	0.50305	0.42166	0.11990
260	0.53232	0.55236	0.52404	0.43525	0.11992
300	0.54673	0.56705	0.53785	0.44377	0.11992

### 3.4 Comparación de resultados.

De acuerdo a las tablas 8, 10 y 12, la solución que se obtiene con el modelo vectorial es prácticamente la misma que para el modelo no lineal, en el caso de una perturbación en la composición de alimentación. Lo anterior no ocurre cuando se perturba el reflujo, existiendo diferencias entre el modelo vectorial y el lineal, según las tablas 9, 11 y 13.

Como se observa en las mismas tablas, existe una relación de proporcionalidad tanto para el caso de una perturbación en la composición de alimentación como del reflujo. Para  $N=10$ , esta relación se da para volatilidades en general, no así para  $N=25$ , donde solo se da para volatilidades de 2.5 e inferiores. Estas relaciones se cumplen solo para perturbaciones pequeñas e inferiores a 0.01.

Las ecuaciones que rigen las relaciones de proporcionalidad se dan a continuación:

$$U_{N+2}/U'_{N+2} = U_F/U'_F$$

$$U_{N+2}/U'_{N+2} = (k - k_g)/(k - k_s)'$$

donde : ' = indica solución del modelo lineal.

Las abreviaciones dadas en las tablas 8-17 son:

MV=modelo vectorial

ML=modelo lineal

MNL=modelo no lineal

## CONCLUSION

Se puede decir que el arranque (reflujo total) constituye un sexto nivel de simplificación, al cual aún es posible evaluar modelos analíticos linearizando los modelos originales no lineales. Para otros niveles más complicados, esta tarea se vuelve muy difícil, si no imposible. Por lo tanto, los modelos linearizados solo serán de utilidad para fines cualitativos (predicción de comportamiento y estabilidad dinámicos) y no cuantitativos, ya que como se vió, su rango de validez es bastante estrecho. La mejor alternativa para fines cuantitativos es el análisis de la información proporcionada por los modelos no lineales, observando el efecto de los diferentes parámetros sobre el comportamiento dinámico, para después proceder a determinar alguna relación existente entre ellos. En este trabajo, por ejemplo, se determinaron relaciones de proporcionalidad entre la composición y la volutilidad relativa, que abarcan rangos de validez considerablemente más grandes que las predicciones de los sistemas linearizados. A pesar de que requieren de una evaluación numérica, disminuyen grandemente el trabajo computacional.

## Notación.

$\bar{A}$  = matriz del sistema (arranque o edo. est. perturbado).

$F$  = flujo másico de alimentación.

$f$  = función cualquiera.

$H$  = retención líquida.

$H_c$  = retención líquida del condensador.

$H_r$  = retención líquida del rehervidor.

$h$  = entalpía.

$L$  = flujo másico líquido.  $\lambda = L/F$

$P = H_c/H$

$Q = H_r/H$

$s$  = parámetro de la transformada de Laplace.

$T$  = tiempo adimensionalizado.

$t$  = tiempo.

$u$  = energía interna.

$V$  = flujo de vapor másico.  $v = V/F$

$X$  = concentración líquida o vector de concentraciones.

$Y$  = concentración de vapor.

## Letras griegas:

$\alpha$  = volatilidad relativa.

## Subscriptos:

$f$  = plato de alimentación.

$i$  = componente  $i$ .

$in$  = inicial.

$m$  = plato en la sección de agotamiento.

$n$  = plato en la sección de enriquecimiento.

## BIBLIOGRAFIA

1. Abramowitz, M., and I. A. Stegun, "Handbook of Mathematical Functions", Dover Publications, New York, (1972).
2. Acrivos, A., and N. R. Amundson, "Applications of Matrix Mathematics to Chemical Engineering Problems", *Ind. Eng. Chem.*, 47, 1533, (1955).
3. Amundson, N. R., "Mathematical Methods in Chemical Engineering", Prentice Hall, Englewood Cliffs, New York, (1966).
4. Berg, C., and I. James, *Chem. Eng. Prog.*, 49, 307, (1948).
5. Conte, S. D., and C. Boor, "Análisis Numérico", McGraw-Hill, México, (1962).
6. Davidson, J. F., *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 34, 44, (1956).
7. Davison, E. J., "The Numerical Solution of Large Systems of Linear Differential Equations", *AIChE J.*, 14, 46, (1968).
8. Doherty, M. F., and J. D. Perkins, "On the Dynamics of Distillation Processes - IV", *Chem. Eng. Sci.*, 37, 381, (1982).
9. Douglas, J. M., "Process Dynamics and Control", Prentice-Hall, New Jersey, (1980).
10. Franks, R. G. E., "Modeling and Simulation in Chemical Engineering", Wiley-Interscience, New York, (1972).
11. Himmelblau, D. M., and K. B. Bischoff, "Process Analysis and Simulation", J. Wiley and Sons, U. S. A., (1968).
12. Jackson, R. F., and R. L. Pigford, "Rate of Approach to Steady State by Distillation Column", *Ind. Eng. Chem.*, 48, 1020, (1956).
13. Lapidus, L., and N. R. Amundson, "Stagewise Absorption and Extraction Equipment", *Ind. Eng. Chem.*, 42, 1071, (1950).
14. Luyben, W. L., "Process Modeling, Simulation, and Control for Chemical Engineers", McGraw-Hill, (1981).

15. Mah, R., S. Michaelson, and R. Sarrent, Chem. Eng. Sci., 17, 619, (1962).
16. Marshall, L., and R. L. Pigford, "The Applications of Differential Equations to Chemical Engineering Problems", University of Delaware, Delaware, (1947).
17. Mizuno, H., Y. Watanabe, Y. Nishimura, and K. Matsubara, "Asymmetric Properties of Continuous Distillation Column Dynamics", Chem. Eng. Sci., 27, 129, (1972).
18. Morris, G. G., and W. Y. Svrcek, "Dynamic Simulation of Multicomponent Distillation", The Can. J. of Chem. Eng., 59, 382, (1981).
19. Osborne, A., "The Calculation of Unsteady State Multicomponent Distillation Using Partial Differential Equations", AIChE J., 17, 696, (1971).
20. Pratt, C., "Countercurrent Separation Processes", Elsevier Publ. Co., New York, (1967).
21. Rose, A., C. L. Johnson, and T. J. Williams, "Transients and Equilibration Time in Continuous Distillation", Ind. Eng. Chem., 48, 1176, (1956).
22. Thomas, J. T., "Dynamic Simulation of Multicomponent Distillation Processes", Ind. Eng. Chem. Proc. Dev., 20, 166, (1981).
23. Weigand, W. A., A. K. Jhavar, and T. J. Williams, "Calculations Methods for the Response Time to Step Inputs for Approximate Dynamics Models of Distillation Columns", AIChE J., 18, 1243, (1972).